

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

Anderson Alexandre Vieira Gomes

Transporte Quântico de Carga, Spin e Calor em
Nanoestruturas Caóticas

João Pessoa

18 de março de 2016

G633t Gomes, Anderson Alexandre Vieira.
Transporte quântico de carga, spin e calor em
nanoestruturas caóticas / Anderson Alexandre Vieira Gomes.-
João Pessoa, 2016.
83f. : il.
Orientador: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN
1. Física. 2. Matrizes aleatórias. 3. Física mesoscópica.
4. Transporte quântico. 5. Espalhamento de sistemas.
6. Médias - correlações - correlatores.

UFPB/BC

CDU: 53(043)



Ata da Sessão Pública da Defesa de
Dissertação de **Mestrado** do aluno **Anderson
Alexandre Vieira Gomes**, candidato ao Título
de Mestre em Física na Área de Concentração
Física da Matéria Condensada.

CCEN

1 Aos dezoito dias do mês de março do ano de dois mil e dezesseis, às 10h00, na sala de
2 reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da
3 Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
4 constituída para examinar o candidato ao grau de Mestre em Física na área de Física da
5 Matéria Condensada, **Anderson Alexandre Vieira Gomes**. A comissão examinadora
6 composta pelos professores doutores: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
7 (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Dionísio Bazeia Filho
8 (DF/UFPB) e Anderson Luiz da Rocha e Barbosa (UFRPE). Dando início aos trabalhos,
9 o Prof. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos comunicou aos presentes a finalidade da
10 reunião. A seguir, passou a palavra o candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a
11 exposição do trabalho de dissertação intitulado "*Transporte quântico de carga, spin e*
12 *calor em nanoestruturas caóticas*". Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela
13 Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: "**aprovado**". Assim sendo, deve a
14 Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na
15 forma da lei. E para constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, servindo de Secretário,
16 lavrei a presente ata que vai assinada por mim mesmo e pelos membros da Banca
17 Examinadora. João Pessoa, **18 de março de 2016**.

18

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos

Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Dionísio Bazeia Filho

Dionísio Bazeia Filho
UFPB

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa

Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
UFRPE

Danilo Wilson Lemos Menezes

Danilo Wilson Lemos Menezes
Secretário



Anderson Alexandre Vieira Gomes

Transporte Quântico de Carga, Spin e Calor em Nanoestruturas
Caóticas

Dissertação de mestrado apresentada ao departamento de física da Universidade Federal da Paraíba para obtenção do título de mestre em física

Área de concentração: Matéria Condensada

Orientador: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos.

João Pessoa

18 de março de 2016

Agradecimentos

A minha esposa, Patrícia, por tanto torcer e me proporcionar tranquilidade para concluir esta etapa. Para você a metade de todo meu amor.

Ao meu filho, Perseu, por tanto torcer e me proporcionar tranquilidade para concluir esta etapa. Para você a outra metade de todo meu amor.

Ao meu orientador, Jorge Gabriel, por quem guardo uma profunda admiração.

Ao meu primeiro orientador, Adelsindo Liberato de Brito (*in memoriam*), por tudo que ele representa para mim.

A minha mãe, por sê-la.

Ao meu pai, por sê-lo.

Ao Professor e amigo, Carlos Pires, por sempre ter me incentivado à retomada de minha carreira acadêmica.

Ao meu amigo Erick, pelo apoio e por sua amizade.

Aos meus amigos, Matheus e Rodolfo, pela amizade e paciência em dividir o ambiente de estudo comigo.

A Seu Mariano, pelas palavras de incentivo e pelos momentos de descontração e alegria proporcionados por ele sempre que vou tomar um café.

A todos os funcionários e professores da UFPB.

Ao Divino que, mesmo incompreendido por tantos, não se deixa de fazer presente para todos.

Que meus ideais sejam tanto mais fortes quanto maiores forem os desafios,
mesmo que precise transpor obstáculos aparentemente intransponíveis.
Porque metade de mim é feita de sonhos e a outra metade de lutas.

Vladimir Maiakóvski

Resumo

A formulação matricial de Landauer-Büttiker é uma das principais ferramentas utilizadas na física mesoscópica para descrever sistemas que guardam consigo semelhanças com os sistemas nucleares, no que diz respeito às possíveis ressonâncias apresentadas nos decaimentos desses sistemas quando bombardeados. Neste trabalho, estudamos a teoria de matrizes aleatórias como forma de justificar as condições de continuidade e de contorno que os sistemas mesoscópicos apresentam no transporte de carga elétrica. A seguir, levamos as condições do sistema à escala adequada e aplicamos as ideias da formulação matricial do espalhamento para deduzir a fórmula de Mahaux-Weindermüller e encontrar a estrutura da matriz de espalhamento de sistemas que se encontram na escala de comprimento em questão. De posse da matriz de espalhamento, analisamos as condições do transporte quântico da carga elétrica para sistemas à temperatura nula. A seguir, podemos ampliar o alcance de nossa análise investigando os sistemas onde a temperatura deixa de ser nula, acarretando o surgimento de efeitos não convencionais de transporte, como o que acontece no efeito Seebeck de spins, por exemplo. Na sequência, utilizamos uma implementação numérica de matrizes aleatórias que representam os ensembles de Wigner para recuperar resultados específicos de referências que apresentam resultados relacionados com este trabalho. Esta foi a forma de testar o método aqui utilizado e demonstrar a eficácia do mesmo. Por fim, também por meio de implementações numéricas, onde foi utilizado um ensemble de 4998 matrizes aleatórias, analisamos o transporte quântico de canais de spins, fazendo a correlação dos mesmos, para constatar que, a partir de uma função geratriz, é possível encontrar os cumulantes estatísticos que nos permitem analisar os observáveis de transporte, tanto no regime semi-clássico (para o qual há um número grande de canais de espalhamento abertos), quanto no regime quântico extremo (onde número de canais de espalhamento abertos é pequeno).

Palavras Chave: Matrizes, Mesoscópica, Transporte, Aleatórias, Espalhamento, Médias, Correlações, Correlatores.

Abstract

The Landauer-Büttiker matrix formulation is one of the main tools used on the mesoscopic physics to describe systems whose behavior is the same like the nuclear ones, specially concerns to the resonances presents on the decays processes when they are bombarded. In this work, we study the random matrix theory to justify continuity conditions presents on the mesoscopic systems in charge transport phenomena. Next, we are take the systems boundary conditions in appropriate scale and we use the ideas of matricial scattering formulation to derive the Mahaux-Weindermüller formula and find the structure of the scattering matrix to systems in the length scale under consideration. With possession of this scattering matrix, we have analyzed the quantum transport conditions of electric charge for systems at null temperature. Next, we have expand our analysis investigating this systems at not null temperature, leading to emergence of unconventional effects, as happens in the spins Seebeck effect, for instance. Later, we use a random matrix numerical implementation to represents the Wigner's ensembles to take back specifics results of the same papers that presents results related to this work. This was the way to test the method and demonstrate their effectiveness. Finally, also through numerical implementation where we used an ensemble with 4998 random matrix, we have analyzed the channels quantum transport for spins, investigating their correlations to note that, starting of the generating functions, it is possible to find the statistical cumulants that allow us analyze transport observables, both in the semi classical regime (where there are larger number of the open scattering channels), as in the extreme quantum regime (where the number of the open scattering channels is small).

Key words: Matrix, Mesoscopic, Transport, Random, Scattering, Means, Correlations, Correlators.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	DESCRIÇÃO DO CENÁRIO	15
1.2	ESCALAS DE COMPRIMENTO E DE TEMPO EM CONDUTORES MESOSCÓPICOS	18
1.2.1	Cavidades balísticas mesoscópicas	19
1.2.2	Condutores mesoscópicos difusivos	19
1.3	APROXIMAÇÕES ESTATÍSTICAS PARA FLUTUAÇÕES MESOSCÓPICAS	19
1.4	O PONTO QUÂNTICO E A CONDUTÂNCIA	21
2	UMA BREVE DISCUSSÃO SOBRE CONDUTÂNCIA EM SISTEMAS CLÁSSICOS	24
2.1	NATUREZA DE UMA CORRENTE ELÉTRICA	24
2.2	DENSIDADE DE CORRENTE E EQUAÇÃO DE CONTINUIDADE	24
2.3	LEI DE OHM E CONDUTIVIDADE	26
3	A TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS	28
3.1	ENSEMBLES DE WIGNER-DYSON	29
3.2	A TEORIA DE LANDAUER - BÜTTIKER	32
3.3	FORMULAÇÃO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO PARA A FÓRMULA DE LANDAUER-BÜTTIKER	34
3.4	FORMULAÇÃO MATRICIAL DO ESPALHAMENTO	35
3.5	A MATRIZ DE ESPALHAMENTO (S) E A DEDUÇÃO DA FÓRMULA DE MAHAUX-WEINDERMÜLLER	37
4	O EFEITO SEEBECK E O TRANSPORTE DE SPINS	47
4.1	EFEITOS TERMOELÉTRICOS: PELTIER, SEEBECK E THOMSON	48
4.2	O EFEITO SEEBECK DE SPIN	49
4.2.1	O Efeito Spin-Hall Inverso (ESHI)	51
4.3	CALORITRÔNICA DE SPIN	53
4.3.1	Termoeletricidade: um pequeno resumo	53
4.3.2	Dependência termoelétrica em uma hetero estrutura metálica magnética	55
4.4	Relações de Onsager nos acoplamentos elétricos, termoelétricos e transporte de spin	57
4.4.1	As dez classes de simetria	58

4.4.2	A matriz S: simetrias e reciprocidades	60
4.4.3	Formulação geral para o problema de transporte	61
4.5	IMPLEMENTAÇÕES NUMÉRICAS: TESTE DA IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA PARA A FORMULAÇÃO DE MAHAUX-WEINDENMÜLLER	63
4.5.1	Distribuição de cumulantes de carga de um ponto quântico caótico com contatos não ideais	63
4.5.2	Picos de condutância em pontos quânticos abertos	68
4.5.3	Função de correlação generalizada para flutuações da condutância e o efeito spin hall mesoscópico	70
4.5.4	Função de correlação das flutuações da condutância com os possíveis canais de spin	74
5	CONCLUSÃO	81

Lista de Figuras

1	Modelo genérico de um ponto quântico conectado a dois guias. Figura extraída da referência [36].	17
2	Simulação das Flutuações de condutância para pontos quânticos conectados a dois guias.	20
3	Variância da taxa de transmissão T em função do índice de transmissão da barreira de tunelamento Γ , resgatado do texto original dos autores da referência [18].	22
4	Sistema clássico para o núcleo atômico no qual ele é visto como um bilhar com uma cratera de formato qualquer.	22
5	Nesta figura estão plotados dez valores das condutâncias médias em função do número de canais presentes nos guias. Nesta implementação utilizamos 1500 realizações de um ensemble contendo 4998 matrizes. Consideramos, também, 200 ressonâncias possíveis. Por uma questão de simetria, consideramos o caso ideal - taxa de transmissão 1 - e o mesmo número de canais em cada guia ($N_1 = N_2$). Vê-se o comportamento linear para a condutância média em função do número de canais nos guias.	27
6	Histograma de frequências: Ponto Quântico com dois guias. Simulação realizada com 10 canais em cada guia, 4998 realizações e 300 ressonâncias. Tem-se aproximação de uma distribuição Gaussiana.	30
7	Histograma de frequências para a condutância de um ponto quântico conectados a dois guias de forma não ideal e com taxa de transmissão $\Gamma = 2/3$	31
8	Distribuição de probabilidades através de um ponto quântico conectados a dois guias de forma não ideal e com taxa de transmissão $\Gamma = 2/3$	32
9	Sistema mesoscópico idealizado por Landauer	32
10	Potenciais nos reservatórios conectados aos guias ligados ao ponto quântico [2]	33
11	Região de interação com forma arbitrária e região de espalhamento de largura d por onde "viajam" os modos propagantes.	37
12	Variância da taxa de transmissão T em função do índice de transmissão da barreira de tunelamento Γ , resgatado do texto original dos autores da referência [18].	45
13	Variância da taxa de transmissão T em função da probabilidade de transmissão Γ . Resultado resgatado via simulação numérica	46
14	Efeito Hall sobre elétrons quando imersos em um campo magnético perpendicular à sua direção de propagação. A figura foi extraída da referência [20]	47

15	Uma corrente elétrica é forçada a passar por junções de metais diferentes, resultando em aquecimento de uma e resfriamento de outra. Figura extraída da referência [25]	48
16	Ao se conectar dois metais diferentes (ou ligas metálicas), têm-se um circuito tal que, se as junções forem mantidas em temperaturas diferentes, surgirá uma f.e.m. termoelétrica e uma corrente elétrica "i" circulará pelo chamado "par termoelétrico" ou "termopar". Figura extraída da referência [26].	49
17	Ilustração do termopar sob uma tensão elétrica gerada a partir de um gradiente de temperatura e o magneto metálico sob uma tensão de spin gerada, também, por um gradiente de temperatura. A figura foi extraída da referência [23].	50
18	Distribuição de potenciais de spin ao longo do magneto submetido a um gradiente de temperatura. A figura foi extraída da referência [23].	51
19	Movimentação da corrente de spin. Este fluxo de corrente de spin gera o ISHE. A figura foi extraída da situação [24].	52
20	Corrente de calor induzindo uma corrente de carga elétrica ao longo da direção longitudinal do gradiente de temperatura. A figura foi extraída da referência [27].	56
21	Distribuição da condutância de um ponto quântico com contatos ideais. Na figura, o número 1 ao lado da curva obtida representa o valor do número de canais provenientes do reservatório 2, enquanto que o $N_1 = 4$. A figura foi extraída da referência [36].	65
22	Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 1$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$	66
23	Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 2$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$	66
24	Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 4$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$	66
25	Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 9$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$	66
26	Dependência linear da distribuição de condutâncias para o número pequeno de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 1$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Vê-se a convergência dos pontos obtidos na simulação com o fitting.	67
27	Dependência da distribuição de condutâncias para o número de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 2$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Percebe-se aqui uma distribuição Gaussiana envolvendo os pontos obtidos na simulação.	67

28	Dependência da distribuição de condutâncias para o número de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 4$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Percebe-se aqui uma distribuição Gaussiana envolvendo os pontos obtidos na simulação.	67
29	Dependência da distribuição de condutâncias para o número de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 9$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Percebe-se aqui uma distribuição Gaussiana envolvendo os pontos obtidos na simulação.	67
30	função de transmissão da autocorrelação normalizada $\tilde{C}_\varepsilon(\delta\varepsilon)$ em função da energia $\delta\varepsilon$ pela taxa de transmissão Γ obtida na referência [36].	69
31	função de transmissão da autocorrelação normalizada $\tilde{C}_\varepsilon(\delta\varepsilon)$ em função da energia $\delta\varepsilon$ pela taxa de transmissão Γ obtida com implementação de 4200 realizações e 300 ressonâncias.	70
32	Quantum dot balístico conectado de forma ideal a quatro eletrodos, tendo uma diferença de voltagem entre os guais 1 e 2, enquanto que o ajuste feito para 3 e 4 faz com que a diferença de potencial transversal seja nula. A figura foi extraída da referência [38].	72
33	Covariância dos coeficientes de transmissão em função da diferença de energia. Figura extraída da referência [10].	73
34	Covariância dos coeficientes de transmissão em função da diferença de energia. Figura obtida a partir de uma implementação numérica com 4998 realizações e 400 ressonâncias.	74
35	Comportamento da função de Fermi em função da temperatura. A função degrau tende a uma curva Lorentziana com o aumento da temperatura.	76
36	Covariância dos coeficientes de transmissão em função da diferença de energia para diferentes projeções de spin. Figura obtida a partir de uma implementação numérica com 4998 realizações e 400 ressonâncias.	77
37	Comportamento da condutância em função do campo para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores possíveis da temperatura.	79
38	Comportamento da condutância em função de incrementos do campo para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores possíveis da temperatura.	79

39	Comportamento da condutância em função da taxa de transmissão para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores possíveis de campo em questão.	80
40	Comportamento da condutância em função da taxa de transmissão para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores de incrementos de campo diferentes.	80

Lista de Tabelas

1	Classificação das classes de ensembles segundo suas simetrias	21
2	Classificação das dez classes de simetrias para os Hamiltonianos, seguindo a nomenclatura de Cartan. Os índices 0 e ± 1 representam as simetrias quebradas e/ou preservadas, respectivamente	59

1 INTRODUÇÃO

1.1 DESCRIÇÃO DO CENÁRIO

O início dessa discussão se dá a partir do significado do prefixo meso. Do grego, o prefixo meso significa aquilo que está no meio, o que é intermediário. Trazendo o significado para os propósitos deste trabalho, diz-se que um sistema físico é mesoscópico quando sua escala de comprimento se situa entre o que se classifica como microscópico e macroscópico. Essa foi a designação criada por Kampen (1981). É por isso que, ao se analisar tais sistemas tendo em vista seu caráter microscópico, é necessário resgatar os aspectos característicos da teoria quântica, ao mesmo tempo em que, ao se considerar uma quantidade suficientemente grande de átomos, ao ponto de termos que recorrer a ferramentas da mecânica estatística para compreendê-lo. A análise estatística do transporte de elétrons, por exemplo, mesmo utilizando um caráter quântico, nos permite levá-lo à escala mesoscópica e realizar medidas de quantidades físicas comumente tratadas do ponto de vista clássico e que são fundamentais à sua descrição. É importante dizer que algumas propriedades desses sistemas não dependem de maneira essencial de sua estrutura atômica, ou tipo de material que constitui o sistema. Essas propriedades são conhecidas como propriedades universais de transporte quântico e dependem apenas das simetrias que são caracterizam o sistema em questão.

Nos tempos atuais, a física da matéria condensada vem ganhando uma variedade muito grande de observações de novos efeitos quânticos a partir da análise e descrição de sistemas nessa escala de comprimento. Daí a importância de estudá-los de maneira mais incisiva. Portanto, para descrever um sistema na escala mesoscópica é necessária a adoção de parâmetros que o caracterizem bem. Porém, devido aos limites que separam seu caráter microscópico do macroscópico, é preciso que tenhamos um olhar mais cauteloso no que se refere às conclusões que se pode tirar com respeito aos fenômenos que neles ocorrem e que se deseja analisar.

Uma das técnicas que se pode adotar à descrição de um sistema mesoscópico é considerar o caminho livre médio de um elétron, l_e , em um meio cuja escala encontra-se dentro dos limites já citados e compará-lo com o comprimento característico, L , do sistema. Sabe-se que o espalhamento de um elétron se dá a partir de sua interação com outro elétron, com fronteiras de uma região onde ele está localizado ou com frentes de ondas emitidas por agentes externos à região onde o mesmo se encontra. Tais interações são capazes de modificar o seu sentido de propagação. Considerando que l_e é a distância que o elétron percorre entre dois espalhamentos consecutivos, sem que haja alterações em sua energia cinética, os sistemas onde ocorre de $l_e > L$ serão chamados de **balísticos**. Caso contrário, quando ocorrer de $l_e < L$, o sistema será chamado de **difusivo**. Bons exemplos de espalhamentos quânticos por sistemas de muitos corpos podem ser encontrados na física nuclear, onde as regiões de espalhamento se situam em escalas de comprimento da ordem de poucos Fermis ($10^{-15}m$). Os estudos dentro da área que resultaram na descoberta de ressonâncias de núcleos compostos foram realizados antes dos anos 30 do século passado [1].

Alguns sistemas quânticos simples guardam características semelhantes com problemática abordada na física nuclear de sistemas de muitos corpos [14]. Portanto, a partir de resultados já conhecidos naquele campo, foi possível se construir uma adaptação para os sistemas mesoscópicos de forma que se pudesse compreender a sua dinâmica por simples

analogia com os procedimentos adotados à física nuclear. Porém, ao contrário dos sistemas naquele campo, os sistemas mesoscópicos são mais gerais uma vez que nos oferece a possibilidade de controle dos fenômenos abordados em sua utilização. Sendo assim, a questão fundamental é entender como a dinâmica clássica pode influenciar nas propriedades quânticas destes “novos” sistemas. Entretanto, ao contrário do que ocorre na física nuclear, é possível realizar simulações numéricas para os tais sistemas e - para que se possa fazer uma leitura estatística dos resultados dos resultados observados - constatar que eles estão intimamente relacionados aos resultados obtidos nos estudos de decaimento de núcleos em sistemas nucleares. O problema fundamental a ser tratado, portanto, é o espalhamento dos nucleons. Em particular, dois tipos de espalhamentos podem ser estudados a partir da criação de ensembles de sistemas semelhantes criados artificialmente. A saber, o transporte de elétrons através de microestruturas conhecidas como pontos quânticos balísticos de comprimentos da ordem de $1\mu m$ e o espalhamento de micro ondas através de cavidades metálicas, com dimensões da ordem de $0,1m$.

Nos anos 50 do século passado, Feshbach, Porter and Weisskopf [1] criaram um modelo chamado de modelo óptico do núcleo que funciona bem para um conjunto muito grande de energias. Esse modelo também descreve processos de reações químicas de maneira eficiente, o que nos permite trazer o tratamento dado por construção à escala nuclear para uma escala de comprimento compatível com o tamanho de uma molécula. Na abordagem dada pelos autores deste trabalho, o espalhamento de um nucleon é descrito em função das seguintes escalas de tempo:

- a) uma resposta de prompt proveniente de um processo direto, no qual uma partícula incidente fica sob a ação do campo eletromagnético produzido por outras partículas. Tal resposta é descrita matematicamente em termos do espalhamento médio das amplitudes em um intervalo de energia situado em torno de uma energia E . Essa média de amplitudes é conhecida como amplitude óptica e mostra uma variação mais lenta de que a variação sobre a energia original;
- b) uma resposta de atraso que corresponde à formação e decaimento de núcleos compostos. Esta resposta é descrita pela diferença entre as amplitudes de espalhamento óptica e exata. Ela varia apreciavelmente com a energia, E , e pode ser explicada utilizando a teoria de matrizes aleatórias que será comentada mais a diante.

Uma questão técnica que envolve os sistemas mesoscópicos é a que se refere à montagem de dispositivos que apresentem as características supracitadas. Mas, se por um lado os diversos novos fenômenos previstos em análises teóricas se apresentam naturalmente na análise desses sistemas, por outro, a análise experimental exige a confecção de dispositivos extremamente sensíveis e que não são fáceis de serem encontrados na natureza, exigindo assim uma engenharia específica à sua confecção. Tais dispositivos são chamados de amostras mesoscópicas ou mesmo átomos artificiais uma vez que na observação da condutância de elétrons por estas estruturas, percebe-se o mesmo comportamento de um átomo pesado quando submetidos a processos de bombardeamento de seus núcleos. Para serem construídos seguem os seguintes processos:

- O crescimento de um cristal específico;

- A epitaxia¹ para adicionar camadas diferentes de materiais;
- Uma peça para a lateral da amostra;
- O processo de litografia².

Seguindo esses processos, confinamos elétrons em uma pequena região de forma que se comportem como um gás bidimensional em confinamento transversal ao longo da amostra. O gás, por sua vez, fica restrito a uma mesa com geometria específica e com contatos ôhmicos, além de portões de elétrons. Tal estrutura, na literatura moderna ficou conhecida como pontos quânticos (ou quantum dots, do termo original) e com elas é possível confinar alguns milhares de elétrons em uma região de dimensões aproximadas de $0,1\mu m$ a $1\mu m$. Considerando que naturalmente os elétrons se movem em três dimensões, o ponto quântico é também chamado de sistema zero dimensional.

As estruturas onde se formam o gás bidimensional, entretanto, podem ser construídas experimentalmente alternando camadas finas de GaAs (Arseneto de Gálio) e AsAlGa (Arseneto de Gálio dopado com alumínio)[4]. Por conta dessa dopagem, cria-se, na interface das duas camadas finas, o gás que permanecerá entre elas fortemente confinado. A amostra obtida oferece os princípios mais fundamentais da mecânica quântica, como por exemplo, tunelamento quântico devido à própria estrutura física da amostra que se dá devido ao contato ôhmico e dos portões de elétrons[12]; interferência quântica, mantendo-se a coerência de fase, devido à quantidade controlada de impurezas na amostra e também devido ao próprio confinamento dos elétrons na estrutura[4]; medições discretas de correntes descritas pelos cumulantes estatísticos[15, 16]; e o emaranhamento quântico entre o fluxo dessas correntes nos terminais ideais[17].

A figura [1] abaixo mostra um esquema desta estrutura.

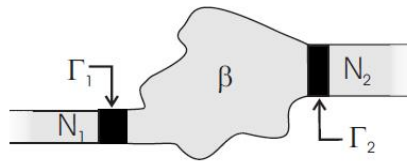


Figura 1: Modelo genérico de um ponto quântico conectado a dois guias. Figura extraída da referência [36].

As propriedades de transportes dessas estruturas são avaliadas a partir da passagem de corrente através de sua composição. Essa passagem de corrente se obtém com a aplicação de uma diferença de potencial entre seus terminais e indexa resultados importantes em sua análise que carregam intrinsecamente propriedades de caráter quântico, via conceitos que tradicionalmente são aplicados a sistemas de características clássicas, como na análise da condutância do ponto a partir da média de transmissão dos canais propagantes nos guias da estrutura.

Para se observar a quantização dos pontos quânticos é preciso que duas condições sejam satisfeitas. Em primeiro lugar, as barreiras podem ser largas o bastante ao ponto de tornar

¹Processo de crescimento de cristal, em que as camadas depositadas acompanham a orientação do cristal de substrato.

²Arte de reproduzir pela impressão de desenhos.

a transmissão muito pequena. Isto nos leva a condição de que $G \ll \frac{e^2}{h}$, o que torna o ponto quântico praticamente isolado. Em segundo lugar, a temperatura deve ser baixa o bastante para que os efeitos térmicos não se sobreponham aos efeitos quânticos.

Como forma de estimar o regime de funcionamento de um ponto quântico, vamos olhar para uma grandeza bastante útil nesta descrição: capacitância clássica média C . Desde que a energia para se adicionar um único elétron no ponto quântico é $\approx \frac{e^2}{C}$, temos a condição de que $KT \ll \frac{e^2}{C}$. Para termos ideia da ordem de grandeza, uma energia típica para o disco carregado de GaAs de raio típico $0.2\mu m$ é $E_C \ll \frac{e^2}{C} \sim 1000\mu eV$, dessa forma a condição $KT \ll \frac{e^2}{C}$ será sempre satisfeita quando a temperatura usada no experimento for baixa o suficiente para atender aos requisitos supracitados[4].

1.2 ESCALAS DE COMPRIMENTO E DE TEMPO EM CONDUTORES MESOSCÓPICOS

O termo sistema mesoscópico refere-se a sistemas onde os fenômenos de transportes acontecem mantendo a coerência de fase. Tais sistemas podem ser tratados como microestruturas nas quais a função de onda de um elétron tem sua fase mantida enquanto o mesmo interage com esta microestrutura[2]. Isto significa que o comprimento de coerência de fase quando associados a processos que podem mudar o ambiente por onde passa o elétron para um estado ortogonal é maior que o tamanho do próprio sistema. Obviamente, para que esta condição seja mantida, a microestrutura deve atender a algumas condições específicas que nos permite defini-las como tal.

Um exemplo canônico de um sistema mesoscópico é uma amostra metálica de comprimento L , mantida a temperatura suficientemente baixa. Com este sistema típico, podemos analisar as condições de escala espaço-temporal que definem e caracterizam os diferentes regimes de transporte quântico e a estatística das flutuações associadas que definem o sistema mesoscópico propriamente dito.

A principal escala de comprimento considerada em um sistema mesoscópico é o caminho livre médio de um elétron para o espalhamento elástico de um potencial aleatório. Este, em conjunto com o comprimento de onda de Fermi, $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$, para um sistema metálico randômico e com o vetor de onda de Fermi de amplitude dada por k_F , definem uma grandeza física adimensional que mede o grau de aleatoriedade do sistema: $(\frac{1}{k_F l_e})$ [1]. Da mesma forma, temos o caminho livre médio inelástico, l_{in} , devido à influência de outros elétrons, fônons e/ou outros aspectos do sistema. Ao percorrer este caminho, o elétron perde sua coerência de fase. O tempo gasto até perdê-la define a escala de tempo $\tau_{in}(l_{in})$ [1]. Levando-se em conta essas escalas, e as grandezas desta análise, pode-se definir um outro parâmetro chamado de constante de difusão que se relaciona com o tempo τ_{in} , para que possamos definir um comprimento característico, chamado de comprimento de Thouless, $L_T = \sqrt{\frac{1}{3}l_{in}l_e}$ [1], que nos informa a distância na qual a partícula é espalhada sem perder sua coerência de fase. É importante notar que levamos em consideração baixas temperaturas, para que os efeitos térmicos não sejam a principal causa desses espalhamentos. Neste caso, $l_e < L_T < l_in$.

1.2.1 Cavidades balísticas mesoscópicas

Cavidades balísticas ou pontos quânticos, ou ainda átomos artificiais, são aquelas onde o movimento dos elétrons é praticamente balístico, exceto pelas reflexões que ocorrem nas paredes da mesma. Sendo assim as próprias paredes da estrutura passam a ter um papel fundamental sob a distribuição de condução da mesma. Nestas estruturas, o tamanho e a forma podem ser controlados por tensões de entradas, como é o caso do **MOSFET** (metal oxide semiconductor field effect transistor).

Experimentalmente, uma corrente elétrica é conduzida através de um dos guias conectados à cavidade, como na figura 1, onde se produz uma queda de potencial para a qual a condutância é calculada. Considerando o modelo de apenas um elétron na cavidade, vê-se que há um o espalhamento deste elétron devido a sua interação com as paredes da cavidade. Considerando-se mais de um elétron neste processo de condução e espalhamento, tem-se um fenômeno de interferência das ondas refletidas pela cavidade. Sendo assim, podemos relacionar a condutância com o padrão de interferência dos elétrons na cavidade. Existindo razões que proporcionem a mudança no padrão de interferência, pode se analisar como consequência flutuações na medida da condutância do sistema.

1.2.2 Condutores mesoscópicos difusivos

Sabe-se que qualquer amostra contém um número de impurezas por unidade de volume que dão origem aos espalhamentos múltiplos responsáveis pelo surgimento do padrão de interferência no processo de condução de elétrons através dela. Diante disto, é razoável pensar que existe não só uma condutância média à amostra, mas, sobretudo, que existem flutuações aleatórias sobre a própria média. O que se vê de fato é que as flutuações sobre a condutância não só não excedem o valor clássico, mas também são universais e que são dominadas pelas interferências entre as ondas devido aos espalhamentos que ocorrem dentro da cavidade. A figura [2] abaixo mostra a simulação do comportamento dessas flutuações para diversas realizações. Note que o valor máximo dessas flutuações não excede a unidade.

1.3 APROXIMAÇÕES ESTATÍSTICAS PARA FLUTUAÇÕES MESOSCÓPICAS

Vimos que controlar a coerência das ondas dentro da cavidade é um processo muito complicado e explicitamente desordenado ou dinamicamente caótico, exigindo, portanto, um tratamento estatístico sobre as medidas. Porém, essa dinâmica, que depende de características microscópicas do sistema, nos conduz a certas generalidades em seu comportamento macroscópico. Tal comportamento pode ser expresso em uma lei estatística para as flutuações que pertencem a uma classe de universalidades tais como simetrias do sistema em questão, número de parâmetros relevantes no mesmo, entre outros detalhes que se lhe relacionam.

O pioneiro a dar este tratamento estatístico aos sistemas nucleares foi Wigner³. Nos

³Eugene Paul Wigner(1902-1995), húngaro, recebeu o prêmio Nobel de Física em 1963 (junto com J. Hans D. Jensen e Maria Goeppert-Mayer), por seu trabalho na teoria do núcleo atômico e das partículas

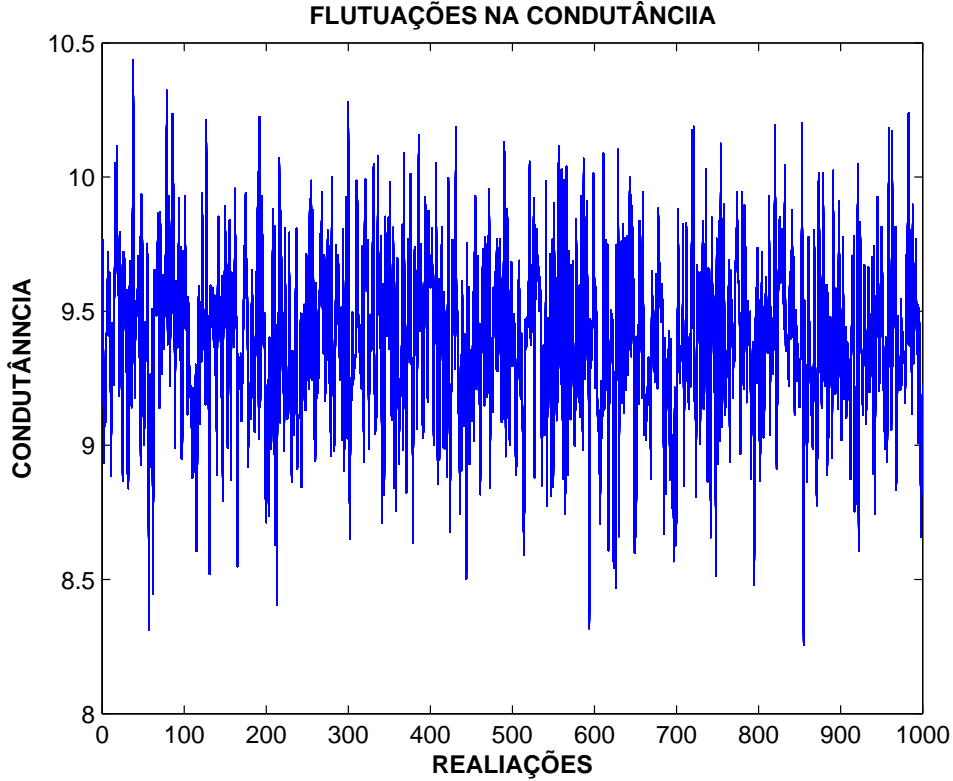


Figura 2: Simulação das Flutuações de condutância para pontos quânticos conectados a dois guias.

anos 50 do século passado [1], ele relacionou o que ocorria nos decaimentos de núcleos – em seus estudos da física nuclear – com as ressonâncias intrínsecas de cavidades mesoscópicas. Devido à impossibilidade de se escrever um Hamiltoniano que descrevesse o sistema no qual as diversas ressonâncias existentes no espalhamento de neutrons em função das energias de átomos pesados, foi criada a teoria das matrizes aleatórias para contornar este problema. Esta teoria serve como alternativa de se explicar satisfatoriamente os processos de espalhamento dos núcleos e, por analogia, a condução de elétrons em cavidades mesoscópicas. Sendo assim, as universalidades clássicas desta teoria são determinadas por simetrias intrínsecas do sistema em questão. Como ilustração, consideremos aqui um sistema fechado sob uma operação de inversão temporal, realizada por um operador anti-unitário chamado de θ , com $H = \theta H \theta^{-1}$ [3]. Essa propriedade é chamada de Invariância de Reversão Temporal (IRT. Do inglês: TRI). Têm-se aqui duas possibilidades de execução deste operador: $\theta^2 = 1$ ou $\theta^2 = -1$, que correspondem, respectivamente, a spins inteiro e semi-inteiro. Para o caso de partículas sem spin, este operador nada mais é do que o operador complexo conjugado para as funções de onda. Tendo como referência a IRT, o Hamiltoniano H_0 fornece uma base se

$$H_0 \varphi_\alpha = \epsilon_\alpha \varphi_\alpha \quad (1)$$

Analisando o caso em que $\theta^2 = +1$, temos estados para os quais é sempre possível encontrar φ_α , tal que $\theta \varphi_\alpha = \varphi_\alpha$. Isto implica que os elementos da matriz Hamiltoniana da IRT, nesta base, possuem entradas reais e, portanto, são simétricos. A propriedade é preservada sob

elementares, em especial pelo descobrimento e aplicações de princípios de simetrias.

uma transformação ortogonal real. Este é chamado de caso ortogonal. Se considerarmos a outra possibilidade, ou seja, $\theta^2 = -1$, tem-se estados tal que $\chi_\alpha = \theta\varphi_\alpha$ e, portanto, os estados são degenerados. Esta degenerescência é chamada de Degenerescência de Kramer, presente na ausência de outra simetria. A matriz Hamiltoniana \mathcal{H} , nesta base, terá estrutura tal que

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} h & -a^* \\ a & h^* \end{bmatrix} \quad (2)$$

Onde h é Hermitiano e a é antissimétrico. Esta estrutura é preservada sob um conjunto de transformações unitárias \mathcal{U} , chamadas de transformações simpléticas, que dá nome a esta classe. E, por fim, se a IRT for quebrada, tem-se o caso unitário, quando as matrizes Hamiltonianas podem ser transformadas entre si (gerando assim um automorfismo) por uma transformação unitária de caráter geral. Para a Hamiltoniana nuclear, tem-se uma relação de comutação com o momento angular e, dessa forma, tem-se o caso ortogonal.

No problema do transporte eletrônico, assume-se que o elétron será sujeito a um potencial real invariante sob rotação. Se a interação spin-órbita é desprezada, tem-se o desacoplamento do spin up e down, para a qual ignoramos o spin, exceto quando houver dupla degenerescência. O caso da partícula sem spin, portanto, é suficiente para descrever o transporte quântico, onde podem ocorrer dois casos: ou o sistema é IRT (caso ortogonal), ou esta simetria é quebrada pela aplicação de um campo magnético (caso unitário). No caso do espalhamento spin-órbita, as componentes do spin são acopladas e uma teoria de spin $\frac{1}{2}$ é necessária. Da mesma forma, têm-se dois casos: para IRT, tem-se o caso simplético e quebrando esta simetria com um campo magnético caímos no caso unitário. As classes aqui discutidas aqui podem ser resumidas na tabela que segue,

Tabela 1: Classificação das classes de ensembles segundo suas simetrias

$[H, \theta]$	Spin	$[H, J]$	Ensemble	β
0	inteiro		Ortogonal	1
0	$\frac{1}{2}$	0	Ortogonal	1
0	$\frac{1}{2}$	$\neq 0$	Simplético	4
$\neq 0$			Unitário	2

1.4 O PONTO QUÂNTICO E A CONDUTÂNCIA

A figura 3 abaixo[7], mostra um ponto quântico identificado como a circunferência formada por bolas e um contato pontual quântico (QPC). Como estas estruturas atendem as exigências de escala que caracterizam os sistemas mesoscópicos, elas podem ser consideradas os átomos fundamentais de uma estrutura mais complexa. Neste dispositivo, a pressão no

Um fio quântico estabelece o contato por onde fluirá a corrente I_{QPC} . O ponto é conectado a dois reservatórios ideais, um que serve como fonte (S) e o outro que serve como dreno (D), através das barreiras de tunelamento, tendo seu carregamento realizado pela diferença de potencial entre S e D. Ainda, segundo a referência [1], controlamos a transparência das barreiras com os portões (Gates) G1 e G2. A ideia é que a diferença de potencial entre S e D seja controlada de tal forma que permita a passagem aleatória de um único elétron devido ao bloqueio Coulombiano, ou seja, devido ao acúmulo de cargas nas paredes de S e D gerando uma diferença de potencial adicional que pode vir a impedir o tunelamento dos elétrons.

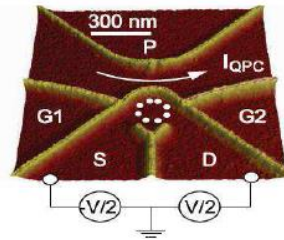


Figura 3: Variância da taxa de transmissão T em função do índice de transmissão da barreira de tunelamento Γ , resgatado do texto original dos autores da referência [18].

Como já foi dito, estamos interessados em descrever processos de transporte quântico através destas estruturas mesoscópicas, já denominadas de ponto quântico. É importante, portanto, impor uma condição empírica – mesmo que nos pareça bastante razoável pensar – de espalhamentos quânticos aleatórios dos modos eletrônicos do sistema, que muito embora tenham sido desenvolvidas – como se utiliza atualmente nesta área, por Landauer e Büttiker [1] – foi pioneiramente considerada nos trabalhos de Niels Bohr em seus estudos sobre a estrutura de núcleos pesados. Nestes estudos, Bohr considerou que a colisão de nêutrons de grandes energias com núcleos pesados tem inicialmente como produto um sistema composto de notável estabilidade que decai posteriormente em outras partículas ou emite radiação. Vê-se, portanto, dois eventos neste processo: a colisão e a emissão, que são estatisticamente independentes. A partir dessa leitura, foi possível criar um modelo que explicasse, do ponto de vista clássico, o fenômeno abordado. A figura [5] ilustra o modelo. O modelo é de simples

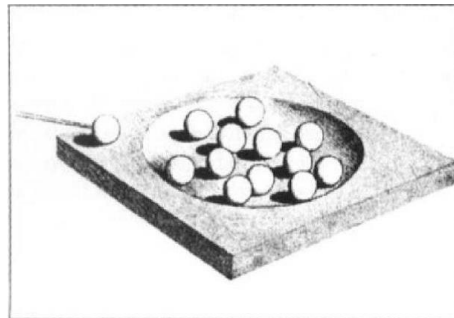


Figura 4: Sistema clássico para o núcleo atômico no qual ele é visto como um bilhar com uma cratera de formato qualquer.

compreensão. Nele, Bohr imaginou um sistema clássico para o núcleo atômico no qual é visto como um bilhar com uma cratera de formato qualquer, tratando os seus constituintes - os nucleons - e as partículas de alta energia, como bolas de bilhar internas e externas à cratera em questão. Inicialmente, com cratera vazia, será lançada uma bola de bilhar com

uma dada energia: E . A bola entrará por um lado da cratera e sairá no lado oposto com a mesma energia cinética que adquiriu no momento em que entrou. Porém, se preenchermos a cratera com bolas semelhantes a que será lançada e considerarmos que todas as colisões entre as bolas são elásticas e, ainda, que os efeitos de atrito são desprezíveis, após a bola ser lançada ela colidirá com outra bola, particionando sua energia. Tem-se, por conseguinte, duas bolas com energias cinéticas não nulas e que seguem seus movimentos até que colidam com outras duas bolas e particionem sua energia com elas também. O processo se repete e a energia cinética inicial será dividida entre a bola incidente e todas as outras bolas presentes na cratera. Quando uma das bolas concentrar outra vez energia suficiente para sair da cratera, o restante da energia estará distribuído entre as outras bolas e estas não terão energia suficiente para vencer a barreira de potencial estabelecida pela altura da cratera. Com esse modelo Bohr tentou explicar a distribuição de níveis de energia em alvos pesados.

O trabalho de Bohr influenciou Wigner à construção de sua teoria de matrizes aleatórias (TMA), uma vez que o modelo de Bohr pode ser visto como exemplo de uma dinâmica clássica caótica. Com sua TMA, Wigner propôs a descrição estatística das propriedades espectrais de núcleos pesados a partir da colisão de partículas de altas energias com esses núcleos. As saídas obtidas, a partir dessas colisões, representam um conjunto de ressonâncias bem separadas e cada uma dessas ressonâncias representa um meta-estado do núcleo composto. Com isso, entradas e saídas desses sistemas podem ser representadas por matrizes, desde que se leve em conta seu caráter estatístico, o qual será, por sua vez, representado por um ensemble de sistemas semelhantes contendo todas as possibilidades de entradas e saídas possíveis para as ressonâncias do núcleo em questão, como já foi comentado antes.

Vê-se, portanto, que o problema reside essencialmente em relacionar as entradas em um ponto quântico, com suas saídas. Ou seja, compreender suas propriedades de transportes. Ou ainda, a partir de uma leitura estritamente clássica, deseja-se entender como se dá a condutância de elétrons através de um sistema de caráter quântico presente na amostra em questão. Isso posto, uma vez entendida a necessidade de calcularmos a condutância de um sistema como este, faremos a seguir uma breve discussão sobre a condutância clássica de um fio de dimensões macroscópicas a título de revisão conceitual, para que se possa entender a motivação desse trabalho e, também, a conexão que se faz entre os sistemas de natureza clássica, com os sistemas cuja natureza se coloca em escalas de comprimento que exigem o tratamento quântico à sua compreensão.

2 UMA BREVE DISCUSSÃO SOBRE CONDUTÂNCIA EM SISTEMAS CLÁSSICOS

O conceito básico a ser tratado na análise do problema do ponto quântico, é entender como se dá a condução de portadores de carga através do mesmo. Ademais, analisaremos depois como o conceito aqui abordado pode ser estendido a propriedades da matéria que não só a carga como, por exemplo, o spin das partículas. Esta análise traz intrinsecamente a necessidade de um tratamento quântico à abordagem do problema da condução, uma vez que, do ponto de vista clássico, a propriedade de carga explica satisfatoriamente os fenômenos investigados dentro daqueles limites, porém, em limites quânticos, uma abordagem mais aprofundada se faz necessária. Neste capítulo, faremos uma revisão rápida do conceito de continuidade no transporte de cargas num sistema clássico, para que dessa forma, a partir de seus princípios, possamos entender a necessidade de uma nova abordagem matemática, quando levarmos o problema da condutância ao limite quântico extremo.

2.1 NATUREZA DE UMA CORRENTE ELÉTRICA

Condutores elétricos apresentam portadores de carga livres que, na condição de equilíbrio eletrostático, se movimentam através dele de forma aleatória. Porém, ao aplicarmos um campo elétrico na região onde se encontra o condutor, será dada a esses portadores de carga uma direção preferencial de movimento. A corrente elétrica é caracterizada como um movimento “organizado” desses portadores carga, motivadas pelo campo elétrico a ter esta tendência preferencial em seu movimento. Nos metais, por exemplo, a corrente é totalmente constituída por elétrons, enquanto que os íons positivos pesados permanecem fixos em posições regulares que caracterizam a rede cristalina do mesmo. Apenas os elétrons mais externos, os da banda de valência, estão livres para participarem do processo de condução. Os mais internos permanecerão fortemente ligados aos íons [6].

Em condição de equilíbrio, um elétron pode ser introduzido em um ponto do metal e removido em outro. Esta possibilidade produz uma corrente elétrica local, muito embora o metal como um todo permaneça eletricamente neutro. Forças eletrostáticas são responsáveis pela impossibilidade dos elétrons, por ventura, se acumularem em uma região qualquer do metal. Fato este que é evidenciado pela rapidez com a qual a carga se dissipa em uma região qualquer do metal, quando se estabelece a condição de não equilíbrio. Portanto, podemos analisar a corrente elétrica sem levarmos em conta os possíveis efeitos eletrostáticos resultantes do acúmulo local de carga e que, ainda que de maneira discreta, não deixam de existir no processo de condução.

2.2 DENSIDADE DE CORRENTE E EQUAÇÃO DE CONTINUIDADE

Consideremos um meio condutor com apenas um tipo de portador de carga, \mathbf{q} . Esqueçamos, também, os efeitos térmicos sobre eles, levando em conta, portanto, apenas seu deslocamento. Sendo o número de portadores de carga por unidade de volume representado por

N e considerando ainda que a velocidade dos portadores é a mesma, v , a corrente elétrica neste condutor, ou seja, o fluxo de portadores de carga por unidade de tempo através de uma secção transversal dele é dado por:

$$di = \frac{\delta Q}{\delta t} \quad (3)$$

Esse fluxo representa a carga que passa pela secção transversal do condutor, da , por intervalo de tempo.

A distância percorrida pelos portadores de carga no tempo δt é por sua vez, dada por:

$$d = \vec{v} \cdot \vec{n} \delta t \quad (4)$$

Uma vez que estamos considerando que todos os portadores de carga possuem a mesma velocidade. Sendo assim, toda carga que passa pela secção transversal do condutor no tempo δt estará contida no volume

$$d = (\vec{v} \cdot \vec{n} \delta t) da \quad (5)$$

onde \vec{n} é um vetor unitário perpendicular a da .

A carga, δQ , que passa por da é dada por q vezes o número de portadores de carga no volume considerado. A saber,

$$\delta Q = qN(\vec{v} \cdot \vec{n} \delta t) da \quad (6)$$

Ou seja, podemos calcular a corrente elétrica como

$$di = \frac{\delta Q}{\delta t} = q \frac{(\vec{v} \cdot \vec{n} \delta t) da}{\delta t} \quad (7)$$

o que nos leva a

$$di = qN(\vec{v} \cdot \vec{n}) da. \quad (8)$$

Para uma situação mais geral, ou seja, se considerarmos mais de um tipo de portador de carga, temos

$$di = \left[\sum_p^q N_p q_p \vec{v}_p \right] \cdot \vec{n}_p da. \quad (9)$$

Onde o termo entre colchetes na equação (7), deve ter dimensão de corrente por unidade de área e, portanto, representa uma densidade de corrente, sendo escrita como

$$J = \sum_p^q N_p q_p v_p. \quad (10)$$

Sendo assim, temos,

$$di = \vec{J} \cdot \vec{n} da. \quad (11)$$

Usando o teorema de Gauss, tem-se que,

$$i = - \oint \vec{J} \cdot \vec{n} da = - \int \vec{\nabla} \cdot \vec{J} dv \quad (12)$$

o sinal negativo deve-se ao fato de que \vec{n} aponta para fora da superfície, enquanto que se considera i positivo quando o fluxo de carga líquida se dá para dentro da superfície. Considerando que, podemos escrever ainda,

$$i = \frac{\delta Q}{\delta t} = \frac{d}{dt} \int \rho dv = - \int \vec{\nabla} \cdot \vec{J} dv, \quad (13)$$

de onde temos, finalmente,

$$\int \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} \right) dv = 0. \quad (14)$$

E, uma vez que o elemento de volume, dv , é arbitrário, chegamos a uma equação conhecida como equação de continuidade, dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0. \quad (15)$$

Este princípio de continuidade, que surge de maneira natural neste tratamento clássico terá papel fundamental no formalismo matricial de Wigner, uma vez que se reporta diretamente aos princípios de conservação da carga ou a uma lei de conservação. Ou seja, ainda que o formalismo passe a ser baseado em um ensemble de matrizes aleatórias, como veremos mais adiante, ele deve carregar consigo o princípio básico da lei de conservação da carga elétrica.

2.3 LEI DE OHM E CONDUTIVIDADE

É possível constatar experimentalmente que, à temperatura constante, a densidade de corrente em um metal é diretamente proporcional ao campo elétrico aplicado (lei de Ohm). O que nos permite escrever,

$$\vec{J} = g\vec{E}, \quad (16)$$

onde g é chamado de condutividade do metal. Escrita de forma mais geral, podemos dizer que há uma dependência da condutividade com o campo elétrico: $g = g(E)$. E, dessa forma, podemos escrever

$$\vec{J} = g(E)\vec{E}. \quad (17)$$

Uma vez que, para um condutor retilíneo e homogêneo que obedece à lei de Ohm e que tem extremidades mantidas a uma diferença de potencial $\Delta\varphi$, temos que

$$\Delta\varphi = \int \vec{E} \cdot d\vec{l}, \quad (18)$$

se o fio for longo e reto, não haverá componente perpendicular ao eixo e, se o sistema está em estado estacionário, o campo é puramente longitudinal. Além do que, devido à geometria do mesmo, o campo elétrico é o mesmo em todos os pontos ao longo de seu comprimento. Portanto, a equação (18) pode ser escrita como

$$\Delta\varphi = E \cdot l, \quad (19)$$

onde l é o comprimento do fio. Notemos que, se a presença do campo elétrico cria uma densidade de corrente J , temos ao longo do mesmo

$$i = \int \vec{J} \cdot \vec{n} da. \quad (20)$$

Combinando as equações (16) e (20), tem-se

$$g = \frac{l}{A} \frac{i}{\Delta\varphi}, \quad (21)$$

que é a condutância clássica para um fio que obedece a lei de Ohm.

Vê-se que essa importante grandeza física tem uma dependência explícita com a geometria do fio, o que, do ponto de vista clássico, não oferece nenhuma restrição em sua descrição. Além do mais, os portadores de carga obedecem a uma lei de continuidade, equação (15), definida em todo o espaço onde a corrente é estabelecida.

O problema motivador da necessidade do uso de uma nova teoria aparece quando levamos a equação (21) aos limites quânticos ($A \rightarrow 0$ e $l \rightarrow 0$). Isso pelo ato de que a mesma apresenta problemas de indeterminação – como no limite em que tentamos transformar o meio condutor em um ponto quântico – que deve ser tratada a partir de princípios que levam em conta a natureza quântica do sistema. Sendo assim, buscaremos suporte em princípios fundamentais que descrevem um formalismo onde é possível se calcular a condutância de um sistema de natureza tão peculiar quanto este.

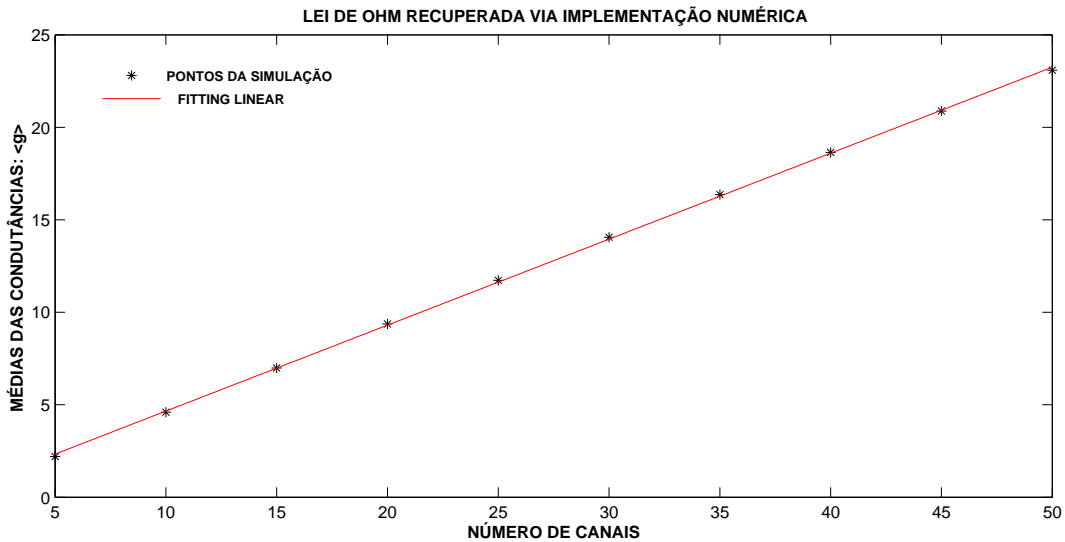


Figura 5: Nesta figura estão plotados dez valores das condutâncias médias em função do número de canais presentes nos guias. Nesta implementação utilizamos 1500 realizações de um ensemble contendo 4998 matrizes. Consideramos, também, 200 ressonâncias possíveis. Por uma questão de simetria, consideramos o caso ideal - taxa de transmissão 1 - e o mesmo número de canais em cada guia ($N_1 = N_2$). Vê-se o comportamento linear para a condutância média em função do número de canais nos guias.

3 A TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS

O objetivo principal do uso das matrizes aleatórias é fornecer o entendimento das propriedades de matrizes que possuem entradas preenchidas por várias distribuições de probabilidades mais comumente conhecidas como ensemble de matrizes aleatórias. Os ensembles mais comuns são o Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE), composto por entradas reais e simétricas; o Ensemble Gaussiano Unitário (GUE), composto por entradas Hermitianas complexas; e o Ensemble Gaussiano Simplético (GSE) composto por entradas que um são quatérnio de matrizes auto-adjuntas (como as matrizes de Pauli, por exemplo), todos normalizados, cujas variâncias são ajustadas para garantir a invariância de suas densidades de probabilidades sob transformações de similaridade.

Muito embora o início dos estudos da teoria de matrizes aleatórias seja obra de Wishart [8] e James [9] no campo da estatística, o ponto de partida de fato foi obra de Eugene Wigner em 1950, motivado pelo problema de física nuclear, mais especificamente no espalhamento de ressonâncias no decaimentos de núcleos. Wigner sugeriu que as flutuações nas ressonâncias de núcleos compostos podem ser estudadas a partir de propriedades estatísticas dos autovalores de um ensemble de matrizes. A ideia principal é que diante da impossibilidade de se descrever um hamiltoniano individual, num conjunto muito grande de partículas que estão interagindo fortemente, e resolver uma equação de autovalores, um tratamento estatístico sobre estes autovalores traria respostas a respeito do comportamento desses decaimentos de uma maneira muito mais direta. Diante dessa necessidade de compreensão dos decaimentos desses núcleos surgiu a ideia de Wigner. Ele imaginou que da mesma forma que um sistema quântico é caracterizado por um operador linear auto-adjunto - ao qual chamamos de Hamiltoniano - no espaço de Hilbert e que pode ser visto como uma matriz de dimensão infinita, as entradas desta matriz contém propriedades gerais dos Hamiltonianos subjacentes tal qual tal qual hermiticidade, invariância de inversão temporal e ainda simetrias associadas a esses Hamiltonianos.

Seguindo este princípio, Wigner conseguiu calcular as mais simples e características espectrais do conjunto de matrizes com entradas reais simétricas, independentes e distribuídas de maneiras idênticas o valor médio dos autovalores e demonstrou que, no limite de grandes números, esse valor médio é obtido por uma lei chamada de semi circular. A ideia de Wigner foi importante no trabalho de Dyson⁴ apresentou importantes propriedades de simetrias para o hamiltonianos, classificando-os em três classes de maior relevância: Ortogonal, Unitário e Simplético, como já citado antes.

A partir dos anos 80 do século passado, a RMT foi bastante difundida não só física, tendo seus princípios sido aplicados na própria física nuclear, movimento browniano, física de sistemas mesoscópicos, física do caos, óptica, finanças, teoria da informação, entre muitas outras áreas.

⁴Freeman John Dyson(1923), inglês, estudou no Winchester College, de 1936 a 1941. Em 1943 entrou para o Operational Research Section (ORS) do Bomber Comandd das forças aéreas onde desenvolveu métodos analíticos para o bombardeio de alvos militares alemães durante a segunda guerra mundial. Em 1947 se transferiu para os Estados Unidos onde trabalhou e desenvolveu suas pesquisas.

3.1 ENSEMBLES DE WIGNER-DYSON

O fato de levarmos em conta o conceito de continuidade no fenômeno de transporte em um fio condutor de dimensões pequenas quando analisamos o ponto quântico, implicitamente nos conduz a um princípio de conservação fundamental para uma teoria física, uma vez que leis de conservação – como é o caso exposto pela relação de continuidade vista na equação (15)– nos levam a simetrias importantes na natureza. E são algumas simetrias presentes na abordagem quântica da condutância que foram utilizadas por Wigner e Dyson na construção da teoria das matrizes aleatórias. Segundo eles, existem três tipos de ensembles genéricos de matrizes aleatórias associadas a simetrias específicas do hamiltoniano que se associam ao problema da condutância. A saber,

- $\beta = 1$ – sistemas com simetria de reversão temporal e simetria de rotação de spin semi-inteiro. São sistemas que geram matrizes \mathcal{H} com entradas $\mathcal{H}_{\mu\nu}$ reais que satisfazem a propriedade,

$$H_{\mu\nu} = H_{\nu\mu} = H_{\mu\nu}^* \quad (22)$$

O asterisco denota o complexo conjugado e os índices gregos denotam as entradas da matriz que é simétrica para sistemas com reversão temporal. Neste caso, existe um único grau de liberdade que caracteriza os vínculos da simetria. $\beta = 1$ indica que há apenas um grau de liberdade independente por entrada da matriz.

- $\beta = 2$ – sistemas com quebra de simetria de reversão temporal. Isto acontece quando o campo magnético é intenso. A quebra desta simetria devido à presença do campo magnético gera um novo grau de liberdade para as entradas do hamiltoniano, de tal forma que o ensemble se caracterizará agora por estes dois graus de liberdade,

$$H_{\mu\nu} = H_{\nu\mu}^\dagger \quad (23)$$

Onde o símbolo \dagger denota o conjugado hermitiano⁵

- $\beta = 4$ – sistemas com simetria de reversão temporal e com quebra de simetria de rotação de spin semi-inteiro. As entradas do Hamiltoniano são escritas em termos de uma representação matricial quaterniônica, ou seja, as entradas das matrizes possuem quatro graus de liberdade. E escreve-se como segue,

$$H_{\mu\nu} = H_{\mu\nu}^0 1 - i \sum_{j=1}^3 H_{\mu\nu}^j \sigma_j \quad (24)$$

Onde os σ_j são as matrizes de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (25)$$

⁵Um Operador auto-adjunto é um operador linear em um espaço vetorial com produto interno que é o adjunto de si mesmo. No caso de espaços de dimensão finita, a matriz que representa esse operador é igual à sua transposta conjugada. Acompanhando consigo as propriedades: 1 - $\langle Hx|y \rangle = \langle x|Hy \rangle$; 2 - Todo auto-valor de um operador auto-adjunto é real e 3 - Se dois auto-estados possuem auto-valores diferentes eles são ortogonais.

Como as entradas devem ser independentes, segundo o teorema central do limite, o elemento de probabilidade que caracteriza uma matriz do ensemble é dado por

$$P_{N\beta}(H) = c \exp\left(-\frac{\beta N}{\lambda^2} \text{Tr}V(H)\right) \quad (26)$$

Onde c é a constante de normalização. Se a matriz $V(H) = H^2$, o pacote é do tipo Gaussiano que, por construção, leva em conta o fato de que o número de entradas é muito grande ($N \rightarrow \infty$) e são independentes. Lembrando que o pacote gaussiano carrega consigo os aspectos gerais de convergência, exigido na construção do teorema central do limite, não haverá restrição nenhuma ao seu uso uma vez que será garantida convergência dos $P_{N\beta}$ e das correlações locais. Este regime é conhecido como regime universal das correlações espectrais e o pacote garante, assim, um significado físico para o parâmetro λ .

Nesta teoria se constrói a relação entre entradas e as saídas dadas por correlações e cumulantes estatísticos ou momentos como se costuma designar mais comumente[15], através de uma matriz de espalhamento construída a partir de um ensemble apropriado. Abaixo, vemos um histograma da condutância obtidos a partir de uma simulação com um ensemble ortogonal de 4998 matrizes. É possível constatar a distribuição Gaussiana prevista nos trabalhos de Wigner-Dyson.

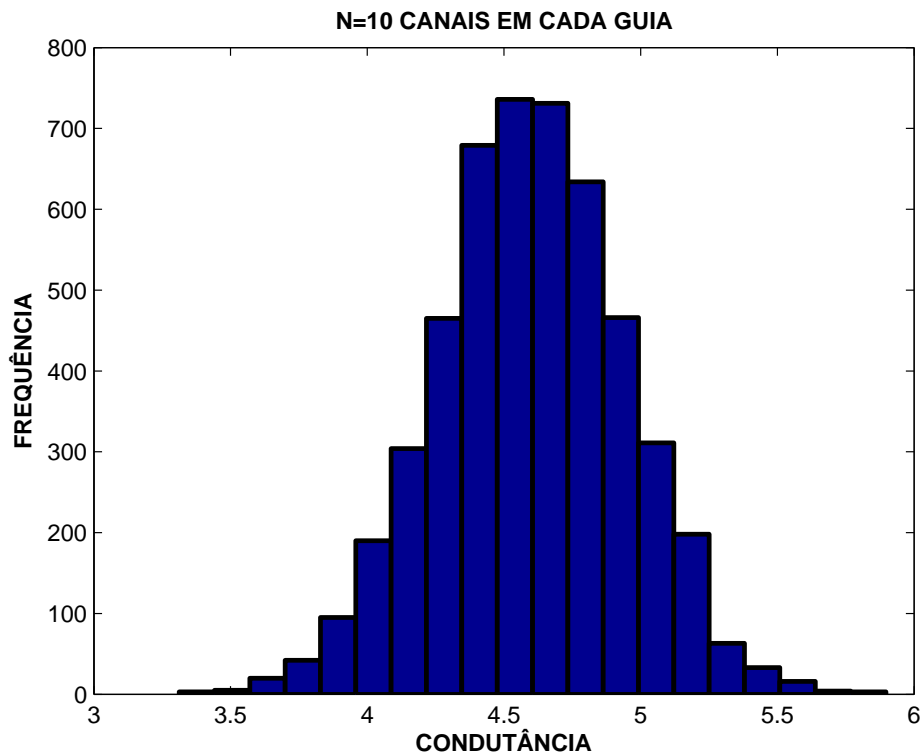


Figura 6: Histograma de frequências: Ponto Quântico com dois guias. Simulação realizada com 10 canais em cada guia, 4998 realizações e 300 ressonâncias. Tem-se aproximação de uma distribuição Gaussiana.

A seguir temos um resultado recuperado da referência [18] para um ponto quântico conectados a dois guias de forma não ideal. Antes, porém, mostramos o histograma de frequência desta distribuição. Nesta simulação, utilizamos uma taxa de transmissão igual a $\Gamma = 2/3$ e

um ensemble bem mais robusto do que o utilizado na figura anterior e no restante de nosso trabalho. O propósito da utilização de um ensemble mais robusto é garantir a eficácia do método.

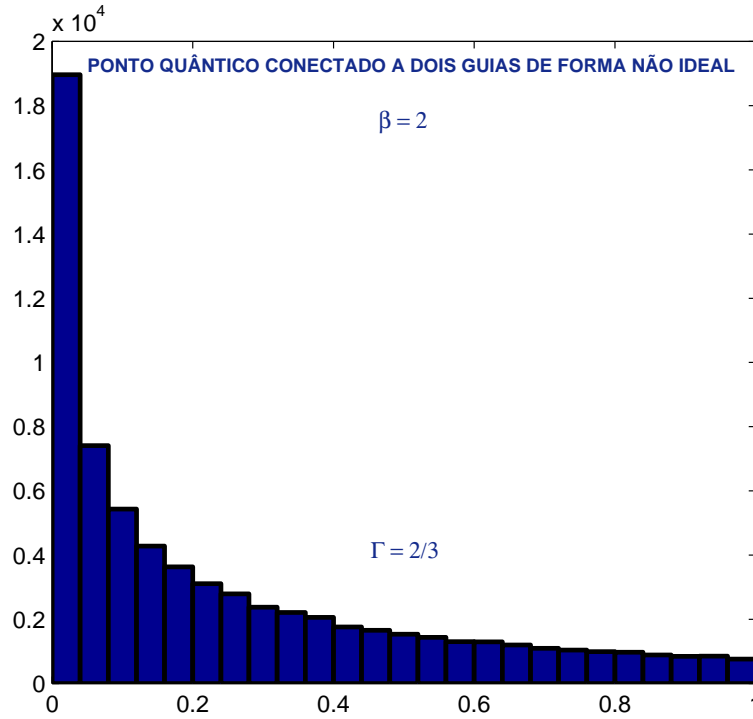


Figura 7: Histograma de frequências para a condutância de um ponto quântico conectados a dois guias de forma não ideal e com taxa de transmissão $\Gamma = 2/3$.

Muito embora, às próximas figuras recuperadas, utilizamos o ensemble da figura anterior. A razão é que, à construção do gráfico a seguir, levamos o sistema ao limite quântico extremo e, portanto, é necessária uma estatística mais precisa para garantir a convergência dos pontos obtidos na simulação.

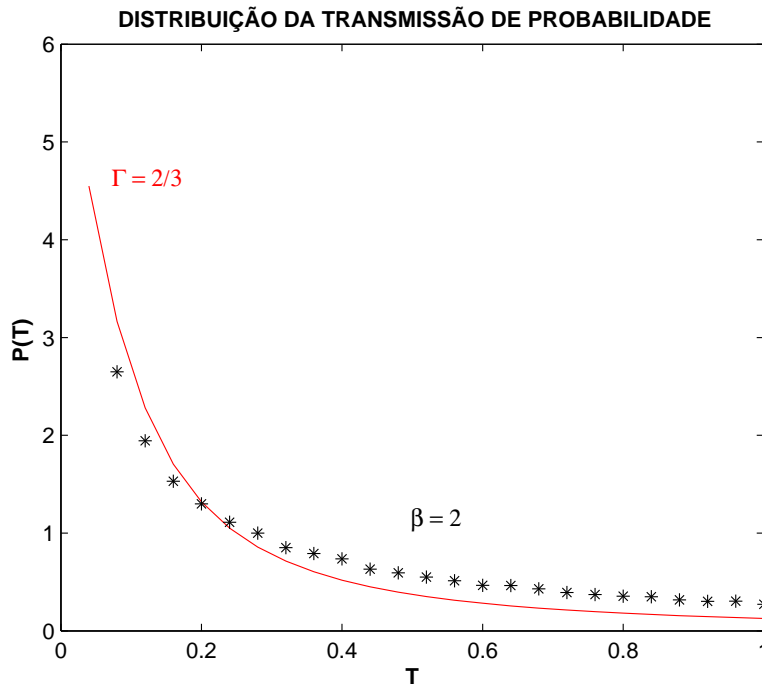


Figura 8: Distribuição de probabilidades através de um ponto quântico conectados a dois guias de forma não ideal e com taxa de transmissão $\Gamma = 2/3$.

3.2 A TEORIA DE LANDAUER - BÜTTIKER

Os sistemas mesoscópicos carregam consigo um problema de não-equilíbrio quando investigamos seus processos estatísticos. Na descrição da condutância, por exemplo, utilizamos classicamente a ideia de fonte de elétrons. Para contornar o problema de não-equilíbrio, Landauer substituiu o conceito de fontes de elétrons pelo princípio de reservatórios ideais conectados de maneira adiabática aos guias de condução dos elétrons. Portanto, na região que de fato é considerada como o sistema mesoscópicos, não se levará em conta os problemas relacionados às questões de não-equilíbrio que o sistema intrinsecamente apresenta. O que nos permite esquematizar esta configuração como segue. No esquema da figura (7), os guias



Figura 9: Sistema mesoscópico idealizado por Landauer

têm espessura finita, d , de forma que sejam impostas condições de quantização transversal nos modos propagantes, uma vez que os limites dos guias se comportam como barreiras de potencial infinitas, permitindo assim que os modos propagantes se desloquem apenas na direção longitudinal dos mesmos.

A região de espalhamento é uma região estacionária acoplada de forma ideal aos guias, como já foi mencionado anteriormente. Uma vez acoplada dessa forma, permite que seja definida uma base de canais abertos para o espaço de Hilbert associado. Sendo assim, é possível construir uma matriz de espalhamento com a qual se analisa as propriedades de transporte.

Na figura (7), os guias ideais são balísticos e carregam cada um deles N canais de propagação transversais. Cada canal se propaga no guia com uma probabilidade de transmissão T e uma probabilidade de reflexão $(1 - T)$, estabelecendo o vínculo

$$T + R = 1 \quad (27)$$

Visto que a corrente deve ser conservada, como constatamos no problema clássico. Já os reservatórios, por definição, não refletem os canais de propagação e espalhamento. Dessa forma, eles funcionam apenas como emissores de partículas de acordo com o seu potencial químico.

Na figura a seguir, o reservatório 1 é conectado de forma ideal ao guia 1 e injeta neste elétrons com energia próxima a energia de Fermi⁶, μ_1 ; enquanto que o reservatório 2 injeta no guia 2 elétrons com energia próxima a energia de Fermi, μ_2 . Neste apparatus, μ_A e μ_B são os potenciais químicos à esquerda e à direita da barreira de potencial.

Abaixo temos a explicação da composição dos N canais emitidos pelo reservatório 1, no guia 1. Considerando que os dois guias são balísticos e que os canais de espalhamento não



Figura 10: Potenciais nos reservatórios conectados aos guias ligados ao ponto quântico [2]

serão refletidos pelos reservatórios, eles serão emitidos apenas de acordo com a diferença de potencial

$$\mu = \mu_1 - \mu_2, \quad (28)$$

onde considera-se que $\mu_1 > \mu_2$. Esta condição define um fluxo líquido de corrente saindo do reservatório 1 em direção ao reservatório 2. Dada por,

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} N(\mu_1 - \mu_2), \quad (29)$$

onde o fator dois aparece devido ao fato de termos, com igual probabilidade, duas possibilidades para o spin do elétron. Considerando o fator de transmissão (T), podemos dizer que

⁶A energia de Fermi é a energia de um sistema com temperatura próxima ao zero absoluto. Sendo esta definido como a energia do nível energético de mais alto valor que se encontra ocupado. Como consequência, estamos assumindo que os níveis mais baixos já se encontram ocupados.

a corrente que flui para o guia 2 é um percentual da corrente injetada no guia 1 e pode ser escrita como

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} NT(\mu_1 - \mu_2), \quad (30)$$

sendo, portanto, o percentual de corrente refletido no guia 1 dado por

$$I_1^- = \frac{2e}{h} N(1 - T)(\mu_1 - \mu_2) \quad (31)$$

Como se pode ver, a diferença entre as equações (29) e (31), tem como resultado a equação (30). A condutância do sistema é obtida dividindo-se a corrente que flui do guia 1 para o guia 2 (30), pela tensão aplicada (28) para assim chegarmos a expressão para a condutância, dada pela diferença de energia pela carga $\frac{(\mu_1 - \mu_2)}{|e|}$, de onde obtemos:

$$G = \frac{I|e|}{(\mu_1 - \mu_2)} = \frac{2e^2}{h} NT, \quad (32)$$

Nesta equação o fator $\frac{e^2}{h}$ é chamado de quantum de condutância. O que reflete o caráter quântico da mesma uma vez que, sendo N o número discreto de canais, ela pode ser expressa como um múltiplo desse fator de caráter quântico.

Um olhar mais atento à (32) nos diz que, uma vez conhecido o fator de transmissão, resolvemos a questão do problema de transporte. Como temos um ensemble de matrizes aleatórias, se soubermos qual a matriz de espalhamento do sistema e suas entradas, sabermos quais são os canais de transmitidos e, por consequência, a condutância do sistema em questão.

3.3 FORMULAÇÃO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO PARA A FÓRMULA DE LANDAUER-BÜTTIKER

Já sabemos que à formulação proposta por Landauer se utiliza como princípio a separação dos canais de propagação e de espalhamento e, com isso, passamos a ter um número finito de canais ou modos transversais nos guias de transmissão. E ainda, tem-se por construção, o fato de os reservatórios estarem em equilíbrio termodinâmico, além do fato dos elétrons que são “jogados” nos guias obedecerem à equação de Schrödinger

$$\left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla})^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (33)$$

Onde E é a energia da partícula incidente, e a carga do elétron e $V(\vec{r})$ o potencial de confinamento dos canais propagantes no guia. Como o elétron se movimenta ao longo do guia, assume-se que o vetor $\vec{r} = r(x, y)$, onde x é a direção longitudinal de propagação e y a direção transversal a propagação. Posicionamos o guia para que suas paredes estejam às posições $x = 0$ e $y = d$, onde, como já se sabe, d é a espessura dos guias.

Começamos resolver o problema observando que os movimentos nas direções x e y são independentes, isso nos permite usar a técnica de separação de variáveis na equação (33), escrevendo

$$\psi(\vec{r}) = \chi(x)\varphi(y) \quad (34)$$

Para encontrar a solução da equação (33) na forma

$$\psi(\vec{r}) = c\sqrt{\frac{2}{d}}\text{sen}(k_y y)e^{\pm ik_x x} \quad (35)$$

Onde c na equação (35) é uma constante de normalização. Vê-se claramente uma parte oscilante, representada pelo $\text{sen}(k_y y)$, na direção transversal, onde há o confinamento devido às barreiras de potencial, é uma onda que representa uma partícula livre, representada por $e^{\pm ik_x x}$, que é composta por duas possibilidades de propagação representadas pelo sinal negativo (onda se propagando para a direita) e pelo sinal positivo (onda se propagando para a esquerda). Existe ainda na equação (35) duas relações implícitas relacionadas as energias dos modos propagantes, a saber

$$p_x = \hbar k_x \text{ e } p_y = \hbar k_y \quad (36)$$

Portanto, a energia de Fermi pode ser escrita como a soma das duas energias relacionadas com a direção longitudinal e transversal,

$$E_F = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} \quad (37)$$

É importante notar que se $E_y < E_F$, tem-se $E_x > 0$, o que faz do modo propagante uma partícula livre. Mas, caso $E_y > E_F$, tem-se $E_x < 0$, o que nos leva a ter um momento p_x imaginário e, como consequência, tem-se um decaimento exponencial do modo ao longo do guia. Chamamos esse modo de onda *evanescente*⁷, que a literatura chama de modos fechados. Sendo assim, os modos de espalhamento, os que chegam aos reservatórios 1 e 2, em $x = \pm\infty$, tem o valor máximo $n = N_g$, com $g = 1$ e 2 . Sendo os índices 1 e 2 relacionados aos guias do apparatus da figura (8). Assim, a solução geral da equação de Schrödinger em cada um dos guias é dada por

$$\psi_g(x, y) = \sum_1^{N_g} (a_n^{(g)} \varphi_n^{-(g)} + b_n^{(g)} \varphi_n^{+(g)}), \quad (38)$$

sendo $a_n^{(g)}$ e $b_n^{(g)}$ as amplitudes de probabilidades das auto funções e ainda

$$\varphi_n^{\pm(g)} = \sqrt{\frac{2m}{k_{x,n}\hbar d}} \text{sen}(k_{y,n} y) e^{\pm ik_{x,n} x} \quad (39)$$

Onde o sinal + (-) indica canais propagantes para a esquerda (direita).

3.4 FORMULAÇÃO MATRICIAL DO ESPALHAMENTO

Nesta formulação a matriz de espalhamento (S) relaciona as amplitudes de saída com as amplitudes de entrada, sem perder o foco de que existe uma lei de continuidade no fenômeno de transporte, de forma que possamos calcular, por exemplo, propriedades de condutibilidade

⁷Diz-se daquilo que desaparece

do sistema considerado. Para tanto, define-se uma matriz cujas entradas são as amplitudes de probabilidades no guia onde a carga incide

$$A^{(g)} = (a_1^g, a_2^g, \dots, a_{N_g}^g)^T \quad (40)$$

e outra matriz, cujas entradas são as amplitudes de probabilidades no guia para onde a carga é transferida

$$B^{(g)} = (b_1^g, b_2^g, \dots, b_{N_g}^g)^T \quad (41)$$

E, para que as matrizes contenham as amplitudes de probabilidades de entrada e saída ao mesmo tempo, separamos seus termos em blocos de entrada e saída

$$A = (A^{(1)} \ A^{(2)}) \quad (42)$$

e

$$B = (B^{(1)} \ B^{(2)}) \quad (43)$$

Assim, pode-se se fazer a conexão entre as amplitudes de probabilidades de entrada e saída nos guias, via matriz de espalhamento (S). Em outras palavras, uma vez conhecida a matriz de espalhamento do sistema, podemos calcular as propriedades de saída como, por exemplo, a condutância e até mesmo outros cumulantes estatísticos de ordem superior, como se executa na referência [15]. Esta relação pode ser escrita na forma

$$B = SA \quad (44)$$

A matriz S tem dimensão $(N_1+N_2) \times (N_1+N_2)$, e ser decomposta em blocos de reflexão (r) e de transmissão (t), ou seja

$$S = \begin{pmatrix} r & t \\ t' & r' \end{pmatrix}, \quad (45)$$

para a qual temos as dimensões de cada um dos blocos de reflexão dessa matriz, $r(r')$, de ordem igual a $N_1 \times N_1$ ($N_2 \times N_2$), enquanto que os blocos de transmissão, $t(t')$, serão matrizes de ordem igual a $N_1 \times N_2$ ($N_2 \times N_1$), sem esquecer de que 1 e 2 são indexações relacionadas aos guias do modelo.

De acordo com a teoria, um único canal passa do guia 1 para o guia 2 com probabilidade T . Portanto, os autovalores tt^\dagger , são representações das probabilidades de tunelamento de cada canal do guia 1 para o guia 2. Se for feita uma generalização desta teoria para N canais de transmissão, considerando o fato de que na região de espalhamento os N canais são independentes, a probabilidade de transmissão de N_1 do guia 1 é dada por $T = Tr(tt^\dagger)$ e, portanto, a condutância torna-se

$$G = G_0 Tr(tt^\dagger), \quad (46)$$

com $G_0 = \frac{2e^2}{h}$. Como já foi dito, ao fixarmos a matriz de espalhamento S , tem-se por consequência a matriz de transmissão (blocos t) e, calculando-se o traço da matriz de transmissão $Tr(tt^\dagger)$, tem-se a condutância do sistema. Construindo-se um ensemble com cópias deste sistema, é possível, se estabelecer as médias estatísticas dessas cópias e, dessa forma, evitar a preocupação com problemas decorrentes do caráter microscópico do sistema. Ou seja, não haverá necessidade de tentar resolver a equação de Schrödinger para um sistema e, portanto, com impossibilidade de construção de um Hamiltoniano que o descreva.

3.5 A MATRIZ DE ESPALHAMENTO (S) E A DEDUÇÃO DA FÓRMULA DE MAHAUX-WEINDERMÜLLER

O trabalho de Verbaarschot, Weindermüller e Zirnbauer (VWZ) apresentou um formalismo estocástico para o espalhamento quântico caótico. A motivação desse trabalho foi o estudo das reações ressonantes na física nuclear. Eles conseguiram adaptar a teoria de matrizes aleatórias (TMA) para sistemas abertos (Open Systems) de maneira a tornar possível a aplicação do limite quântico extremo presente num ponto quântico, por exemplo.

Em um fenômeno de espalhamento geral assume-se que os eventos acontecem em uma região muito compacta no espaço de configurações, conhecida como "região de confinamento". Os subprodutos desta interação são denominados de modos propagantes e são caracterizados por um conjunto de números quânticos. Esse conjunto de números quânticos ordena os graus de liberdade internos de cada estado assintoticamente livre. Na direção longitudinal(eixo x



Figura 11: Região de interação com forma arbitrária e região de espalhamento de largura d por onde "viajam" os modos propagantes.

na figura 9) temos modos propagantes enquanto que na direção transversal (eixo y na figura 9) temos a presença de uma quantização devido à barreira física estabelecida pelas fronteiras dos guias. Se estes carregam M -canais independentes, cada um deles com uma energia específica E , na região assintótica, existirá um conjunto de estados de espalhamento, doravante denotados por

$$|n, E\rangle; \quad n = 1, 2, 3, \dots, M, \quad (47)$$

normalizados segundo a condição

$$\langle n, E_1 | m, E_2 \rangle = \delta_{nm} \delta(E_1 - E_2) \quad (48)$$

Na região compacta de interação, por outro lado, tem-se N_c estados discretos e ortogonais escritos como

$$|\mu\rangle = \quad \mu = 1, 2, 3, \dots, N_c \quad (49)$$

Não havendo acoplamento entre os estados, já sabidos independentes, um Hamiltoniano que conecte a região de interação à região de espalhamento pode ser escrito, como uma espécie

de "costura" que une estas duas regiões. Vê-se, portanto uma ampliação do espaço de Hilbert neste universo que contempla, por sua vez, todos os estados presentes na abordagem deste problema. Tal Hamiltoniano, segundo [1, 2], é escrito como

$$H_0 = \sum_{\mu\nu} |\mu\rangle (H_{ri})_{\mu\nu} \langle\nu| + \sum_n \int dE |n, E\rangle E \langle n, E| \quad (50)$$

A parcela do Hamiltoniano que contém os canais de interação deve ser diagonal, sendo assim, o mesmo deve ser entendido como composto de duas partes independentes. O primeiro termo denota a representação de uma base arbitrária \mathcal{H}_{ri} da região compacta de interação, com $N_c \gg 1$ auto-estados de \mathcal{H}_{ri} . Já o segundo termo corresponde aos canais abertos na região de espalhamento, ou seja, nos guias propriamente ditos.

O modelo de VWZ baseia-se na hipótese de aleatoriedade da matriz \mathcal{H}_{ri} , embora possa ser usado para \mathcal{H}_{ri} determinístico, que representa o operador \mathcal{H}_{ri} , incorporando as propriedades básicas de TMA para matrizes $N_c \times N_c$ de alta ordem. E ainda, usando o mesmo modelo, o segundo termo é determinístico e corresponde aos estados assintóticos. Sendo assim, os canais de entrada se acoplam aos auto-estados de \mathcal{H}_{ri} , criando os canais de espalhamento assintoticamente livres, com o termo de acoplamento, escrito na base $\{|\mu\rangle, |n, E\rangle\}$, como

$$\mathcal{V} = \sum_{\mu, n} \left(|\mu\rangle \int dE W_{\mu\nu} \langle n, E| + HC \right) \quad (51)$$

Agora, como o Hamiltoniano escrito como sendo $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$, o conjunto de estados pertence a um espaço de Hilbert de dimensão infinita, contemplando assim todas as possibilidades dos estados que devem se fazer presentes nas classes de ensembles de Wigner. Tais estados ainda obedecem a um produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, carregando, de acordo com o teorema da representação de Riesz, um único operador \mathcal{H} tal que $\mathcal{H}: H \rightarrow H$, com a seguinte propriedade

$$\langle H\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)} \rangle = \langle \Phi^{(1)}, H^\dagger \Phi^{(2)} \rangle, \quad \forall \Phi^{(1)} \text{ e } \Phi^{(2)} \in H \quad (52)$$

onde \mathcal{H}^\dagger é uma generalização do complexo conjugado, chamado de operador adjunto. Vamos admitir, também, que o operador Hamiltoniano é hermitiano, para que possamos obter, $\Phi^{(1)}$ e $\Phi^{(2)}$ e as correspondentes restrições sobre tais estados diante da hermiticidade. Se \mathcal{H} é fixado (assim como suas propriedades) é possível obter a matriz de espalhamento correspondente. A técnica a seguir nos mostra como se chega à expressão para a matriz S .

1) Vamos obter os canais de espalhamento dentro dos guias utilizando a formulação canônica da mecânica quântica. Para isso, resolvemos a equação de schrödinger bidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \Psi(x, y). \quad (53)$$

que, como sabemos, possui soluções independentes E , usando a técnica de separação de variáveis, para podermos escrever

$$\Psi(x, y) = U_1(x)U_2(y) \quad (54)$$

obteremos na direção x a solução geral para uma onda livre

$$U_1(x) = Ae^{+ik'x} + Be^{-ik'x} \quad (55)$$

onde temos que

$$k' = -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - E_1)} \quad (56)$$

2) A parte perpendicular ao eixo x , deve ter soluções que apresentam uma quantização do tipo barreira de potencial

$$\frac{\partial^2 U_2(y)}{\partial y^2} + k^2 U_2(y) = 0 \quad (57)$$

cujas soluções são

$$U_2(y) = A' \text{sen} \left[k_y \left(\frac{d}{2} + y \right) \right] + B' \text{cos} \left[k_y \left(\frac{d}{2} + y \right) \right] \quad (58)$$

Sendo A' e B' constantes arbitrárias definidas pelas condições de contorno. Condições estas que definem a quantização dos modos no sentido transversal ao guia. Aplicando-as, portanto, $U_2(-\frac{d}{2}) = 0$ e $U_2(\frac{d}{2}) = 0$, devemos ter

$$k_y d = n_y \pi \quad (59)$$

portanto,

$$k_y = \frac{n_y \pi}{d} \quad (60)$$

o que nos levará à condição de quantização da energia dada por

$$E_n = \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2md^2} \quad (61)$$

Feito isso, a solução da equação (57) já normalizada é:

$$U_2(y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \text{sen} \left[\frac{n\pi}{d} \left(\frac{d}{2} + y \right) \right] \quad (62)$$

Finalmente a solução geral, usando as equações (55) e (62) pode ser escrita como

$$\Psi_n(x, y) = \left[Ae^{+ik'x} + Be^{-ik'x} \right] \sqrt{\frac{2}{d}} \text{sen} \left[\frac{n\pi}{d} \left(\frac{d}{2} + y \right) \right] \quad (63)$$

Portanto, podemos escrever todas as soluções como um vetor cuja a entrada n é a solução de rótulo n para a equação de Schrödinger no guia. Sendo assim, escrevemos esse vetor na forma

$$\Psi = (\Psi_1(x, y), \Psi_2(x, y), \dots, \Psi_M(x, y))^T \quad (64)$$

onde M representa o número de canais abertos.

Uma vez que $E' = E - E_1$ e que $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, temos o vetor de onda dado por

$$k_n^2 = k^2 - \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2, \quad (65)$$

que, para uma onda propagante, é real. Assim, \mathbf{M} deve ser menor ou igual ao maior inteiro anterior a $\frac{kd}{\pi}$. Os outros canais são evanescentes e não contribuem para o transporte quântico.

Vejamos um caso particular desta situação. Desacoplemos a região de interação do guia e tentemos encontrar a matriz de espalhamento S desta configuração. Sendo assim, passamos a ter a seguinte condição de contorno,

$$\left. \frac{\partial \Psi_n}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad (66)$$

Vê-se, por consequência, que se não há acoplamento, não haverá fluxo de probabilidade ao longo do guia. Fazendo uso da equação (55), temos

$$\frac{\partial U_1}{\partial x} = Aik_n - Bik_n = 0 \quad (67)$$

tendo como consequência a condição $A = B$. A condição imposta nos traz como resultado uma releção. Ou seja, os canais incidentes e transmitidos são os mesmos, segue então que

$$A = (A_1, A_2, \dots, A_M)^T \Leftrightarrow B = (B_1, B_2, \dots, B_M)^T \quad (68)$$

nos levando à relação

$$B_n = \delta_{nm} A_m \quad (69)$$

Como se vê, fixada a condição de contorno de não-interação, conclui-se que a matriz de espalhamento é a matriz identidade.

Se queremos que haja interação, devemos impor condições de contorno mais gerais para obtê-la, ampliando o espaço de Hilbert do sistema. Se considerarmos os N_c estados ortogonais da cavidade caótica e os agruparmos como um vetor $u = (u_1, u_2, \dots, u_{N_c})^T$, ele pode ser obtido diretamente da matriz aleatória \mathcal{H}_{ri} da cavidade. Os auto-estados do Hamiltoniano que descrevem interação dos estados ressonantes da cavidade com os canais propagantes no guia, podem ser escritos como

$$\Phi = (u, \Psi)^T, \quad (70)$$

e estes pertencem ao espaço de Hilbert ampliado onde estão presentes os M canais de abertos os N_c estados ortogonais e os estados da região de interação.

Nesse espaço, o operador Hamiltoniano é definido como:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{ri} & W^{(1)} \\ W^{(2)} & \hat{H}_c \end{pmatrix} \quad (71)$$

\hat{H}_{ri} atua na região de interação e é representado pela matriz Halmiltoniana, $N_c \times N_c$, cujos auto-estados são ressonantes com o sistema aberto. $\hat{W}^{(1)}$ e $\hat{W}^{(2)}$ descrevem o acoplamento dos canais propagantes com as ressonâncias. E, por fim,

$$\hat{H}_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \text{diag} (\partial_x^2 + \partial_y^2, \dots, \partial_x^2 + \partial_y^2), \quad (72)$$

é o operador energia cinética no guia.

Sendo o acoplamento é local, podemos fazer $W^{(2)} = 0$ e, mantendo a hermiticidade, $W^{(1)}$ tal que

$$W^{(1)} = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy W(y) \Psi(0, y) = \hat{\omega} \psi(0) \quad (73)$$

onde $\phi(0) = (\phi(0)_1, \phi(0)_2, \dots, \phi(0)_n)$ e $\hat{\omega}$ tem entradas dadas por:

$$\omega_{\mu\nu} = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy W_{\mu\nu} \Phi_n(y) \quad (74)$$

sendo $\mu = 1, 2, \dots, N_c$ e $n = 1, 2, \dots, M$. Como decorrência disto, no espaço de Hibert estendido, o operador Halmiltoniano torna-se:

$$H\Phi = (H_{ri}u + \hat{\omega}\psi(0), H_c\Psi)^T \quad (75)$$

Definindo como produto escalar nesse espaço, a relação

$$\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = u_1^\dagger u_2 + \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \quad (76)$$

com

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \int_0^\infty dx \Psi_1^\dagger \Psi_2 \quad (77)$$

Aqui o limite $0 < x < \infty$ deve-se ao fato de que a propagação ocorre no semi-eixo $x > 0$.

Devemos ter, como imposição, que o operador Hamiltoniano seja auto-adjunto. Porém, em geral, \mathcal{H} não o é. Enretanto, impondo condições de contorno adequadas podemos encontrar um subconjunto de estado que satisfaçam a condição requerida de hermiticidade. Então, considerando a equação (76),

$$\langle H\Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \left(u_1^\dagger H_{ri}^\dagger + \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger \right) u_2 + \langle H\Psi_1 | \Psi_2 \rangle \quad (78)$$

e

$$\langle \Phi_1 | H\Phi_2 \rangle = u_1^\dagger (H_{ri}u_2 + \omega\psi_2(0)) + \langle \Psi_1 | H\Psi_2 \rangle \quad (79)$$

subtraindo as equações (78) e (79), temos que

$$\langle H\Phi_1 | \Phi_2 \rangle - \langle \Phi_1 | H\Phi_2 \rangle = \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger u_2 - u_1^\dagger \omega \psi_2(0) + \langle H\Psi_1 | \Psi_2 \rangle - \langle \Psi_1 | H\Psi_2 \rangle \quad (80)$$

Analisemos os termos entre brackets na equação (80). Temos que,

$$\langle H\Psi_1 | \Psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{\partial^2 \psi_1^\dagger}{\partial x^2} \Psi_2 dx. \quad (81)$$

Realizando a integração por partes, temos um termo que chamaremos de I_1 , dado por

$$I_1 = \frac{\partial \psi_1^\dagger}{\partial x} \psi_2 \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{\partial \psi_1^\dagger}{\partial x} \frac{\partial \psi_2}{\partial x} dx \quad (82)$$

Agora, fazendo o mesmo com o segundo termo entre brackets na equação (80), temos que

$$\langle \Psi_1 | H \Psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \psi_1^\dagger \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} dx \quad (83)$$

Realizando, outra vez, a integração por partes, temos um termo que chamaremos de I_2 , dado por

$$I_2 = \psi_1^\dagger \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{\partial \psi_1^\dagger}{\partial x} \frac{\partial \psi_2}{\partial x} dx \quad (84)$$

Para que possamos sintetizar mais o resultado, a partir desse momento vamos expressar o termo $\langle H \Phi_1 | \Phi_2 \rangle - \langle \Phi_1 | H \Phi_2 \rangle$ de *Dif*. Isto posto, faz com que a equação (80) se torne

$$Dif = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial \psi_1^\dagger}{\partial x} \Big|_{x=0} \psi_2(0) - \psi_1^\dagger(0) \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \Big|_{x=0} \right] + \left[u_1^\dagger \hat{\omega} \psi_2(0) + \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger u_2 \right] \quad (85)$$

Portanto, devemos fazer uma escolha para que o operador \mathcal{H} se torne auto-adjunto. A escolha que deve ser feita é a que faz com que

$$\hat{\omega}^\dagger u = \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (86)$$

Se isto for verdade, teremos o termo $Dif = 0$ e, portanto, nossa exigência será satisfeita.

Precisamos acoplar os canais propagantes no ponto $x = 0$ para podermos considerar, de fato, a ideia de um fluxo de probabilidades que conecta a região de interação e o guia. Como u está relacionado ao vetor de interação, isto pode ser realizado, uma vez que

$$H\Phi = (H_{ri}u + \hat{\omega}\psi(0), H_c\Psi)^T = E(u, \Psi). \quad (87)$$

Na equação (87), a primeira componente estabelece a seguinte relação

$$H_{ri}u + \hat{\omega}\psi(0) = Eu, \quad (88)$$

o que nos traz uma ideia de continuidade - tal qual o modelo clássico - uma vez que nos apresenta uma conservação de energia em $x = 0$. Portanto, podemos escrever

$$(E - H_{ri})u = \hat{\omega}\psi(0). \quad (89)$$

Ou seja, o termo de interação é escrito como

$$u = (E - H_{ri})^{-1} \hat{\omega}\psi(0) \quad (90)$$

levando, agora, a equação (90) na equação (86), temos que

$$\hat{\omega}^\dagger u = \hat{\omega}^\dagger (E - H_{ri})^{-1} \hat{\omega}\psi(0) \quad (91)$$

e, usando uma equação do tipo onda propagante,

$$\psi_n(x) = \left[2\pi\hbar^2 \left(\frac{k_n}{m} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} [A_n e^{(-ik_n x)} + B_n e^{(+ik_n x)}] \quad (92)$$

Usando a equação (92) na equação (86) temos

$$\hat{\omega}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{\omega} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) K^{-\frac{1}{2}}(A + B) = -i\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) K^{\frac{1}{2}}(A - B) \quad (93)$$

onde $K \equiv \text{diag}(K_1, K_2, \dots, K_M)$ e A e B têm como entradas as amplitudes das auto-funções de \mathcal{H} . Simplificando a equação (93) e escrevendo-a como

$$\hat{\omega}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{\omega}K^{-1}(A + B) = -i\frac{\hbar^2}{2m}(A - B) \quad (94)$$

Uma vez que A e B se interrelacionam via matriz de espalhamento S ($B = SA$), podemos substituir B na equação (94) e obter

$$i\frac{2m}{\hbar^2}\hat{\omega}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{\omega}K^{-1}(1 + S) = (1 - S) \quad (95)$$

Para compactar a equação (95), definamos um novo termo de acoplamento como

$$W = \frac{2m}{\hbar^2\pi} \hat{\omega} \text{diag} \left(K_1^{-\frac{1}{2}}, K_2^{-\frac{1}{2}}, \dots, K_M^{-\frac{1}{2}} \right) \quad (96)$$

e, também, F como

$$F = i\pi\frac{2m}{\hbar^2}\hat{W}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{W} \text{diag}K^{-1}. \quad (97)$$

È, então escrevermos $iF(1 + S) = (1 - S)$, para obter

$$S = (1 - iF)(1 + iF)^{-1}, \quad (98)$$

que ainda pode ser escrita na forma

$$S = 1 - 2iF(1 + iF)^{-1} \quad (99)$$

Para que, fazendo uso da equação (97), possamos escrever

$$S = 1 - 2i \left(\pi\hat{W}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{W} \right) \sum_{l=0}^{\infty} \left(i\pi\hat{W}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{W} \right)^l \quad (100)$$

Podemos manipular a equação (100) para simplificar o resultado, seguindo os passos abaixo

$$S = 1 - 2 \sum_{l=0}^{\infty} \left(i\pi\hat{W}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{W} \right)^{l+1}$$

$$S = 1 - 2i\pi W^\dagger \left[\sum_{l=0}^{\infty} \left(i\pi\hat{W}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{W} \right)^l \right] (E - H_{ri})^{-1}W$$

Expandindo o termo dentro do somatório, a equação acima fica

$$S = 1 - 2i\pi W^\dagger \left[(E - H_{ri}) + (i\pi W W^\dagger) \right]^{-1} W \quad (101)$$

Agora, para que a analogia com as ressonâncias de reações nucleares se estabeleça, podemos definir o decaimento das ressonâncias como sendo $\Gamma = \pi W W^\dagger$ e assim podemos escrever a matriz S na forma

$$S = 1 - 2i\pi W^\dagger \frac{1}{E - H_{ef}} W \quad (102)$$

Essa é a fórmula de Mahaux-Weindermüller S ou a matriz de espalhamento para a qual tem-se, nos valores das energias, pólos simples dela mesma.

Ao generalizarmos a solução para S na equação (102) e seguindo todos os argumentos vistos, além de incorporar ao problema vários terminais, as amplitudes em cada terminal são indexadas pelo índice i (sobrescrito) e os vetores de "entradas" e "saídas" podem ser escritos como

$$A = (A_1^1, A_2^1, \dots, A_{N_1}^1, \dots, A_1^M, A_2^M, \dots, A_{N_1}^M) \quad (103)$$

assim como

$$B = (B_1^1, B_2^1, \dots, B_{N_1}^1, \dots, B_1^M, B_2^M, \dots, B_{N_1}^M) \quad (104)$$

e, para o caso de multiterminais, têm-se

$$K = \text{diag} (K_1^1, K_2^1, \dots, K_{N_1}^1, \dots, K_1^M, K_2^M, \dots, K_{N_1}^M) \quad (105)$$

Finalmente, a função $\Psi(x)$ é escrita como

$$\Psi(x) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 K} \right)^{\frac{1}{2}} [\mathbf{A} \exp(-iKx) + \mathbf{B} \exp(+iKx)] \quad (106)$$

onde $\Psi(x)$ é um vetor cujas entradas são as funções de onda de cada modo propagante.

Ao usarmos a matriz \mathcal{K} , $\Psi(x)$ - vistos na equação (106) - e as condições de contorno que foram usadas em um único guia, para um dos multi-terminais, obteremos a estrutura da fórmula de Mahaux-Weindermüller com \mathcal{W} escrita como

$$\mathcal{W} = \hat{\omega} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 K} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (107)$$

onde $\hat{\omega} = (\hat{\omega}_1, \hat{\omega}_2, \dots, \hat{\omega}_M)$ é o termo de acoplamento de todos os terminais. A matriz S correspondente pode ser decomposta em blocos de reflexão r e em blocos de transmissão t , sendo dada por

$$S = \begin{bmatrix} r_{11} & t_{12} & \dots & t_{1M} \\ t_{21} & r_{22} & \dots & t_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{1M} & t_{2M} & \dots & r_{MM} \end{bmatrix} \quad (108)$$

onde os blocos r_{ll} de ordem $N_l \times N_l$ caracterizam as amplitudes de reflexão no terminal l . Já os blocos $t_{ll'}$ de ordem $N_l \times N_{l'}$, caracterizam as amplitudes de transmissão do terminal l para o terminal l' . O que podemos notar neste formalismo é que uma vez conhecida o traço da matriz de espalhamento, teremos conhecimento das amplitudes de transmissão relevantes ao problema.

De posse da matriz de espalhamento, espera-se compreender as relações de transporte de carga através de um ponto quântico. Para tanto, diante da impossibilidade de se resolver

a equação de Schrödinger para um sistema como o que está sendo tratado, são utilizadas implementações numéricas que resolvem o trabalho de construção da matriz S .

Em nosso trabalho, fizemos uso de uma implementação numérica específica para gerar os dados de saída a partir de um ensemble com 4998 matrizes aleatórias e com 400 ressonâncias disponíveis. As matrizes que contêm os termos de acoplamento são geradas de forma a simular o não decaimento de um canal em outro, sem que antes ocorra a interação apenas com uma das ressonâncias disponíveis e, ainda, sem que haja interação de um canal com outro dentro da região de confinamento. A eficácia do procedimento foi testada na recuperação de dados analíticos a partir de implementações numéricas que recuperam resultados analíticos de alguns autores.

Na referência [18], por exemplo, seus autores deduzem a curva analítica para a probabilidade de transmissão no caso de um ensemble unitário, $\beta = 2$ - figura (10). O sistema considerado consiste em um ponto quântico com dois guias contendo apenas dois canais e uma barreira de tunelamento.

A figura [10] abaixo, resgatada do trabalho da referência [18], mostra o comportamento da variância da probabilidade de transmissão em função da taxa de transmissão Γ nos guias. Centremos nossa atenção apenas no caso $\beta = 2$, uma vez que foi este o caso estudado neste trabalho.

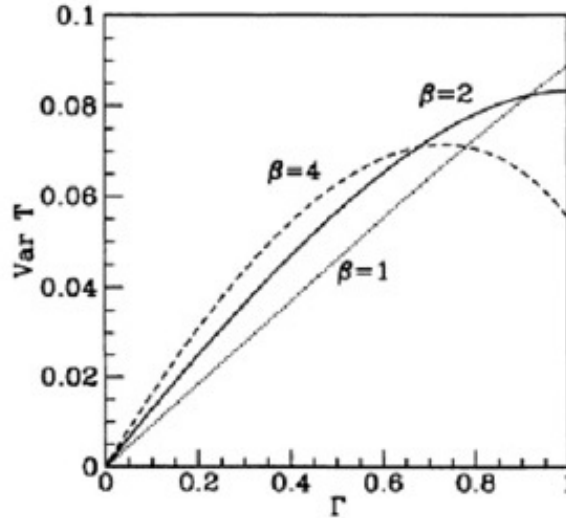


Figura 12: Variância da taxa de transmissão T em função do índice de transmissão da barreira de tunelamento Γ , resgatado do texto original dos autores da referência [18].

A seguir, temos a recuperação do gráfico via simulação numérica para as mesmas condições do caso unitário considerada pelos autores em seu trabalho. Consideramos o caso do limite quântico extremo para o qual temos dois fios condutores ou guias os quais possuem apenas dois canais de espalhamento. Em nossa simulação, realizada com um ensemble de 4998 matrizes, fizemos vários testes buscando variar o número de realizações da simulação para a qual haveria uma convergências dos dados obtidos que fossem aceitáveis. Dessa forma, podemos testar simultaneamente a capacidade de convergência do ensemble que nos daria indícios de sua qualidade. Não nos preocupamos, portanto, em obter uma convergência maior

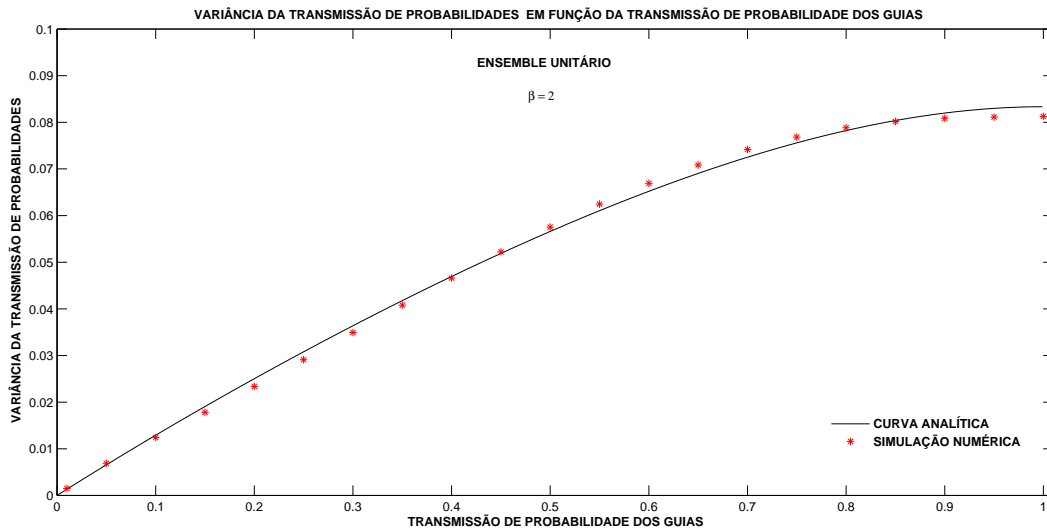


Figura 13: Variância da taxa de transmissão T em função da probabilidade de transmissão Γ . Resultado resgatado via simulação numérica

do que a apresentada na figura a seguir, uma vez que, este caso é de simples recuperação de um resultado. Às próximas simulações, entretanto, usaremos todo potencial do ensemble para que tenhamos uma qualidade de convergência de maior precisão e de maior confiança.

Depois de vários testes, obtivemos a convergência dos dados obtidos com a implementação numérica e a respectiva curva analítica com apenas 1500 realizações, em um sistema onde consideramos 300 ressonâncias possíveis. Como vemos o resultado numérico está de acordo com o resultado analítico, com um grau de precisão bastante significativo, confirmando sua precisão e a eficácia do método.

4 O EFEITO SEEBECK E O TRANSPORTE DE SPINS

Até agora nossas discussões foram permeadas pelo conceito de transporte de carga elétrica a partir de uma diferença de potencial. Não é necessário muito esforço para logo associar o fenômeno a algo que, certamente, é de conhecimento do senso comum. Ou seja, não é preciso anos de estudo de física para se entender que ao se conectar uma TV na tomada da rede elétrica, essa estará pronta para ser utilizada, uma vez que a rede lhe fornece corrente elétrica necessária para o seu funcionamento, ofertando-lhe energia elétrica através do transporte da carga.

O que não é senso comum, entretanto, são alguns fenômenos relacionados ao transporte da carga elétrica quando o construímos em situações específicas como, por exemplo, quando a corrente atravessa um campo magnético \vec{B} perpendicular à sua direção de propagação, ou seja, à direção do campo elétrico \vec{E} que a produz.

Nestas circunstâncias, sobre cada portador de carga que compõe a corrente elétrica, atuará uma força magnética \vec{F}_m que deslocará os portadores de carga em uma direção perpendicular tanto ao campo magnético, quanto ao próprio campo elétrico gerador da corrente. Esse deslocamento de cargas, conhecido como efeito Hall⁸, gera uma diferença de potencial transversal a \vec{B} e \vec{E} que, entre outras aplicações, serve para se determinar o sinal da carga elétrica em diversos tipos de materiais, por exemplo.

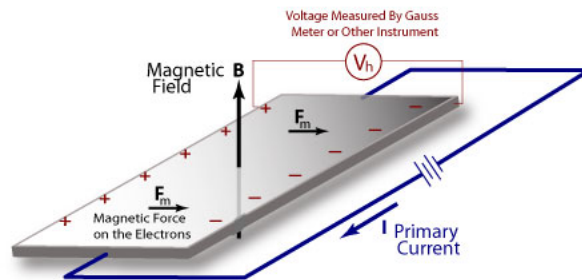


Figura 14: Efeito Hall sobre elétrons quando imersos em um campo magnético perpendicular à sua direção de propagação. A figura foi extraída da referência [20]

Muito menos intuitivo ainda, é imaginar que nas junções de condutores e/ou semicondutores é possível se construir uma tensão elétrica em um circuito fechado - que posteriormente pode ser utilizada para o transporte de carga elétrica - quando estes materiais são mantidos a temperaturas diferentes. O que significa que a partir de uma diferença de temperatura se gera uma força eletromotriz originada das propriedades térmicas associadas ao sistema. Esse efeito, conhecido como efeito Seebeck⁹ (bem como o efeito Peltier), será o fenômeno foco de nossa atenção a partir de agora. Porém, investigaremos não somente o efeito que relaciona a diferença de temperatura às propriedades elétricas da matéria. Estudaremos, principalmente, algo ainda menos intuitivo que é o efeito da diferença de temperatura no

⁸Edwin H. Hall, em 1879, durante seu doutorado descobriu o efeito de campos magnéticos sobre portadores de carga elétrica. O efeito, hoje conhecido como efeito Hall, serviu para descoberta de cargas negativas, mesmo que muitos anos antes da descoberta do elétron.

⁹Thomas Johann Seebeck (1770 – 1831) muito embora tenha sido formado em medicina Universidade de Göttingen, em 1802, optou pela física e foi o físico responsável pela descoberta do efeito termoeletrico que leva seu nome, em 1821.

transporte de outra propriedade da matéria relacionada ao seu caráter magnético. A saber, o efeito da diferença de temperatura sobre os spins das partículas. Mas, antes, vamos apenas lembrar três efeitos termoelétricos de maior impacto e que servem de alicerce para nosso estudo.

4.1 EFEITOS TERMOELÉTRICOS: PELTIER, SEEBECK E THOMSON

Ainda numa análise contra-intuitiva, podemos destacar três efeitos que relacionam questões térmicas a questões elétricas e que compõem o cenário que traz os fundamentos necessários para a compreensão do efeito seebeck de spin que será analisado na próxima seção. Aqui, destacaremos os três efeitos termoelétricos relevantes. Segundo a referência [21], abaixo destacaremos ainda que de maneira enciclopédica os efeitos termoelétricos em questão.

- **O Efeito Peltier** ocorre quando se estabelece nos terminais de um dispositivo termoelétrico uma diferença de temperatura. Esse gradiente de temperatura cria uma corrente elétrica induzida termicamente. A partir da movimentação de elétrons e buracos ocorre a produção ou absorção de calor em uma junção de dois condutores diferentes. Esse fluxo de calor serve, por exemplo, para aquecer ou resfriar materiais e é dado por

$$\frac{dQ}{dt} = (\Pi_A - \Pi_B)I$$

onde Π_A e Π_B são os coeficientes Peltier dos condutores e I a corrente elétrica que por eles passa. Esses coeficientes representam a quantidade de calor que é gerada por unidade de carga que se movimentam quando o gradiente de temperatura é estabelecido nos terminais do dispositivo termoelétrico.



Figura 15: Uma corrente elétrica é forçada a passar por junções de metais diferentes, resultando em aquecimento de uma e resfriamento de outra. Figura extraída da referência [25]

- **O Efeito Seebeck** é o surgimento de uma força eletromotriz na junção de dois condutores diferentes mantidos a temperaturas diferentes. A força eletromotriz V é dada por

$$V = -B(T_H - T_C)$$

Onde B é o coeficiente Seebeck. Esse coeficiente representa a razão entre a diferença de potencial elétrico e a diferença de temperatura gerada: $B = \frac{\Delta V}{\Delta T}$.

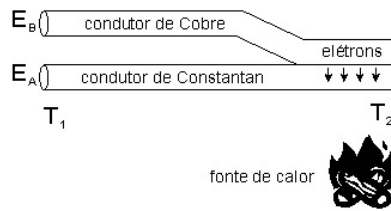


Figura 16: Ao se conectar dois metais diferentes (ou ligas metálicas), têm-se um circuito tal que, se as junções forem mantidas em temperaturas diferentes, surgirá uma f.e.m. termoeletrica e uma corrente elétrica "i" circulará pelo chamado "par termoeletrico" ou "termopar". Figura extraída da referência [26].

- **O Efeito Thomson** é a produção ou absorção de calor em um condutor com um gradiente de temperatura, enquanto uma corrente flui através dele. Thomson mostrou que se as forças eletromotrizes de Peltier são as únicas forças de soldagens em um circuito fechado. Portanto, a força eletromotriz resultante (relacionadas ao efeito Seebeck) deve depender linearmente da temperatura. O fluxo de calor produzido ou absorvido pelo condutor é dado por

$$\frac{dq}{dt} = -KJ\Delta T$$

Onde J é a densidade de corrente e K o coeficiente Thomson.

Na referência [21] é possível se encontrar a relação entre os coeficientes Π , S e K dos três efeitos, porém o cálculo destes coeficientes em função de grandezas fundamentais da termodinâmica não é algo tão fácil de se executar. Muitas pesquisas aplicam a teoria de Onsager [22] para processos irreversíveis para calcular os coeficientes termoeletricos em função dos coeficientes lineares de Onsager. Porém, esses coeficientes não são mais fundamentais que os coeficientes termoeletricos, além de carregarem consigo a dificuldade de calculá-los.

4.2 O EFEITO SEEBECK DE SPIN

Associado aos fenômenos termoeletricos, temos, ainda, um fenômeno que inclui nessa classe de manifestações da natureza o caráter magnético a ela associado. Os fenômenos onde há essa manifestação de caráter magnético podem ser investigados se tivermos um olhar atento par o spin das partículas.

O spin de uma partícula é uma propriedade que está relacionada às possíveis orientações que a partícula pode assumir quando imersas em campos magnéticos. Pelo menos, essa é a ideia que se tem na mecânica quântica, mesmo que seja mais uma ideia para se construir uma imagem desta propriedade da matéria - uma vez que se associa ao momento angular intrínseco da partícula - do que algo que se apresente como manifestação física da mesma. Mais vale pensar, portanto, que o spin na realidade é apenas mais um número quântico que se associa ao estado da partícula e cujo valor ajuda a descrever esse estado. Portanto, ainda que seja apenas uma questão de associação de uma forma pictórica à propriedade, consideraremos que existem dois tipos de spins para o átomo: up(\uparrow) ou down(\downarrow), tal qual a carga, positiva ou negativa. Sendo assim, todo nosso estudo será norteado por estes dois estados relacionados a propriedade em questão.

Posto, então, que existem duas possibilidades para os estados de spin de uma partícula, podemos analisar o chamado efeito Seebeck de spin. Este efeito refere-se à geração de uma tensão de spins como resultado de um gradiente de temperatura. Por conseguinte, tal qual se faz com a carga elétrica, podemos definir uma voltagem de spin escrita dada por

$$\mu = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}, \quad (109)$$

onde os índices \uparrow e \downarrow referem-se evidentemente aos spins up e down, repectivamente. Por associação de ideias com o que acontece no eletromagnetismo, uma corrente de spins é gerada a partir da definição de um gradiente para esta voltagem.

Em um magneto metálico, a condução de portadores de carga com spins up ou down têm notadamente taxas de espalhamento e densidades diferentes. Portanto, possuem coeficientes Seebeck diferentes, como se tais coeficientes estivessem intrinsecamente associados ao magneto ou, ainda, como se os próprios portadores de spin diferentes estivessem presentes no magneto [23]. Uma vez que se gera sobre o condutor metálico um gradiente de temperatura, diferentes taxas de elétrons em diferentes canais de spin surgem ao longo desse gradiente. Este é o cenário, ora posto, para a investigação do efeito seebeck de spin. Tomando como material de invetigação um magneto metálico, tem-se o mesmo comportamento de um termopar, se considerarmos o espaço de spin associado a ele. A figura abaixo mostra a construção da ideia para os dois sistemas. Como podemos ver , o gradiente de temperatura ao criar

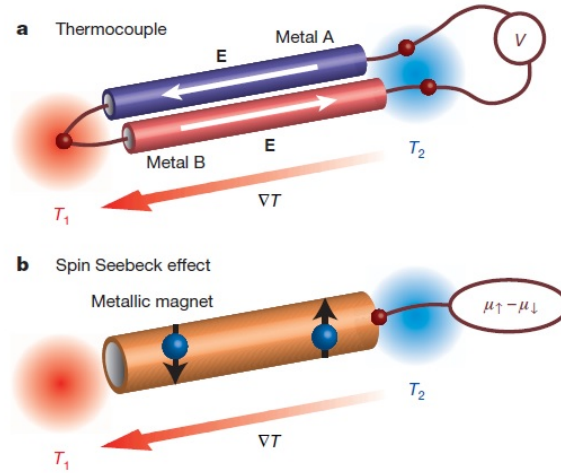


Figura 17: Ilustração do termopar sob uma tensão elétrica gerada a partir de um gradiente de temperatura e o magneto metálico sob uma tensão de spin gerada, também, por um gradiente de temperatura. A figura foi extraída da referência [23].

a separação de spins e, por consequência, a tensão de spin, μ , magnetiza o material. Para sermos mais específicos, consideramos que o magneto possui magnetização uniforme ao ser submetido a um gradiente de temperatura e, ainda, que seu comprimento é muito maior que o comprimento de difusão de spins¹⁰ dentro dos limites do gradiente de temperatura. Esta construção, associada a argumentos da termodinâmica, prevê a distribuição dos potenciais eletroquímicos de spins up e down ao longo do magneto como mostra a figura 18 a seguir.

¹⁰O comprimento de difusão de spins é a distância percorrida pelos elétrons espalhados num metal sem que esse espalhamento provoque uma perda de polarização dos spins

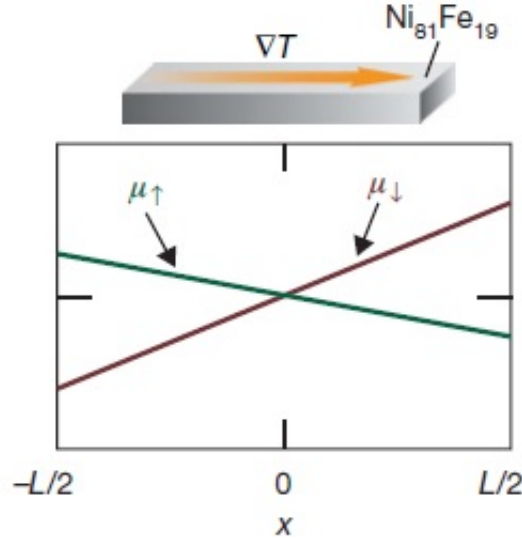


Figura 18: Distribuição de potenciais de spin ao longo do magneto submetido a um gradiente de temperatura. A figura foi extraída da referência [23].

O propósito deste projeto é compreender como se pode detectar a corrente de spin gerada no magneto sob as condições postas acima. Sendo assim, vamos entender como se dá o fenômeno para spins e como podemos mensurar a corrente de spins gerada neste fenômeno.

4.2.1 O Efeito Spin-Hall Inverso (ESHI)

É um efeito recentemente descoberto e uma ótima ferramenta para se detectar uma voltagem de spin tal qual dada pela equação (109). O ESHI é a geração de uma força eletromotriz (E_{SHE}) a partir de uma corrente de spins. Esta corrente carrega uma polarização, $\vec{\sigma}$, de spin ao longo da direção de \vec{J}_s . A relação entre \vec{J}_s , $\vec{\sigma}$ e \vec{J}_c , é dada por

$$\vec{J}_{c(SHE)} = D_{(ISHE)} \vec{J}_s \times \vec{\sigma} \quad (110)$$

Vê-se que, uma vez medida E_{SHE} , podemos usá-la para detectar a corrente de spin [23].

Existem duas razões para que ocorra o efeito hall de spin. A primeira é devido a assimetria no espalhamento de elétrons com spins up e down, que é um fator extrínseco para o efeito hall de spin. E, a segunda devido a razões topológicas na estrutura das bandas, que é um fator intrínseco [24] ao sistema. Observa-se, por exemplo que a eficiência D_{ISHE} aumenta nos metais nobres, sendo mais evidente o efeito neste tipo de material. Ambos os efeitos, entretanto, são remanescentes de efeitos relativísticos ou da interação spin-órbita.

É importante lembrar que a interação spin-órbita, que é responsável pelo efeito hall de spin, também a é para o fenômeno inverso (ESHI). Ou seja, o processo no qual uma corrente de spin gera uma corrente de elétrons. A corrente de spins \vec{J}_s carrega consigo uma polarização de spins, $\vec{\sigma}$, ao longo da direção \vec{J}_s . O fato de termos a presença de \vec{J}_s , significa que elétrons com spins diferentes viajam em sentidos diferentes neste espaço, como mostra a figura 19. A interação spin-órbita desses dois elétrons nessa banda induz a corrente de carga transversal a \vec{J}_s , que por sua vez é responsável pelo ESHI.

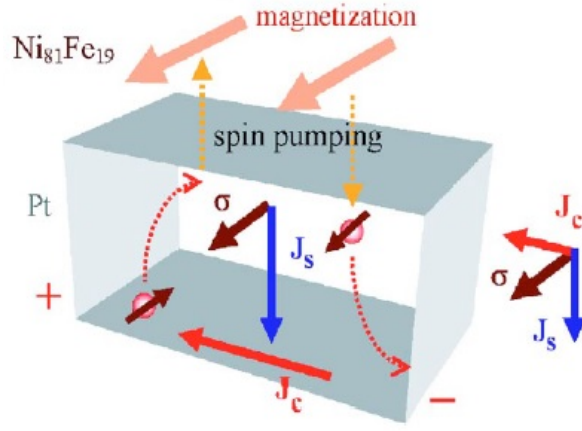


Figura 19: Movimentação da corrente de spin. Este fluxo de corrente de spin gera o ISHE. A figura foi extraída da situação [24].

Como foi visto na figura 18, o gradiente de temperatura foi aplicado na direção x . Os potenciais de spin são escritos na forma

$$\mu^\uparrow = \mu_\uparrow^c - e\Phi \quad (111)$$

e

$$\mu^\downarrow = \mu_\downarrow^c - e\Phi, \quad (112)$$

onde as equações μ_\uparrow^c e μ_\downarrow^c são os potenciais eletroquímicos de spin que dependem da temperatura e da densidade de spins n_\uparrow e n_\downarrow . Portanto, expandindo o gradiente de μ_\uparrow e μ_\downarrow em função destes parâmetros, temos que

$$\nabla\mu_\uparrow = \frac{\partial\mu_\uparrow^c}{\partial n_\uparrow}\nabla n_\uparrow + \frac{\partial\mu_\uparrow^c}{\partial T}\nabla T - e\nabla\Phi \quad (113)$$

e

$$\nabla\mu_\downarrow = \frac{\partial\mu_\downarrow^c}{\partial n_\downarrow}\nabla n_\downarrow + \frac{\partial\mu_\downarrow^c}{\partial T}\nabla T - e\nabla\Phi \quad (114)$$

No lado direito das equações (113) e (114), o primeiro termo é um termo de modulação relacionado ao acúmulo de partículas; o segundo termo é um termo de contribuição da entropia relacionados com a subbanda de spins. E como ∇n_\uparrow e ∇n_\downarrow , quando comparados com a ordem de grandeza da amostra ($L = 6mm$), decaem rapidamente com o comprimento de difusão dos spins ($5 nm$, no $NiFe$) e os termos de acúmulo têm uma contribuição muito menor que os termos de entropia, a diferença entre os gradientes dos potenciais de spin torna-se

$$\nabla(\mu_\uparrow - \mu_\downarrow) = \left(\frac{\partial\mu_\uparrow^c}{\partial T} - \frac{\partial\mu_\downarrow^c}{\partial T} \right) \nabla T \quad (115)$$

de onde vem que

$$\nabla(\mu_\uparrow - \mu_\downarrow) = e \frac{1}{e} \left(\frac{\partial\mu_\uparrow^c}{\partial T} - \frac{\partial\mu_\downarrow^c}{\partial T} \right) \nabla T \quad (116)$$

para, finalmente, escrevermos

$$\nabla(\mu_\uparrow - \mu_\downarrow) = eB_s\nabla T \quad (117)$$

Em geral, para um magneto metálico, temos que $\left(\frac{\partial\mu_{\uparrow}^c}{\partial T} - \frac{\partial\mu_{\downarrow}^c}{\partial T}\right) \neq 0$, o que significa que um gradiente de temperatura induz um gradiente finito de voltagem de spin. E, por questões de simetria, μ_{\uparrow} e μ_{\downarrow} cruzam-se no meio da amostra, como pode ser visto na figura 18.

Como se pode ver, os fenômenos termoelétricos e termomagnéticos estão associados e, portanto, se faz necessária uma teoria que relacione todos esses em equações únicas para que possamos ter uma compreensão global do papel de cada termo de distribuição de cargas e spins previstas nos fenômenos já investigados tanto do ponto de vista teórico, quanto do ponto de vista experimental.

4.3 CALORITRÔNICA DE SPIN

Os fenômenos termoelétricos e termomagnéticos são reflexos do acoplamento entre as correntes de carga elétrica e o fluxo de calor e podem ser encontrados nas junções de dois condutores diferentes com aplicações possíveis em termômetros, sistemas aquecedores e refrigeradores. Além dessas possibilidades, as correntes de calor também interagem com correntes de spins, servindo, portanto, como sistemas que podem proporcionar uma magnetização em um metal específico. Estas possibilidades de interação geraram um campo de estudo cunhado de **spin caloritronics** - do termo original - que se relaciona com fenômenos estatísticos de não-equilíbrio de spins, cargas, entropia e transportes de energia em dispositivos e estruturas magnéticas.

O grande desafio da física da matéria condensada é desenvolver a informação "verde" e tecnologias de comunicação, além de dispositivos eficientes para escoamento do calor residual proveniente de circuitos elétricos de pequena escala. É ainda, a possibilidade real do colapso da lei de Moore, uma vez que, à medida que se reduz o tamanho dos resistores e se aumenta a sua capacidade de processamento de dados, cresce em paralelo a energia dissipada por efeito Joule atingindo valores intoleráveis e que, portanto, necessitam de um controle maior para que possa, inclusive, ser utilizada e/ou escoada de forma mais adequada. É aqui que a física mesoscópica tem um papel fundamental neste novo campo de estudo, visto que o grau de liberdade adicional, inserido com a presença do spin do elétron, traz a possibilidade de novas funcionalidades para novos dispositivos sem, necessariamente, se utilizar a corrente de carga elétrica que gera os tais níveis intoleráveis de calor residual provenientes de características intrínsecas destes dispositivos quando postos em funcionamento.

Precisamos, portanto, entender como se relacionam as questões elétricas com as questões térmicas no que se refere a sistemas onde estão presentes gradientes de temperatura às regiões onde existem diferenças de potencial elétrico, visto que - como ilustrado na descrição dos efeitos Seebeck, Peltier e Thomson - os parâmetros térmicos e elétricos estão intimamente interrelacionados. Para isso, feremos um breve resumo da termoeletricidade, para que se possa compreender a influência da temperatura nas questões elétricas de um sistema.

4.3.1 Termoeletricidade: um pequeno resumo

Já sabemos que uma corrente de calor \mathcal{Q} carrega consigo cargas elétricas gerando uma corrente J_c , como acontece nos termopares. Da mesma forma, a uma corrente de carga

elétrica é associada uma corrente de calor, que serve para aquecer ou resfriar junções de materiais diferentes, como o que acontece no efeito Peltier, por exemplo.

Para um metal suficientemente grande, a relação entre a força motora nas cargas (via campo elétrico) em função da diferença de potencial $E = -\nabla_r V$ e o gradiente de temperatura $\nabla_r T$, pode ser escrita como

$$\begin{pmatrix} -\nabla_r V \\ Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma} & B \\ \Pi & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{c} \\ -\nabla_r T \end{pmatrix} \quad (118)$$

onde σ é a condutividade elétrica, \mathbf{B} é o coeficiente Seebeck e κ é a condutividade térmica do material. Na referência [28], tem-se a relação entre os coeficientes Seebeck e Peltier $B = \Pi T$, como consequência da reciprocidade de Onsager [29].

Quando a condutividade em função da energia varia linearmente na escala térmica de energia $k_B T$, vale a aproximação de Sommerfeld. Ou seja, quando $L_0 T^2 |\partial_\varepsilon^2 \sigma(\varepsilon)|_{\varepsilon_F} \ll \sigma(\varepsilon_F)$, vale [27]

$$B = -e L_0 T \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln \sigma(\varepsilon) \right|_{\varepsilon_F} \quad (119)$$

onde a constante de Lorenz é dada por $L_0 = (\frac{\pi^2}{3})(\frac{k_B}{e})^2$ e $\sigma(\varepsilon)$ é a condutividade em torno da energia de Fermi. Neste regime[27], vale a lei de Wiedemann-Franz $\kappa = \sigma L_0 T$.

As condições para interfaces e junções de tunelamento para fenômenos termoelétricos são obtidas trocando-se os gradientes pelas variações (aproximações de primeira ordem) na equação (118) e, ainda na mesma equação, a condutividade (σ) pela condutância (G) para podermos escrever,

$$\begin{pmatrix} -\Delta V \\ Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{G} & B \\ \Pi & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{c} \\ -\Delta T \end{pmatrix} \quad (120)$$

Considerando que a região de espalhamento do ponto quântico se situa entre dois reservatórios cuja distribuição eletrônica obedece à estatística de Fermi-Dirac, as funções distribuição dos reservatórios à esquerda e à direita da região de espalhamento serão chamadas de f_L e f_R , respectivamente. Tem-se, segundo [27], a transmissão de probabilidade como função da energia ε dada por

$$g(\varepsilon) = \sum_{nm}^{\varepsilon_n = \varepsilon_m = \varepsilon} |t_{nm}|^2 \quad (121)$$

onde, como já se sabe, t_{nm} é o coeficiente de transmissão de um elétron que deixa reservatório do lado esquerdo da região de espalhamento pelo canal \mathbf{n} e chega no lado direito da região de espalhamento pelo canal \mathbf{m} em direção ao reservatório daquele lado do sistema. O fluxo(corrente) de carga através da junção, é dado por

$$J_c = \frac{e}{h} \int d\varepsilon g(\varepsilon) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \quad (122)$$

bem como o fluxo de calor será dado por

$$Q = \frac{1}{h} \int d\varepsilon g(\varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_F) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \quad (123)$$

Quando a função de distribuição $g(\varepsilon)$ varia lentamente, a integral pode ser resolvida analiticamente utilizando-se a expansão de Sommerfeld na distribuição de Fermi-Dirac. Isto nos leva a expressões lineares para as correntes em termos dos parâmetros vistos na equação (120), com

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{nm}^{\varepsilon_F} |t_{nm}|^2 \quad (124)$$

e, também,

$$B = -eL_0T \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln g(\varepsilon) \right|_{\varepsilon_F} \quad (125)$$

Uma maneira geral e intuitiva de se compreender o transporte em dispositivos magnetoeletrônicos é fazer uso da teoria de circuitos. Ainda mais quando a estrutura, que pode ser uma multicamada metálica ou um número grande de pontos quânticos, não é totalmente coerente, entendendo principalmente que efeitos quânticos são relevantes nas seções das amostras, tal qual em suas interfaces ou mesmo em seus pontos de contato. Como cada elemento deste circuito quântico pode ser entendido como um resitor, podemos enxergá-los como que conectados entre si. Portanto, há regiões que podem ser entendidas como espaços vazios entre eles. Essas regiões são chamadas de "nodos" e podem ser descritas por modelos semiclássicos.

A função de distribuição semi clássica nestes nodos apresentam dependência local na temperatura e nos potenciais químicos que são conectados por matrizes de espalhamento e podem ser calculadas completamente por princípios da mecânica quântica. As probabilidades de transmissão e reflexão em cada um desses resitores, por exemplo, são necessariamente condições de contorno para a equação de difusão de Boltzmann nos nodos em questão.

A aproximação considerada nesta seção pode ser estendida para as propriedades de transportes de sistemas magnéticos não colineares com corrente alternada e corrente contínua, incluindo suas propriedades termoelétricas. Com aproximações adicionais, tais como uma função distribuição constante no espaço, conservação de carga, conservação de spin e guias de energia para as leis de Kirchhoff estendidas, resultados analíticos podem ser obtidos para propriedades do modelo de transporte de circuitos e dispositivos não triviais.

4.3.2 Dependência termoelétrica em uma hetero estrutura metálica magnética

As questões termoelétricas em metais são governadas pela distribuição de energia dos elétrons e pela condutividade nos níveis de energia da ordem de $K_B T$ em torno da energia de Fermi.

A figura 20 mostra uma diferença de temperatura da ordem de $K_B T$ representada pela faixa hachurada ao longo da direção x do gráfico. Vê-se que há um fluxo de elétrons à esquerda para os elétrons que possuem energia maior que o nível de Fermi, bem como ocorre o mesmo para os buracos que estão abaixo deste nível de energia. Isto cria uma corrente de calor transportada pelos elétrons que se deslocam para a esquerda; e, como se pode conferir, a corrente de elétrons é maior que a corrente de buracos ao longo da direção x . Ou seja, ainda há uma corrente líquida de elétrons se opondo à corrente de calor, o que nos leva a concluir

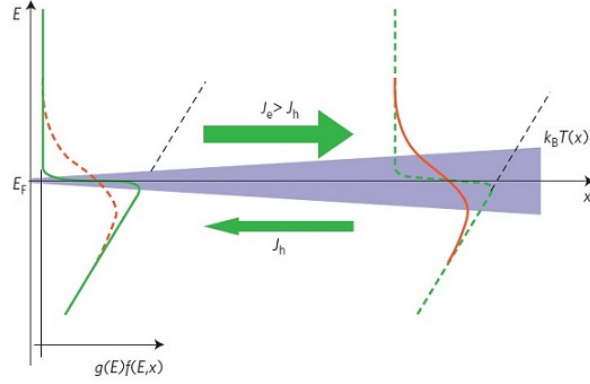


Figura 20: Corrente de calor induzindo uma corrente de carga elétrica ao longo da direção longitudinal do gradiente de temperatura. A figura foi extraída da referência [27].

que o acúmulo de cargas nos terminais do metal dá origem a uma voltagem termoelétrica criada por esse gradiente de temperatura.

Entretanto, as propriedades termoelétricas em um ferromagneto metálico isotrópico são afetadas devido a dependência destas com o spin $\sigma^{(s)}$ (ε) sendo as possibilidades up (\uparrow) e down (\downarrow) para os índices s . Sendo assim, a carga total vem de

$$\sigma = \sigma^{(\uparrow)} + \sigma^{(\downarrow)} \quad (126)$$

que já mostra claramente a influência do índice de spins sob a carga e que, junto com o coeficiente seebeck,

$$B = \frac{(\sigma^{(\uparrow)} S^{(\uparrow)} + \sigma^{(\downarrow)} S^{(\downarrow)})}{(\sigma^{(\uparrow)} + \sigma^{(\downarrow)})}, \quad (127)$$

completa a análise da influência do spin sobre as correntes em questão. Considerando as mesmas condições físicas da seção anterior, têm-se

$$\begin{pmatrix} J_c \\ J_s \\ Q \end{pmatrix} = \sigma(\varepsilon_F) \begin{pmatrix} 1 & P & BT \\ P & 1 & P' BT \\ BT & P' BT & \frac{\kappa T}{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\nabla \mu_c}{e} \\ \frac{\nabla \mu_c}{2e} \\ \frac{-\nabla T}{T} \end{pmatrix}, \quad (128)$$

onde as correntes de carga e de spin são dadas por $J_{C(B)} = J^{(\uparrow)} \pm J^{(\downarrow)}$, a corrente de calor $Q = Q^{(\uparrow)} + Q^{(\downarrow)}$ e P e P' são relacionados com a polarização de spins da condutividade e sua variação em função da energia e são dadas, respectivamente, por

$$P = \frac{\sigma^{(\uparrow)} - \sigma^{(\downarrow)}}{\sigma}; \quad P' = \left. \frac{\partial(P\sigma)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon_F} \quad (129)$$

Já os potenciais eletroquímico e de spin são dados por

$$\mu_c = \frac{\mu^{(\uparrow)} + \mu^{(\downarrow)}}{2}; \quad \mu_s = \mu^{(\uparrow)} - \mu^{(\downarrow)} \quad (130)$$

A simetria nos termos de spin existente na equação (128) reflete a reciprocidade de Onsager e, como pode ser visto, uma corrente de spin é construída a partir de um gradiente de temperatura (efeito Seebeck dependente de spin), bem como uma corrente de calor é construída a partir de um acúmulo de spin (efeito Peltier dependente de spin). Os dois efeitos proporcionais ao termo $P'BT$.

É importante ressaltar que a dependência da corrente de calor com os índices de spins up e down, presentes, não aparece na equação (128) devido ao fato de que um gradiente de temperatura de spin, escrito como $T_s = T^\uparrow - T^\downarrow$, ser resultado da interação spin-spin ou mesmo do espalhamento de elétrons devido a vibrações da própria rede (Phonons), interações estas que, na escala nanométrica a baixas temperaturas, não produzem efeitos significativos quando comparados aos efeitos que estão sendo levados em consideração nesta análise.

4.4 Relações de Onsager nos acoplamentos elétricos, termoeletrônicos e transporte de spin

As relações de reciprocidade de Onsager são as principais ferramentas para se compreender os problemas estatísticos de não-equilíbrio. Elas nos dizem quais são os coeficientes para respostas lineares ente as densidades de fluxos e as forças termodinâmicas, abrindo caminho para a compreensão dos efeitos Seebeck e Peltier com a presença de spins que nos levam, por exemplo, à equação (125). Tais relações são baseadas em princípios fundamentais de microreversibilidade para sistemas que possuem simetria de reversão temporal (SRT). Quando a SRT é quebrada, entretanto, a microreversibilidade exige inverter todas as componentes dos campos responsáveis por essa quebra de simetria. Se fizermos uma combinação de todas essas componentes em um único Hamiltoniano, as relações de reciprocidade de Onsager nos garantem que [19]

$$\mathcal{L}_{ij}(H) = \mathcal{L}_{ij}(-H), \quad (131)$$

onde \mathcal{L}_{ij} são os coeficientes lineares que determinam as respostas das densidades dos fluxos \mathcal{J}_i para as forças termodinâmicas \mathcal{X}_j [22]. Sendo assim, para podermos escrever as relações de Onsager para um sistema, precisamos, antes de mais nada, entender quais são as simetrias que o sistema apresenta para podermos ter uma forma precisa de expressar esses coeficientes. Uma das motivações para tentar se entender essas simetrias aparece nos aspectos fundamentais da spintrônica e da caloritrônica por meio dos efeitos Seebeck e Peltier de spin, uma vez que os coeficientes de Onsager são de grande interesses à descrição desses fenômenos.

Recentemente, as dez classes de simetrias possíveis foram foco de atenção nessa descrição, por causa de questões que envolvem fases topológicas não triviais que delas, as tais simetrias, dependem. É devido a esse fato que é importante conhecer as possíveis simetrias presentes nesses sistemas. Em muitos casos, entretanto, existem relações específicas adicionais que surgem a partir da conservação de espécies de quasi-partículas¹¹, da presença de partículas e buracos ou da simetria na subrede chiral. Este é o caso do fenômeno de transporte

¹¹São fenômenos que ocorrem em sistemas microscópicos complexos, os quais se comportam como se existissem neles partículas fracamente interagentes. Para os nossos propósitos, podemos citar como exemplo o caso do movimento dos elétrons na banda de valência de um semi condutor que gera características no sistema de existência de quasi-partículas carregadas positivamente, as quais sabemos ser as lacunas ou buracos no sistema.

termoelétrico para dois terminais na classe de simetrias de Wigner-Dyson, para as quais a relação entre os coeficientes Seebeck (B) e Peltier (II) tornam-se equivalentes uma vez que podem ser escritas como $B(H)T_0 = \Gamma(H)$ ou $B(H)T_0 = \Gamma(-H)$, onde T_0 é a temperatura de referência, uma vez que $\Gamma(H) = \Gamma(-H)$.

4.4.1 As dez classes de simetria

Segundo a referência [29], o hamiltoniano do sistema de transporte depende efetivamente da presença ou ausência de algumas classes de simetrias que o mesmo pode carregar. A saber,

- Simetria de Reversal Temporal (SRT) e Simetria de Rotação de Spin (SRS), para as quais são definidas as três classes de Wigner-Dyson. Segundo a nomenclatura de Cartan, tem-se
 1. Classe A quando são quebradas tanto SRT quanto SRS, simultaneamente
 2. Classe AI quando estão presentes SRT e SRS, simultaneamente
 3. Classe AII quando SRS é quebrada, mas SRT ainda está presente

Lembrando que, quando a SRT é quebrada, a presença de SRS apenas afeta o tamanho do hamiltoniano, mas não sua simetria e, portanto, não existem quatro classes de simetria.

- Classe Chiral que recupera a estrutura do operador de Dirac da cromodinâmica quântica (CDQ). Além de férmions relativísticos que são apropriados para descrever o hamiltoniano de grade bipartida com presença da simetria de subgrade (SLS, do inglês sublattice symmetry)
- Classes de Bogoliubov–de Gennes (BdG) aparecem nos Hamiltonianos quando existe o contato entre metais normais e supercondutores. São as classes de Altland-Zirnbauer
 1. Classes C e CI quando está presente a SRS
 2. Classes D e DIII quando não está presente a SRS
 3. Classes CI e DIII quando está presente a SRT
 4. Classes C e D quando não há SRT

Quando estamos considerando tais sistemas, é comum utilizar o hamiltoniano de BdG,

$$H = \begin{pmatrix} h - \mu_{SC} & \Delta \\ \Delta^* & \mu_{SC} - \sigma^y h^* \sigma^y \end{pmatrix} \quad (132)$$

onde a matriz de Pauli σ^y atua no grau de liberdade de spin, enquanto que μ_{SC} no supercondutor.

A referência [30] traz uma unificação para todos os hamiltonianos de simetrias considerados acima. Nela, considera-se a SRT e a PHS¹² que podem ser representadas por operadores anti-unitários e podem ter as duas simetrias quebradas ou preservadas. Quando são quebradas, representa-se essa classe por 0, enquanto que no segundo caso, o operador anti-unitário assume valores +1 ou -1. O valor +1 para uma SRT corresponde a partículas sem spin ou com spin inteiro. Já o valor -1 corresponde a partículas de spin semi-inteiro. Mas, para o hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes, mantendo-se a PHS, o valor +1 corresponde ao tripleto de emparelhamento, enquanto que o valor -1 corresponde ao singlete de emparelhamento [29].

Uma vez que existem duas possibilidades distintas quando SRT e PHS são quebradas, a simetria representada pelo produto de dois operadores anti-unitários nos dá 0 quando a simetria correspondente é quebrada ou +1 quando preservada. Tem-se, portanto, dez classes de simetrias possíveis. Usando apenas os três índices definidos, podemos construir uma tabela que mostra estas classes de simetrias possíveis a partir de uma leitura mais compacta.

Tabela 2: Classificação das dez classes de simetrias para os Hamiltonianos, seguindo a nomenclatura de Cartan. Os índices 0 e ± 1 representam as simetrias quebradas e/ou preservadas, respectivamente

Classes de simetria	Tipo de simetria	TRS	PHS	SLS
Wigner-Dyson	A(unitária)	0	0	0
	AI(ortogonal)	+1	0	0
	AII(simplético)	-1	0	0
Chiral	AIII(unitária)	0	0	1
	BDI(ortogonal)	+1	+1	1
	CII(ortogonal)	-1	-1	1
Altland-Zirnbauer	D	0	+1	0
	C	0	-1	0
	DIII	-1	+1	1
	CI	+1	-1	1

Para esta classificação, as possíveis simetrias que satisfazem o hamiltoniano nos conduzem

¹²Simetria Partícula-Buraco. Decidimos manter a sigla do inglês Particle-Hole Symmetry para não haver conflito, neste caso, com a referência citada.

a:

- Para SRT tem-se: $H = THT^{-1}$ com $T = -iK$ com a conjugação complexa do operador K para o caso de partículas sem spin e $T = -i\sigma^{(y)}K$ para férmions com spin $\frac{1}{2}$, sendo a matriz de Pauli $\sigma^{(y)}$ atuando no espaço de spin.
- Para PHP tem-se: $H = -PHP^{-1}$ com $P = -i\sigma^{(y)}\tau^{(y)}K$, com a matriz de Pauli $\tau^{(y)}$ atuando no espaço de Nambu.
- Para SLS tem-se: $H = -\eta^{(z)}H\eta^{(z)}$, sendo a matriz de Pauli $\eta^{(z)}$ atuando no espaço da subrede.

A título de informação, apenas, existem maneiras pelas quais se pode quebrar as simetrias descritas na tabela 2 (TRS, PHS e SLS). Essas quebras de simetrias podem ser obtidas a partir de um campo magnético orbital ou da interação spin-órbita, por exemplo.

4.4.2 A matriz S: simetrias e reciprocidades

Como foi visto na seção 3.4, a matriz de espalhamento que conecta as entradas e saídas dos canais de propagação em um ponto quântico e que, com tratamento de Mahaux-Weindermüller, foi obtida na seção 3.5 é o nosso principal elemento de análise na tentativa de descrever um sistema físico onde ocorre transporte de cargas e spins a temperaturas não nulas.

Nesta seção, mostraremos as relações de Onsager apenas utilizando argumentos de simetria para a matriz S quando consideramos apenas sistemas não-interagentes. Sabe-se dos princípios da microreversibilidade que

$$S(H) = \sigma^{(y)}S^T(-H)\sigma^{(y)} \quad (133)$$

onde $\sigma^{(y)}$ é a matriz de Pauli que atua no espaço de spins - como já foi dito na seção anterior - e S^T é a matriz transposta de spins. Tem-se, neste caso, SRT preservada.

Para iniciarmos os argumentos de simetria constrói-se a matriz S a partir dos estados de espalhamento $\phi(H)$ e aplica-se a simetria de reversão temporal com $-i\sigma^{(y)}K\phi_{n\sigma}(-H)$, onde K é um operador com conjugação complexa. Se a reversão temporal é preservada é preciso que haja equivalência entre os estados descritos e, portanto, equivalência entre esses dois resultados [31]. Quando a equação é especificada para partículas de spin semi-inteiro, pode-se reescrevê-la de forma que a propriedade de microreversibilidade se torne mais evidente. Isto elimina dúvidas sobre a possível validade e aplicação do método. Sendo assim,

$$S_{i\sigma,j\sigma'}^{\mu\nu}(H) = \sigma\sigma' S_{i\bar{\sigma},j\bar{\sigma}'}^{\nu\mu}(-H) \quad (134)$$

Aqui os índices i e j referem-se aos canais de transporte, $\mu, \nu = e, h$ são índices de quasi-partículas e $\bar{\sigma} = -\sigma$ são os índices referentes aos spins.

A matriz de espalhamento de Mahaux-Weindenmüller relaciona-se com o hamiltoniano do sistema via,

$$S(\epsilon) = 1 + 2\pi i W^\dagger \frac{1}{(H - \epsilon - i\pi W W^\dagger)} W \quad (135)$$

tendo o espectro de energia simetria em torno da energia zero. A supercondutividade exige a presença de quasi-partículas (elétrons e buracos) e preserva a PHS. Escrevendo-se o hamiltoniano do sistema como na equação (132), a simetria de partícula-buraco nos fornece a relação

$$H = -\sigma^{(y)}\tau^{(y)}H^*\sigma^{(y)}\tau^{(y)} \quad (136)$$

que difere da degenerescência de Krammer pelo sinal negativo [32]. E que, naturalmente, nos conduz a

$$S(H) = -\sigma^{(y)}\tau^{(y)}S^*(H)\sigma^{(y)}\tau^{(y)} \quad (137)$$

A partir das equações (133) e (137), temos que

$$S_{i\sigma,j\sigma'}^{\mu\nu}(H) = \left[S_{i\sigma,j\sigma'}^{\bar{\mu}\bar{\nu}}(H) \right]^* = \sigma\sigma' S_{j\bar{\sigma}',i\bar{\sigma}}^{\nu\mu}(-H) = \sigma\sigma' \left[S_{j\bar{\sigma}',i\bar{\sigma}}^{\bar{\nu}\bar{\mu}}(-H) \right]^* \quad (138)$$

onde os índices de quasi-partículas são $\mu\nu = +1(e), -1(h)$ quando aparecem como pré-fatores.

Para completar nossa análise, vamos analisar agora os elementos de matriz para a SLS. A simetria chiral nos leva a $H = -\eta^{(z)}H\eta^{(z)}$. Introduzindo essa simetria na matriz de espalhamento S, tem-se

$$S(H, \epsilon) = \eta^{(z)}S^\dagger(H, -\epsilon)\eta^{(z)} \quad (139)$$

onde podemos ver que, ao contrário das relações de simetria anteriores, tem-se a dependência da energia escrita de maneira explícita na matriz S e, assim, os elementos da matriz que representam esta simetria são dados por

$$S_{i\sigma,j\sigma'}^{mn}(H, \epsilon) = mn \left[S_{j\sigma',i\sigma}^{nm}(H, -\epsilon) \right]^* = mn\sigma\sigma' \left[S_{j\bar{\sigma}',i\bar{\sigma}}^{nm}(-H, \epsilon) \right]$$

ou ainda,

$$S_{i\sigma,j\sigma'}^{mn}(H, \epsilon) = mn\sigma\sigma' \left[S_{i\bar{\sigma}',j\bar{\sigma}}^{nm}(-H, -\epsilon) \right] \quad (140)$$

com os índices da subrede $m, n = A(+1), B(-1)$.

4.4.3 Formulação geral para o problema de transporte

Quando consideramos um dispositivo com N canais de entrada e N canais de saída, à temperaturas não nulas, a matriz que relaciona os fluxos de carga, calor e spins às respostas lineares é dada por

$$\begin{pmatrix} J_i \\ I_i^{(0)} \\ I_i^{(x)} \\ I_i^{(y)} \\ I_i^{(z)} \end{pmatrix} = \sum_j \begin{pmatrix} \Theta_{ij}^{(00)} & \Gamma_{ij}^{(00)} & \Gamma_{ij}^{(0x)} & \Gamma_{ij}^{(0y)} & \Gamma_{ij}^{(0z)} \\ B_{ij}^{(00)} & G_{ij}^{(00)} & G_{ij}^{(0x)} & G_{ij}^{(0y)} & G_{ij}^{(0z)} \\ B_{ij}^{(x0)} & G_{ij}^{(x0)} & G_{ij}^{(xx)} & G_{ij}^{(xy)} & G_{ij}^{(xz)} \\ B_{ij}^{(y0)} & G_{ij}^{(y0)} & G_{ij}^{(yx)} & G_{ij}^{(yy)} & G_{ij}^{(yz)} \\ B_{ij}^{(z0)} & G_{ij}^{(z0)} & G_{ij}^{(zx)} & G_{ij}^{(zy)} & G_{ij}^{(zz)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_j - T_0 \\ V_j - V_0 \\ \frac{\mu_j^{(x)}}{e} \\ \frac{\mu_j^{(y)}}{e} \\ \frac{\mu_j^{(z)}}{e} \end{pmatrix} \quad (141)$$

Na equação acima, os índices i e j que representam os terminais. Sendo assim, os termos da matriz do lado esquerdo da equação representam:

- J_i são as correntes de calor;
- $I_i^{(0)}$ são as correntes elétrica;
- $I_i^{(\alpha)}$ são as correntes de spins;
- T_j são as temperaturas;
- V_j são os potenciais elétricos;
- $\mu_j^{(\alpha)}$ são os termos de acúmulo de spins ou potenciais de spins.

Já os superíndices têm os seguintes significados:

- Os coeficientes com superíndices (00) são relacionados aos aspectos termoeletricos;
- Os coeficientes $G^{(\alpha\beta)}$ são termos relacionados à condutância elétrica e a condutância dependente de spin. Estes termos são diretamente relacionados com as voltagens elétrica e o acúmulo de spin;
- Os coeficientes $\Gamma^{(0\beta)}$ são os termos relacionados aos elementos de matriz do efeito Peltier de spin que conectam a corrente de calor ao acúmulo de Spins;
- Os coeficientes $B^{(\alpha 0)}$ são os termos relacionados aos elementos de matriz do efeito Seebeck de Spin que conectam as correntes de spin às diferenças de temperaturas.

Os resultados dos efeitos Seebeck e Peltier de spins que compõem a Spin Caloritronica já foram vastamente investigados tanto do ponto de vista teórico, quanto do ponto de vista experimental [23][33].

Podemos agora atacar o problema alvo de nossa investigação, que é a análise do problema de transporte quântico, em sistemas puramente metálicos que podem apresentar simetrias que estão presentes tanto na classe de Wigner-Dyson (esse é o nosso problema propriamente dito), quanto na classe de simetria Chiral. Portanto, a partir de uma análise das correntes possíveis para esses sistemas dentro da classe que efetivamente nos interessa, podemos obter resultados que nos levam à compreensão do problema do transporte quântico. À referência [29] os autores deduzem as equações para as correntes em questão. É possível ver que as correntes elétricas

$$J_{c(i)} = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon \sum_{j,\beta} \left[2N_i \delta_{0\beta} \delta_{ij} - \mathcal{T}_{ij}^{0\beta}(\varepsilon) \right] \times \left[\mu_j^{(\beta)} + \delta_{0\beta} \varepsilon \frac{(T_j - T_0)}{T_0} \right] \quad (142)$$

Enquanto que as correntes de spins são dadas por

$$J_{s(i)} = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \sum_{j,\beta} \left[2N_i \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} - \mathcal{T}_{ij}^{\alpha\beta}(\varepsilon) \right] \times \left[\mu_j^{(\beta)} + \delta_{0\beta} \varepsilon \frac{(T_j - T_0)}{T_0} \right] \quad (143)$$

Como já se sabe, i e j são os índices dos terminais e α e β são os índices relacionados aos spins. É, também, de nosso conhecimento que o potencial eletroquímico $\mu_j^{(0)} = \mu_F + eV_j$ com voltagem V_j e temperatura base T_0 em torno da qual a função de distribuição de Fermi $f = [\exp(\epsilon T^{-1}) + 1]^{-1}$ é expandida [22]. Já o termo $\mu_j^{(\beta)}$ (com $\beta \neq 0$) são as componentes do potencial de spin que aparecem na equação (130).

Vê-se nas equações (142) e (143) a presença dos termos de transmissão $\mathcal{T}_{ij}^{(\alpha\beta)}$ - e, por consequência, os termos de reflexão - que vêm norteando nossa discussão, como pode ser conferida nas equações (32), (46) e (108). Sendo assim, para o problema do sistema puramente metálico, necessitamos encontrar os termos de transmissão para que, dessa maneira, possamos calcular as correntes de carga e spins. Esse fator pode ser calculado pelo traço da matriz S tomado sobre os índices de spins e dos canais de transmissão [34],

$$\mathcal{T}_{ij}^{(\alpha\beta)} = Tr \left[(S_{ij})^\dagger \sigma_i^{(\alpha)} S_{ij} \sigma_j^{(\beta)} \right] \quad (144)$$

Na equação (144), $\sigma_i^{(\alpha)}$ representa um elétron deixando o sistema na direção $\alpha = x, y, z$. Enquanto que $\sigma_j^{(\beta)}$ representa um elétron entrando no sistema pela direção $\beta = x, y, z$. Como já foi dito, as relações de Onsager são obtidas a partir da combinação das equações (142) e (143) e das regras de transformação de $\mathcal{T}_{ij}^{(\alpha\beta)}$ sob aplicação dos princípios da microreversibilidade. Uma vez que as matrizes de Pauli satisfazem a relação,

$$\sigma_{\eta\eta'}^{(\alpha)} = (-1)^{n_\alpha + n_\beta} \mathcal{T}_{ij}^{(\beta\alpha)}(-H, \epsilon) \quad (145)$$

Assim sendo, o sinal negativo na relação de reciprocidade de Onsager entre os spins e os coeficientes de transmissão é tomado quando o spin entra no sistema, bem como o sinal positivo é tomado para spins que deixam o sistema.

4.5 IMPLEMENTAÇÕES NUMÉRICAS: TESTE DA IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA PARA A FORMULAÇÃO DE MAHAUX-WEINDENMÜLLER

Depois de revisado um vasto arcabouço teórico que leva em conta a validade - obviamente já testada - da matriz de espalhamento de Mahaux-Weindenmüller é preciso apresentar recuperação de gráficos fazendo uso dela e dos ensembles de Wigner-Dyson. A recuperação dos resultados obtidos por vários autores dará a fundamentação de validade e a consistência necessária para tornar os nossos resultados confiáveis - do ponto de vista da precisão numérica que eles exigem - e que serão apresentados mais adiante.

4.5.1 Distribuição de cumulantes de carga de um ponto quântico caótico com contatos não ideais

Na referência [36] os autores efetuaram simulações numéricas de pontos quânticos com contatos não ideais com o intuito de obter a distribuição de probabilidades de transporte que se associam aos quatro primeiros cumulantes estatísticos no processo de transferência de carga elétrica. Um dos aspectos testados por eles leva em conta um número grande de canais

abertos que correspondem ao regime semiclássico. Ou seja, a distribuição dos cumulantes tende a se aproximar do regime Gaussiano e como consequência a média e a variância dos cumulantes de transferência de cargas (CTC's) são um caminho para obtenção de resultados relevantes a cerca do sistema em questão.

Porém, se considerarmos o limite quântico extremo, ou seja, quando o número de canais é aproximadamente 1, o sistema é aproximadamente fechado e passa a apresentar efeitos de interferência quântica com mais nitidez. Este procedimento faz com que o limite quântico extremo seja um regime adequado para se compreender efeitos quânticos não perturbativos no problema de transporte nos limites mesoscópicos. Entretanto, neste limite, existe uma grande flutuação dos CTC's e, por isso, a média e a variância tornam-se insuficientes para compreendê-lo. Como consequência, essa distribuição deve ser completamente decifrada visto que, a partir de então, as questões relacionadas com as possíveis flutuações podem ser investigadas e corrigidas, muito embora a literatura já nos apresente resultados bastante precisos no caso dos contatos serem ideais. Assim, ainda que irregular, a distribuição dos CTC's já foi obtida teoricamente e testada experimentalmente, o que demonstra de antemão a eficácia do método testado pelos autores.

Uma maneira de se estudar o problema do transporte através de pontos quânticos é fazer a modelagem de um circuito elétrico onde estão presentes os elementos conhecidos como: conectores, nodos e reservatórios. O papel destes três elementos é descrito abaixo.

- **Reservatórios** são representados por uma função de distribuição e serão considerados como fontes e drenos de carga elétrica.
- **Conectores** são representados por um conjunto de valores \mathcal{T}_{ij} que representam os coeficientes de transmissão para cada canal de espalhamento possível no sistema ou barreiras dos pontos de contatos quânticos.
- **Nodos**, ao contrário dos dois primeiros elementos, que podem ser controlados experimentalmente, são elementos sobre os quais não existe controle experimental possível, visto que representam o deslocamento de fase devido a própria desordem que é uma característica intrínseca do sistema.

O que dificulta o cálculo de qualquer quantidade física relacionada ao transporte quântico é eliminar as influências produzidas por graus de liberdade de pequena escala - e que são afetados pela própria desordem do sistema - filtrando-os, por assim dizer, e levando-se em conta os modos que estão na faixa de escala realmente relevante para se obter as informações sobre os sistema estudado.

Existem, porém, técnicas adequadas para se resolver este problema. A aproximação semi-clássica de Keldysh para a função de Green [36], a expansão diagramática do grupo unitário e o modelo sigma supersimétrico não linear, são exemplos dessas técnicas; muito embora, poucos desses métodos possam alcançar o regime não perturbativo alcançado pelo limite quântico extremo. Neste regime, propriedades estatísticas para os cumulantes de transferência de carga são obtidas para pontos quânticos perfeitamente acoplados aos reservatórios e

os resultados são obtidos fazendo uso apenas da teoria de matrizes aleatórias e as integrais de Selberg.

No trabalho dos autores da referência em análise [36], considera-se como sistema um ponto quântico acoplado de maneira não ideal a dois reservatórios de elétrons de transparência arbitrária, porém iguais para garantir simetria, e com poucos canais de espalhamento como visto na figura 1. O tempo de permanência do elétron no ponto quântico é assumido ser maior que o tempo de Ehrenfest e do tempo de ergodicidade. Diante desta hipótese, a cavidade pode ser considerada dentro do regime caótico universal e o uso da teoria de matrizes aleatórias é justificado.

Utilizando a fórmula de Mahaux-Weindenmüller, pode-se obter a matriz de espalhamento que conecta os canais de entrada e saída em um ponto quântico sem, necessariamente, haver a preocupação de decifrar a dinâmica do sistema dentro de sua região de espalhamento e, a partir de então, calcular, via coeficientes de transmissão, os cumulantes estatísticos que forem necessários.

Para obtenção do gráfico que recuperamos os autores utilizaram a técnica de variação da transparência da barreira para gerar os cumulantes estatísticos para os ensemble de Wigner-Dyson. A seguir, temos o gráfico do trabalho da referência adotada.

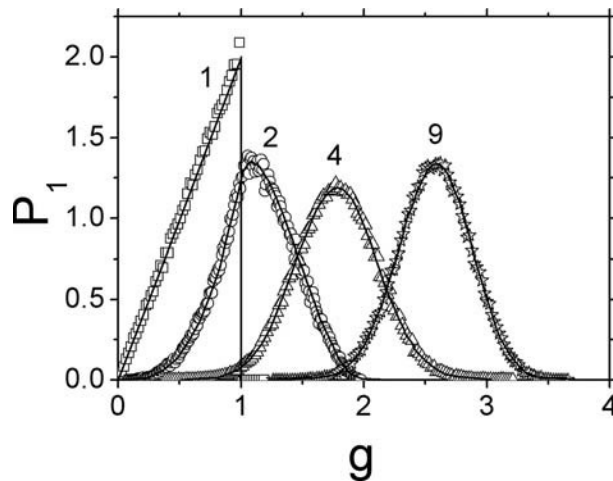


Figura 21: Distribuição da condutância de um ponto quântico com contatos ideais. Na figura, o número 1 ao lado da curva obtida representa o valor do número de canais provenientes do reservatório 2, enquanto que o $N_1 = 4$. A figura foi extraída da referência [36].

Muito embora, tenha sido realizada a recuperação do gráfico apenas para o primeiro cumulante P_1 , nos casos ortogonal e unitário. O primeiro cumulante, denotado por f_1 é escrito como [37],

$$f_1(\tau) = \tau \tag{146}$$

A simulação do artigo foi implementada com cem mil realizações o que justifica os pontos mostrados no gráfico da figura. A sutil diferença de convergências apresentada em nossos resultados em relação aos resultados da referência [36], deve-se ao fato de que em nossa simulação a recuperação dos resultados foi obtida com a utilização de um ensemble de apenas 4998 matrizes aleatórias, no qual utilizamos 3000 realizações e 300 ressonâncias possíveis. Por esta razão, apresenta-se apenas os histogramas de distribuição de condutância a título

de investigar se, mesmo com tão poucas realizações, as distribuições migram para resultados semelhantes aos do trabalho original.

A seguir tem-se os resultados aqui obtidos. Na figura 20, por exemplo, utilizamos o caso ortogonal, onde $\beta = 1$, e um número de canais reduzido, sendo $N_1 = 4$ canais e $N_2 = 1$ canal apenas. Percebe-se um crescimento linear da probabilidade de transmissão em função da condutância. Logo depois, nas figuras 21, 22 e 23, temos um aumento no número de canais N_2 e as respectivas simulações, também para o caso ortogonal, onde $\beta = 1$. Na figura 21, por exemplo, o número de canais $N_2 = 2$.

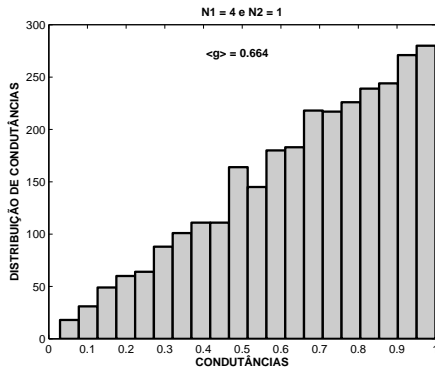


Figura 22: Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 1$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$.

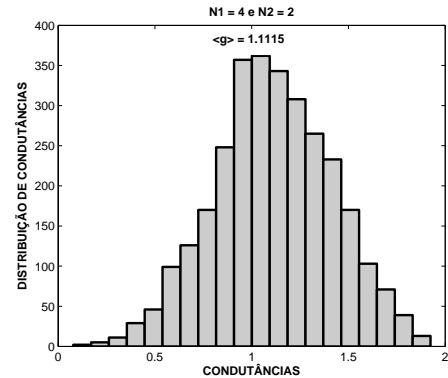


Figura 23: Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 2$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$.

Nas figuras a seguir, é possível ver o comportamento da distribuição para $N_1 = 4$ canais e $N_2 = 4$ canais (para a figura 22) e $N_2 = 9$ (para a figura 23).

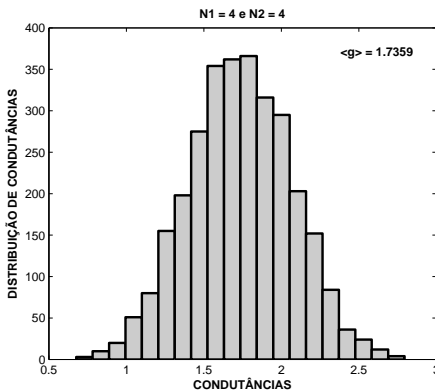


Figura 24: Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 4$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$.

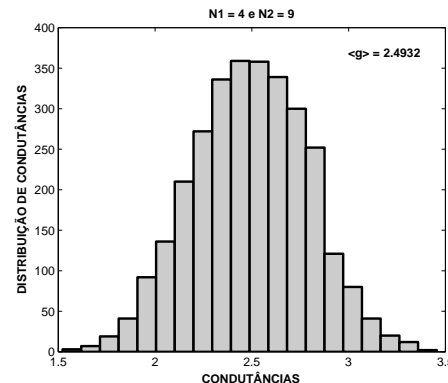


Figura 25: Tem-se nesta simulação $N_1 = 4$ e $N_2 = 9$, para o caso ortogonal onde $\beta = 1$.

Em cada uma das figuras abaixo temos um fitting dos pontos de distribuição de condutância para os quatro casos vistos nos histogramas acima. Nelas, é possível ver o comportamento Gaussiano esperado quando analisamos o comportamento da distribuição em função do aumento do número de canais. Como forma de demonstrar a confiabilidade no ensemble que será usado neste trabalho, não utilizamos todo seu potencial de convergência, executando assim simulações onde foram utilizadas 3000 realizações e um conjunto de 300 ressonâncias possíveis. Pode-se ver logo a seguir que os resultados obtidos reproduzem os resultados do

trabalho original ainda mesmo que o ensemble aqui utilizado possua apenas 5% do número de realizações do ensemble original.

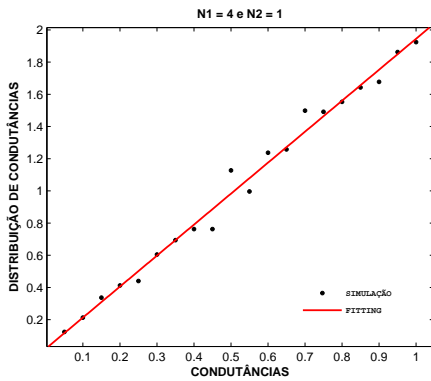


Figura 26: Dependência linear da distribuição de condutâncias para o número pequeno de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 1$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Vê-se a convergência dos pontos obtidos na simulação com o fitting.

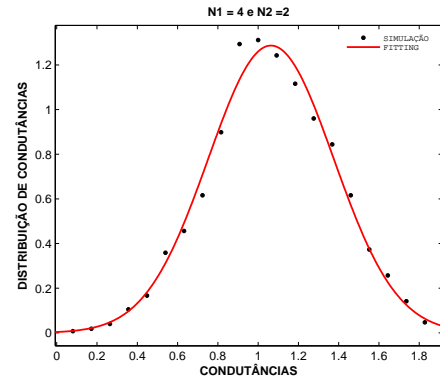


Figura 27: Dependência da distribuição de condutâncias para o número de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 2$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Percebe-se aqui uma distribuição Gaussiana envolvendo os pontos obtidos na simulação.

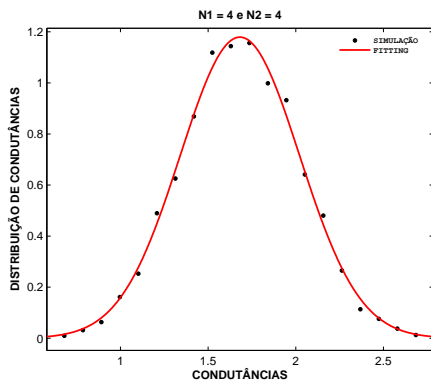


Figura 28: Dependência da distribuição de condutâncias para o número de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 4$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Percebe-se aqui uma distribuição Gaussiana envolvendo os pontos obtidos na simulação.

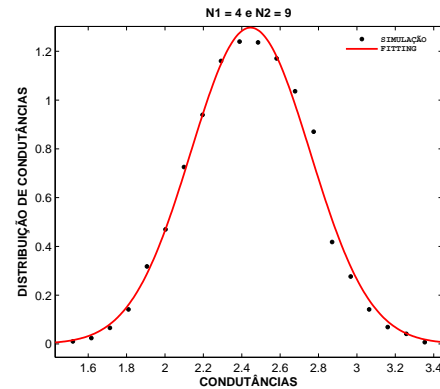


Figura 29: Dependência da distribuição de condutâncias para o número de canais $N_1 = 4$ e $N_2 = 9$, no caso ortogonal onde $\beta = 1$. Percebe-se aqui uma distribuição Gaussiana envolvendo os pontos obtidos na simulação.

É possível perceber que com o aumento do número de canais - e nestas implementações foi variado apenas o número de canais no guia 2 - rapidamente a distribuição de condutâncias passa a ter um comportamento mais universal, ou seja, a curva que representa o comportamento do sistema migra para uma distribuição Gaussiana, ainda que o número de canais seja relativamente pequeno, como no caso de $N_2 = 2, 4$ ou 9 .

A eficácia do ensemble que será usado nas próximas simulações está no fato de que, na referência utilizada à construção das últimas figuras, foram utilizadas cem mil realizações, enquanto que, neste trabalho, temos um ensemble de apenas 4998 realizações possíveis.

Porém, ainda assim, houve uma rápida convergência dos resultados aqui obtidos, quando comparados com os resultados da referência em questão. Sendo assim, pode-se dizer que essa convergência demonstra a eficácia da implementação numérica que foi realizada na obtenção dos autovalores da matriz de espalhamento de Mahaux-Weindenmüller aqui utilizada e, dessa forma, pode-se confiar nos resultados obtidos doravante.

4.5.2 Picos de condutância em pontos quânticos abertos

Nas últimas décadas, houve um vasto estudo a cerca das propriedades estatísticas de transporte em pontos quânticos. Nestes sistemas, a eficácia da fórmula de Landauer-Büttiker na descrição do cálculo da condutância e, para pontos quânticos que contêm um grande número de elétrons, a teoria das matrizes aleatórias já demonstraram resultados estatísticos confiáveis à descrição da dinâmica eletrônica caótica em torno da energia de Fermi [35]. É através da teoria de matrizes aleatórias, por exemplo, que é possível se obter resultados a cerca das flutuações universais da condutância em pontos quânticos que, como já vimos, dependem das simetrias associadas a tais sistemas [29] [39].

Para o regime semiclássico, ou seja, nos limites onde o número de modos abertos (N) é grande, as flutuações estatísticas na transmissão são modeladas por uma distribuição Gaussiana. E, sempre que N for pequeno, porém com temperaturas muito baixas, as flutuações na condutância dos pontos quânticos se aproximam do limite Gaussiano. Sendo assim, variando parâmetros externos, como por exemplo, o campo magnético B , é possível observar flutuações da condutância de pontos quânticos balísticos através das médias estatísticas associadas as respostas que o sistema oferece sempre que tais parâmetros forem modificados. Ou seja, é possível se obter informações a cerca das respostas estatísticas que o sistema oferece apenas pela análise da curva de condutância do mesmo. A partir dessa análise é possível se entender qual a relação entre a densidade de máximos da condutância do sistema e sua função de autocorrelação.

Considerando um sistema onde se tem N_1 e N_2 modos abertos conectados as guias de fonte e drenos, as equações (45) e (46) (para temperatura nula) quando N_1 e N_2 são grandes, nos levam à média de transmissão dada por

$$\langle T \rangle = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} - \frac{\delta_{\beta,1}}{4} \quad (147)$$

onde $\langle \dots \rangle$ é a média sob o ensemble e o índice $\beta = 1$ ou 2 correspondem aos ensembles unitários e ortogonal, respectivamente, onde já se é sabido haver preservação ($\beta = 1$) e quebra de simetria ($\beta = 2$) de reversão temporal. E, para esse mesmo limite, a função de correlação é dada por

$$\left\langle T^{fl}(e, X) T^{fl}(e', X') \right\rangle = \frac{var_{\beta}(T)}{\left[1 + \left(\frac{\delta X}{X_c} \right)^2 \right]^2 + \left(\frac{\delta \varepsilon}{\Gamma} \right)^2} \quad (148)$$

sendo $var_{\beta}(T) = (1 + \delta_{\beta,1})$ e $T^{fl}(e, X) = T(\varepsilon, X) - \langle T \rangle$, onde ε a energia do elétron e X um parâmetro genérico relacionado à forma do ponto quântico. A equação (148) é universal e os comprimentos de correlação X_c e Γ dependem do sistema. Sabe-se que o modelo utilizado para descrever esse sistema é o mesmo que foi utilizado com processos de decaimento na física

nuclear, portanto existem os parâmetros daquele modelo que, por analogia, são encontrados no modelo de transporte aqui descrito. Como, por exemplo, a largura de ressonância média Δ e o parâmetro Γ , cuja expressão é dada por

$$\Gamma = \frac{(N_1 + N_2)}{2\pi} \Delta \quad (149)$$

Há uma diferença entre comprimento de correlação Γ e a largura de decaimento (ou tempo de vida) Δ cujo valor é o dobro do polo de energia na matriz de espalhamento. Essas duas quantidades coincidem quando $\Gamma \ll \Delta$, porém isto nunca é observado quando se trata de um ponto quântico aberto.

Utilizando o mesmo número de canais para um sistema perfeitamente acoplado, encontra-se a transmissão $T(\varepsilon)$ para o modelo matricial que nos conduz à equação (148). A figura abaixo, extraída da referência [35], traz a função de transmissão da autocorrelação normalizada $\tilde{C}_\varepsilon(\delta\varepsilon)$ em função da energia $\delta\varepsilon$ pela taxa de transmissão Γ . As médias do ensemble foram obtidas com uma simulação de 200 realizações para um hamiltoniano de ordem 200. A teoria de matrizes aleatórias prevê um comprimento de autocorrelação de $\Gamma = \frac{N}{\pi} \Delta$ como se pode confirmar na figura.

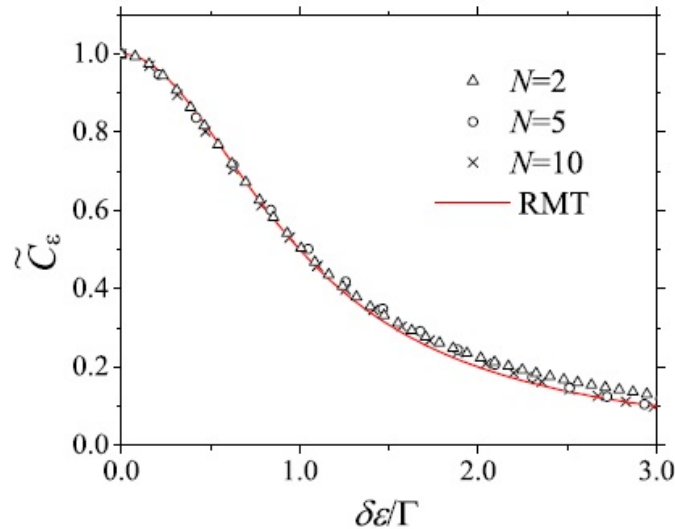


Figura 30: função de transmissão da autocorrelação normalizada $\tilde{C}_\varepsilon(\delta\varepsilon)$ em função da energia $\delta\varepsilon$ pela taxa de transmissão Γ obtida na referência [36].

Na implementação utilizada neste trabalho, foi feita a recuperação do gráfico com um ensemble no qual foram tomadas 4200 realizações, numa faixa de 300 ressonâncias possíveis. Como resultado, foi obtida a figura a seguir para os três números de canais da referência [35].

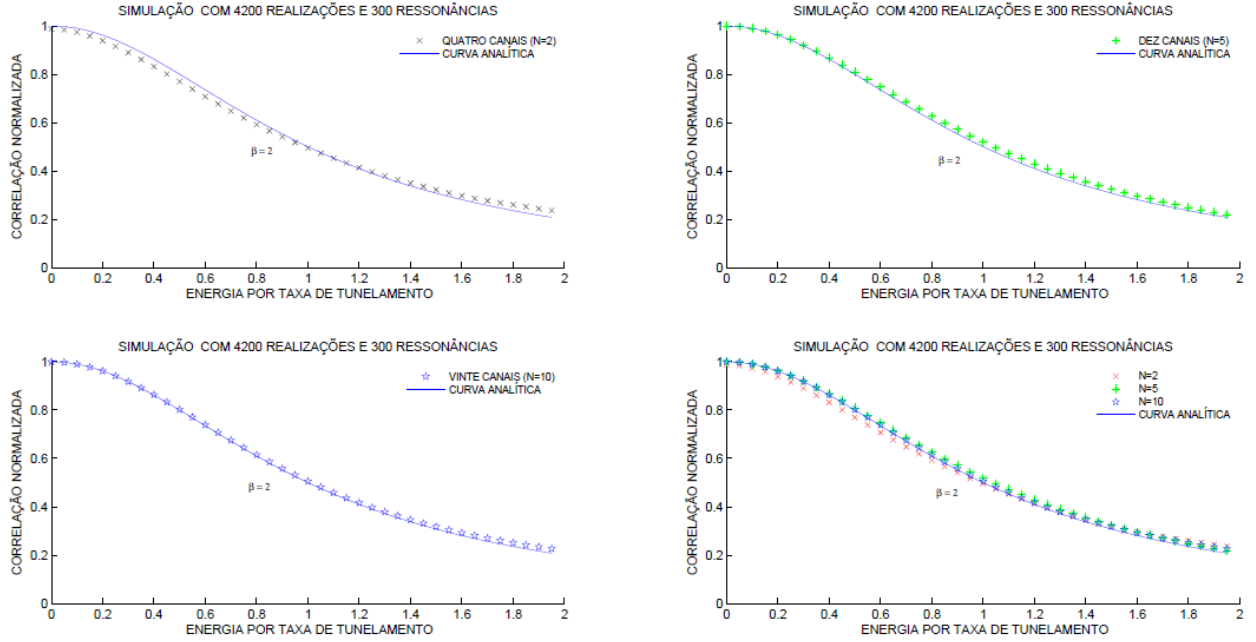


Figura 31: função de transmissão da autocorrelação normalizada $\tilde{C}_\varepsilon(\delta\varepsilon)$ em função da energia $\delta\varepsilon$ pela taxa de transmissão Γ obtida com implementação de 4200 realizações e 300 ressonâncias.

Como se pode ver, os resultados obtidos são compatíveis com aqueles que se desejava reproduzir. Mais uma vez é mostrada a confiabilidade do ensemble e da implementação utilizada. O que nos permite avançar em nossa análise para sistemas onde a temperatura é não nula e, portanto, onde aparecem termos relacionados ao acúmulo de spin provenientes do efeito Seebeck.

4.5.3 Função de correlação generalizada para flutuações da condutância e o efeito spin hall mesoscópico

Tem-se visto a importância da descoberta do efeito spin Hall em estruturas metálicas e semicondutoras no sentido de se compreender e controlar os fenômenos de não equilíbrio relacionados com o acúmulo de spins que, posteriormente, podem se configurar em um meio efetivo para o controle do transporte de informação de forma que se possa fazer aplicações tecnológicas diversas como, por exemplo, na computação quântica. Afinal de contas, a separação de estados up e down de spins pode ser utilizada como um código binário da mesma maneira que se utiliza a passagem ou não de elétrons no transporte de carga como 0 e 1, visto que esses zeros e uns definem a maneira convencional de como a informação é transportada nos dias de hoje.

No campo da spintrônica, o objetivo principal para o início dessa compreensão é a detecção de flutuações na condutância spin Hall. Para se ter controle na detecção destas flutuações, entretanto, é necessário um grande esforço visto que ainda não se domina a conexão física entre os ferromagnéticos que, por construção possuem volume, com as estruturas semicondutoras bidimensionais. Isto requer uma engenharia que, por mais que seja bem construída, ainda provocará perturbações no sistema uma vez que podem criar po-

tenciais indesejáveis que venham a perturbar a leitura das flutuações e que não são o alvo principal do que se quer, efetivamente, ser mensurado.

Ainda assim, esse mecanismo serve para se medir as ditas flutuações universais na condutância de spins que podem levar a um acúmulo de spins nos reservatórios de elétrons. A verificação destas flutuações podem ser observadas nas correntes transversais medidas nos dispositivos com vários terminais quando na presença de um campo magnético suficientemente grande. O acúmulo de spins pode ser constatado na presença da potência do ruído, ou mesmo nas flutuações universais da condutância, razão pela qual é importante a criação de mecanismos que possam detectá-las.

Partindo do princípio de que há dificuldades intrínsecas à medida da corrente spin Hall, é possível se utilizar de um caminho alternativo para se constatar tal efeito, baseando-se na relação entre as flutuações universais das correntes de spin e de carga em pontos quânticos. Uma vez que uma mudança na função de correlação das correntes de spin apontam para uma dependência particular entre a razão dos canais abertos nos modos transversais e longitudinais[10]. A partir da análise dessa dependência é possível mensurar a amplitude da corrente de spin.

Chama-se de sistema bidimensional de multiterminais o sistema no qual tem-se o fluxo de elétrons sob influência da interação spin órbita e com \mathcal{N} reservatórios de elétrons conectados a ele de forma ideal. Estes reservatórios são denotados pelo índice i e para cada eletrodo é fixado o potencial \mathcal{V}_i . Da aproximação de Landauer-Büttiker a corrente de spins na direção α no terminal i é dada por

$$I_i^{\alpha\sigma} = \frac{e^2}{h} \sum_{j\sigma'} \sum_{m,n} \left| S_{m,\sigma;n,\sigma'}^\alpha \right|^2 (V_i - V_j) \quad (150)$$

onde $m \in i$ e $n \in j$, σ e σ' são as projeções de spin nas direções $\alpha = x, y, z$ e S a matriz quaterniônica de espalhamento de ordem $2N_T \times 2N_T$ que descreve o transporte de elétrons em todo o sistema, sendo N_T o número total de canais nos guias de entrada i .

Sabe-se que a corrente elétrica no i -ésimo terminal é dada por $I_i^0 = I_i^{(\alpha\uparrow)} + I_i^{(\alpha\downarrow)}$ onde $\alpha = x, y, z$ são as direções de projeção de spins. Da mesma forma, tem-se que $I_i^\alpha = I_i^{(\alpha\uparrow)} - I_i^{(\alpha\downarrow)}$ é a corrente de spins líquida na direção α .

Considerando um sistema com quatro terminais ($\mathcal{N} = 4$) sob os quais se aplica uma diferença de potencial entre os guias 1 e 2, mas não entre os guias 3 e 4. Como resultado, a conservação da carga elétrica impõe que $I_1^0 = -I_2^0$, porém para 3 e 4 $I_i^0 = 0$. A figura a seguir mostra de forma simplificada o esquema do sistema descrito.

As referências [10][38], junto com os vículos impostos acima, traz a expressão para o cálculo da corrente de spins transversal dada em função do traço da matriz de espalhamento, a saber

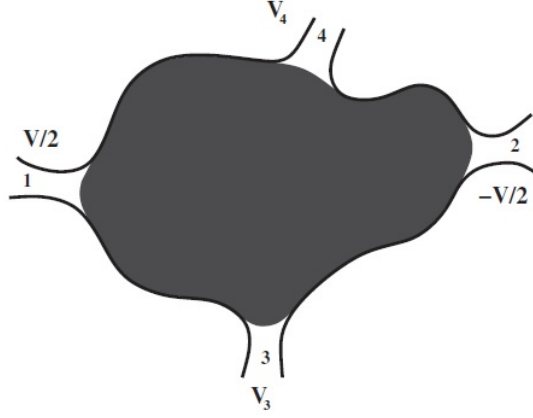


Figura 32: Quantum dot balístico conectado de forma ideal a quatro eletrodos, tendo uma diferença de voltagem entre os guais 1 e 2, enquanto que o ajuste feito para 3 e 4 faz com que a diferença de potencial transversal seja nula. A figura foi extraída da referência [38].

$$J_i^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{T}_{i2}^{(\alpha)} - \mathcal{T}_{i1}^{(\alpha)} \right) - \mathcal{T}_{i3}^{(\alpha)} \tilde{V}_3 - \mathcal{T}_{i4}^{(\alpha)} \tilde{V}_4 \quad (151)$$

onde $i = 3, 4$. Da mesma forma, a corrente longitudinal de cargas elétricas, ainda segundo as referências [10][38], é dada por

$$J_i^{(0)} = \frac{1}{4} \left(2N_1 - \mathcal{T}_{11}^{(0)} + 2N_2 - \mathcal{T}_{22}^{(0)} + \mathcal{T}_{12}^{(0)} + \mathcal{T}_{21}^{(0)} \right) - \frac{1}{2} \left(\mathcal{T}_{23}^{(\alpha)} - \mathcal{T}_{13}^{(\alpha)} \tilde{V}_3 \right) - \frac{1}{2} \left(\mathcal{T}_{24}^{(\alpha)} - \mathcal{T}_{14}^{(\alpha)} \tilde{V}_4 \right) \quad (152)$$

Para a qual $i = 1, 2$.

Como se vê, as correntes dependem dos coeficientes de transmissão \mathcal{T}_{ij} que, por sua vez, podem ser obtidos calculando-se o traço da matriz de espalhamento, dado por [10],

$$\mathcal{T}_{ij}^{(\alpha)}(E, E', B, B') = \text{tr} \left[(1_i \otimes \sigma^\alpha) S^\dagger(E, B) (1_j \otimes \sigma^\beta) S(E', B') \right] \quad (153)$$

onde E relaciona-se com a energia do elétron, B é a amplitude do campo magnético externo, 1_i é o projetor da matriz de espalhamento sob o i -ésimo ponto de contato e $\sigma^{(\alpha)}$ com $\alpha \in (x, y, z)$ são as matrizes de Pauli, sendo $\sigma^{(0)}$ a matriz identidade 2×2 que caracteriza o transporte de carga (sem polarização). Como se pode perceber, o cálculo do traço da matriz de espalhamento nos possibilita chegar a função de covariância entre eles. Esses coeficientes podem ser encontrados com a utilização do método diagramático [10] e são dados por,

$$\begin{aligned}
\text{cov} \left[T_{ij}^\alpha(\varepsilon, x) T_{kl}^\beta(\varepsilon', x') \right] &= \delta_{\alpha 0} \frac{N_i N_j N_k N_l}{|N_T|^2} \left(\frac{1}{|N_D|^2} + \frac{1}{|N_C|^2} \right) + \delta_{\alpha, \beta} \frac{\delta_{ik} \delta_{jl} N_i N_j}{|N_D|^2} + \\
&+ \delta_{\alpha 0} \frac{\delta_{il} \delta_{jk} N_i N_k}{|N_C|^2} - \frac{N_i N_k}{N_T} \left(\delta_{\alpha 0} \frac{\delta_{jl} N_j}{|N_C|^2} \right) + \\
&+ \frac{N_i N_k}{N_T} \left(\delta_{\alpha \beta} \frac{\delta_{ik} N_j N_l}{N_k |N_D|^2} + \delta_{\alpha 0} \frac{\delta_{jk} N_l + \delta_{il} N_j}{|N_C|^2} \right)
\end{aligned} \tag{154}$$

Onde $N_D = N_T \left[1 - i(\varepsilon' - \varepsilon) + \frac{(x' - x)^2}{2} \right]$ e $N_C = N_T \left[1 - i(\varepsilon' - \varepsilon) + \frac{(x' + x)^2}{2} \right]$.

A figura a seguir mostra o comportamento da covariância entre coeficientes de transmissão (com o campo infinito) em função da energia por taxa de transmissão. Tem-se uma concordância da curva teórica e dos resultados obtidos via implementação numérica. Note que a corrente de spin $i = 3, 4$ e $\alpha \neq 0$ é nula, uma vez que, para esses valores, a média sob os coeficientes de transmissão é nula.

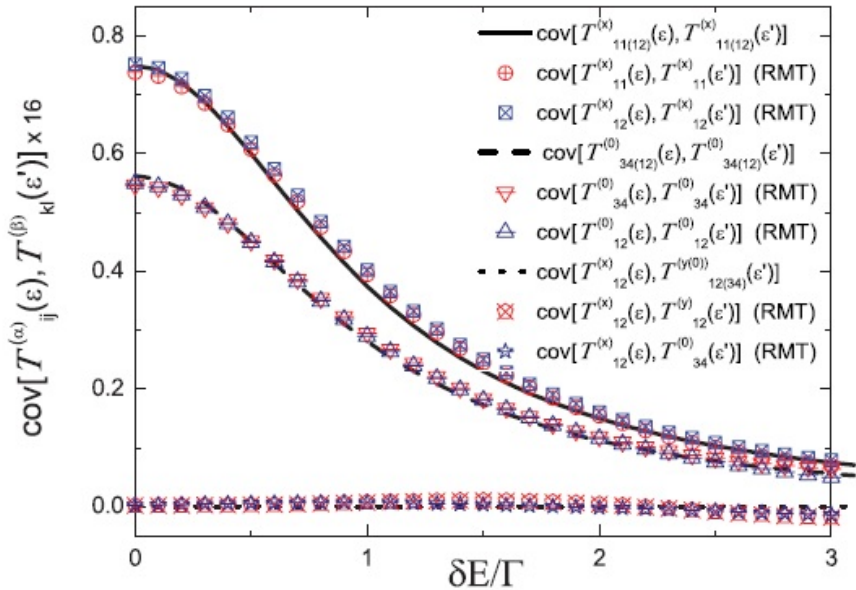


Figura 33: Covariância dos coeficientes de transmissão em função da diferença de energia. Figura extraída da referência [10].

A figura da referência foi recuperada com uma implementação numérica utilizando-se o mesmo ensemble das simulações anteriores, onde desta vez foi utilizado todo potencial do ensemble. ou seja, foram efetuadas 4998 realizações com 400 ressonâncias. Ela mostra a recuperação dos resultados da referência citada, mais uma vez com precisão bastante significativa.

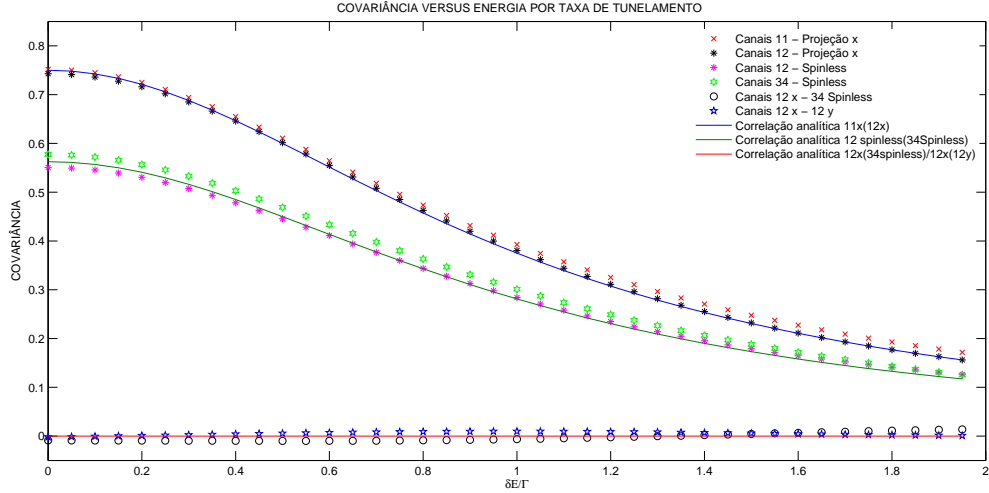


Figura 34: Covariância dos coeficientes de transmissão em função da diferença de energia. Figura obtida a partir de uma implementação numérica com 4998 realizações e 400 ressonâncias.

4.5.4 Função de correlação das flutuações da condutância com os possíveis canais de spin

O conjunto de testes onde foram feitas recuperações dos resultados obtidos por diversos autores serviram para constatar a confiabilidade e precisão do ensemble utilizado nas simulações realizadas neste trabalho. Diante do sucesso destes resultados recuperados, foi possível ampliar a análise, desta vez, levando-se em conta as possíveis projeções de spin presentes no problema que, em essência, é o mesmo da análise que foi realizada na referência [10].

O problema principal consiste em correlacionar os eventos no ponto quântico, considerando uma temperatura não nula, e calcular as correntes de carga e spin dadas pelas equações (142) e (143), respectivamente. Pode-se perceber que as referidas equações possuem uma série de termos que, para uma situação particular, são constantes, porém dependem do cálculo dos coeficientes de transmissão correlacionados, $\mathcal{T}_{ij}^{0\beta}$ para a corrente elétrica e $\mathcal{T}_{ij}^{\alpha\beta}$ para a corrente de spins. Uma vez calculados esses coeficientes, podemos compreender como se comporta a movimentação de cargas e spins nos pontos quânticos e suas propriedades de transporte de cargas e spins em função de sua dependência com parâmetros externos, tais como o campo magnético, temperatura, portas de tensão, etc.

Como já foi comentado, existem evidências numéricas que demonstram que os problemas de caos quântico são muito bem descritos pela teoria de matrizes aleatórias. No caso semi-clássico, por exemplo, é possível, inclusive, chegar as expressões analíticas que descrevem os fenômenos a eles relacionados. As expressões analíticas são confrontadas com os pontos obtidos via implementação numérica e, como já foi visto, os resultados destas implementações estão de acordo com a previsão feita pela respectiva expressão analítica, o que nos traz segurança para aceitar que o procedimento é válido e o método eficaz.

Ao longo das últimas décadas, a literatura vem nos mostrando que os problemas relacionados ao transporte de carga elétrica não mostram grandes problemas de solução e as quantidades físicas que descrevem os sistemas não apresentam muitas dificuldades para serem calculadas. Porém, quando introduzirmos a influência de outros parâmetros nos sistemas, tais como a temperatura, resultados contra intuitivos surgem e, portanto, são dignos de um olhar mais refinado quando se trata de interpretar os resultados obtidos na descrição do problema de transporte. Portanto, a análise destas novas respostas dadas pelos sistemas de transporte quânticos se torna importante ao passo que podemos descrever esses sistemas com mais critérios.

O sistema que vem sendo estudado, como se sabe, é um ponto quântico ligado de maneira ideal a dois guias condutores com um número de canais arbitrário em cada um deles. Esses guias, por sua vez, estão conectados adiabaticamente a dois reservatórios de elétrons, cuja única função é lançar elétrons nos pontos quânticos e/ou receber elétrons dos mesmos, servindo assim como fontes e/ou sorvedouros de carga. Quando, porém, adicionamos outros guias aos pontos e os colocamos a temperaturas não nulas, um escoamento de informação surge na direção desses novos guias. Pode-se usar a fórmula de Landauer para o cálculo da condutância que, por sua vez, pode ser escrita em termos de um produto das funções de retardamento (G^R) e avanço (G^A) de Green [1], [41] e descrever o sistema a partir dos fluxos que neles surgem, ainda que tais fluxos sejam convencionais ou não. Tal dependência da condutância com uma temperatura arbitrária é escrita como

$$G = - \left(\frac{2e^2}{h} \right) \int f'(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (155)$$

onde $f'(\varepsilon)$ é a derivada da função de Fermi em torno da energia ε , sendo a função de Fermi dada por

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp [(\varepsilon - \varepsilon_F) (KT)^{-1}] + 1} \quad (156)$$

Acontece que, para $T \rightarrow 0$ e energias menores que a energia de Fermi, a função assume o valor 1 e para energias maiores que a energia de Fermi, com $T \rightarrow 0$, a função de Fermi tende a se anular. Sendo assim, a função de Fermi tem um comportamento degrau apresentando uma descontinuidade que resulta no problema aqui apresentado. Já à temperatura não nula, a função de Fermi tende a se desviar da função degrau, aproximando-se de um comportamento que resulta em uma curva Lorentziana, como mostra a figura a seguir,

A dificuldade apresentada no cálculo da condutância dada pela equação (155) é que, à temperatura não nula, não é possível se calcular a integral - que contém a derivada da função de Fermi - de forma analítica, ao contrário do que ocorre na condição de temperatura nula, quando a derivada da função de Fermi resulta em uma função já conhecida: A Delta de Dirac, possibilitando o cálculo da respectiva integral. Faz-se necessária, portanto, uma implementação numérica no cálculo da integral que contém esta derivada e a partir desse resultado é possível se calcular as correntes de carga e spin desejadas.

Vamos analisar, portanto, a função de condutância adimensional dada por

$$g = \int_{c_1} d^2x \int_{c_2} d^2y \alpha_1(x) G_\varepsilon^R(x, y) \alpha_2(y) G_\varepsilon^A(x, y) \quad (157)$$

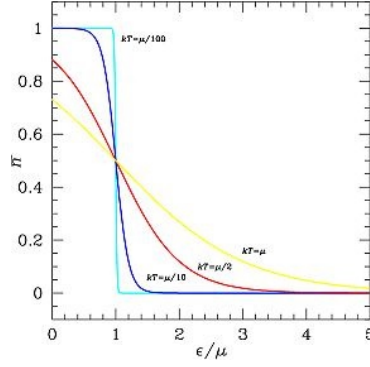


Figura 35: Comportamento da função de Fermi em função da temperatura. A função degrau tende a uma curva Lorentziana com o aumento da temperatura.

As integrais da função acima são tomadas nas seções transversais c_1 e c_2 nos guias, 1 e 2. As funções α são termos que dependem das barreiras de potencial no acoplamento de cada guia com o ponto quântico. E, o respectivo hamiltoniano do sistema é escrita como

$$H = H_c \pm \frac{i\alpha\Delta}{2\pi} \pm \frac{i}{2\pi\nu} \sum_{k=1}^2 \alpha_k(x) \delta(r - r_k) \quad (158)$$

Nesta última equação, \mathcal{H}_c é o hamiltoniano padrão de um ponto quântico dentro de um campo magnético B , ν é a densidade média de estados e $\Delta = (\nu V)^{-1}$ é a largura a meia altura da densidades de estados (sendo V o volume do ponto quântico), r_1 e r_2 são coordenadas relacionadas com as seções transversais dos guias. Os sinais $+$ e $-$ são tomados quando as funções de Green forem calculadas e o segundo termo na equação (158) está relacionado a um terceiro guia inserido no ponto quântico.

Agora, a partir da equação (155) podemos fazer a correlação de condutâncias para obter

$$\langle G_B G_{B'} \rangle = \left\langle \left[-\frac{2e^2}{h} \int f'(\varepsilon) g(\varepsilon, B) d\varepsilon \right] \left[-\frac{2e^2}{h} \int f'(\varepsilon') g(\varepsilon', B') d\varepsilon' \right] \right\rangle$$

o que nos levará a

$$\langle G_B G_{B'} \rangle = \left(-\frac{2e^2}{h} \right)^2 \int \int d\varepsilon d\varepsilon' f'(\varepsilon) f'(\varepsilon') \langle g(\varepsilon, B) g(\varepsilon', B') \rangle \quad (159)$$

No cálculo destes correladores, chamamos de $c(\omega, B)$ a quantidade

$$c(\omega, B) = \left\langle g_{(\varepsilon+\frac{\omega}{2})}(B^+) g_{(\varepsilon-\frac{\omega}{2})}(B^-) \right\rangle - \langle g \rangle^2 \quad (160)$$

Como se vê, precisamos calcular os correladores $c(\omega, B)$ dado pela última equação para podermos obter a função de correlação das condutâncias com a dependência no campo B .

Para obtenção destes correladores, realizamos uma simulação para o cálculo destas médias, onde foi realizada utilizada uma implementação numérica de 4998 realizações, considerando 400 ressonâncias. O ensemble utilizado já foi testado na recuperação dos resultados

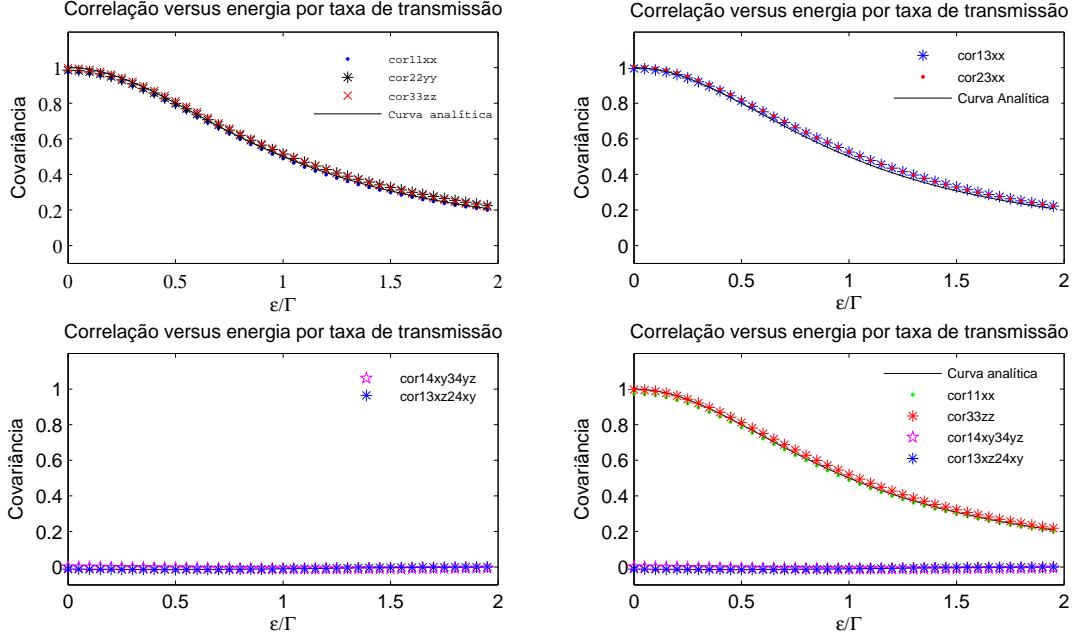


Figura 36: Covariância dos coeficientes de transmissão em função da diferença de energia para diferentes projeções de spin. Figura obtida a partir de uma implementação numérica com 4998 realizações e 400 ressonâncias.

das referências utilizadas neste trabalho. A partir desta implementação numérica obtivemos as figuras (34). Pode se ver que as curvas obtidas a partir desta implementação convergem para a curva analítica dada pela equação (154).

Portanto, é necessário que se faça uma média sobre as condutâncias adimensionais para que se possa chegar ao cálculo da função de correlação $C(B)$. Uma vez realizado o cálculo dessas médias, pode-se escrever a função de correlação $C(B)$ das condutâncias $G(B^\pm)$ como [41],

$$C(B) = \frac{\hbar}{2e^2} [\langle G(B^+)G(B^-) \rangle - \langle G \rangle^2] \quad (161)$$

Nesta equação $B^\pm = B_0 \pm \frac{B}{2}$. Quando o campo magnético B_0 não é muito fraco todos os cálculos são realizados considerando um ensemble unitário e a função $C(B)$ não dependerá de B_0 . Fazendo uso da equação (150), com algumas manipulações algébricas, podemos escrever $C(B)$ como,

$$C(B) = T^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dT} \left[2T \sinh \left(\frac{\omega}{2T} \right) \right]^{-2} c(\omega, B) d\omega \quad (162)$$

Devido a dificuldade de se calcular a integral dada na equação (162) de forma analítica, se faz necessário obter esse resultado de forma numérica. Realizamos esse procedimento e obtivemos a curva de correlação de condutâncias dependendo do campo B para temperatura não nula e para várias taxas de transmissão a partir do procedimento descrito a seguir.

Sabe-se da teoria da resposta linear que a corrente elétrica, corrente de spin ou corrente de calor são induzidas por uma diferença de voltagem, diferença de temperatura ou mesmo

devido a um acúmulo de spins nos reservatórios. Por conveniência, vamos escrever as três categorias de correntes - vistas nas equações (142) e (143) - em uma forma compacta definida como

$$I_i^{(\alpha)} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \mathcal{I}_i^{(\alpha)}(\epsilon, x). \quad (163)$$

Na equação acima, $\mathcal{I}_i^{(\alpha)}(\epsilon, x) = \sum_{j,\beta} \left[2N_i \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} - \mathcal{T}_{ij}^{(\alpha\beta)}(\epsilon, x) \right] (\mu_j^{(\beta)} + \delta_{0\beta} \epsilon \Delta_j)$ para corrente de carga ($\alpha = 0$) ou de spin ($\alpha = x, y, z$), com

$$\langle \mathcal{T}_{ij}^{(\alpha\beta)}(x) \rangle = 2\delta_{\alpha 0} \delta_{\beta 0} \frac{N_i N_j}{N_T} + \frac{N_i}{N_C} \left(\frac{N_j}{N_T} \delta_{\alpha 0} \delta_{\beta 0} - \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (164)$$

Portanto, tem-se o integrando geral

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{I}_i^{(\alpha)}(x) \rangle &= \sum_{j,\beta} \left[2\delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} N_i - \langle \mathcal{T}_{ij}^{(\alpha\beta)}(x) \rangle \right] \\ &\times \left[\mu_j^{(\beta)} - \delta_{0\beta} \epsilon \Delta_j \right] \end{aligned} \quad (165)$$

onde $\Delta_j = (T_j - T_0)/T_0$. No caso de corrente de calor e de carga para dois guias, temos que $\alpha = 0$:

$$\langle \mathcal{I}_1^{(0)}(x) \rangle = \frac{2N_1 N_2}{N_T} \left(1 + \frac{1}{2N_C} \right) \left[\Delta \mu_{12}^{(0)} + \epsilon \Delta_{12} \right] \quad (166)$$

onde $\langle \mathcal{I}_1^{(0)}(x) \rangle = -\langle \mathcal{I}_2^{(0)}(x) \rangle$, $\Delta \mu_{12}^{(\alpha)} = \mu_1^{(\alpha)} - \mu_2^{(\alpha)}$ e $\Delta_{12} = \Delta_1 - \Delta_2$. No caso de spin $\alpha = 1, 2, 3$

$$\langle \mathcal{I}_i^{(\alpha)}(x) \rangle = 2N_i \left(1 + \frac{N_1}{2N_C} \right) \mu_i^{(\alpha)} \quad (167)$$

Sendo assim, temos para a formula geral para o integrando da covariancia, a expressão dada por:

$$\begin{aligned} &cov \left[\mathcal{I}_i^{(\rho)}(\epsilon, x), \mathcal{I}_k^{(\eta)}(\epsilon', x') \right] = \\ &\sum_{j,l} \sum_{\alpha,\beta} cov \left[\mathcal{T}_{ij}^{(\rho\alpha)}(\epsilon, x), \mathcal{T}_{kl}^{(\eta\beta)}(\epsilon', x') \right] \\ &\times \left[\mu_j^{(\alpha)} - \delta_{0\alpha} \epsilon \Delta_j \right] \left[\mu_l^{(\beta)} - \delta_{0\beta} \epsilon' \Delta_l \right] \end{aligned} \quad (168)$$

Portanto, no caso da covariância da corrente de calor e de carga, temos:

$$\begin{aligned} \text{cov} \left[\mathcal{I}_1^{(0)}(\epsilon, x), \mathcal{I}_1^{(0)}(\epsilon', x') \right] &= \frac{N_1^2 N_2^2}{N_T^2} \left(\frac{1}{|N_D|^2} + \frac{1}{|N_C|^2} \right) \\ &\times \left[\Delta\mu_{12}^{(0)} + \epsilon\Delta_{12} \right] \left[\Delta\mu_{12}^{(0)} + \epsilon'\Delta_{12} \right] \end{aligned} \quad (169)$$

e, para o caso da covariância da corrente de spin, temos:

$$\begin{aligned} \text{cov} \left[\mathcal{I}_1^{(\rho)}(\epsilon, x), \mathcal{I}_1^{(\rho)}(\epsilon', x') \right] &= \frac{N_1 N_2}{|N_D|^2} \left(\mu_2^{(\rho)} \right)^2 \\ &+ N_1^2 \left(\frac{1}{|N_D|^2} + \frac{1}{|N_C|^2} \right) \left(\mu_1^{(\rho)} \right)^2 \end{aligned} \quad (170)$$

com $\Delta_i = 0$ and $\mu_i^{(\eta)} = 0$ para $\eta \neq \rho$.

As figuras acima mostram os resultados da integração numérica para a obtenção da curva de correlação $C(B)$ em função do próprio campo e também das taxas de transmissão.

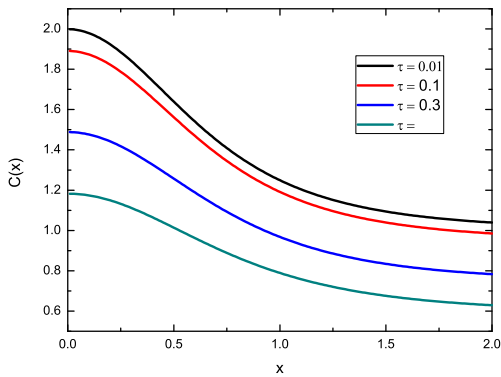


Figura 37: Comportamento da condutância em função do campo para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores possíveis da temperatura.

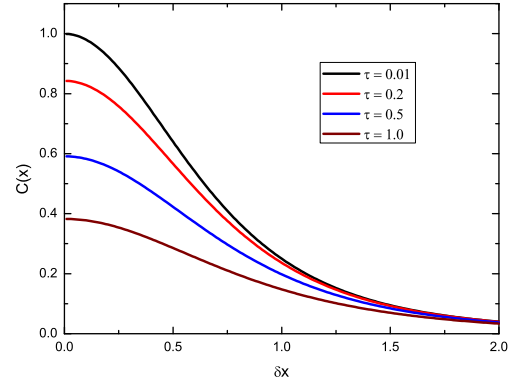


Figura 38: Comportamento da condutância em função de incrementos do campo para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores possíveis da temperatura.

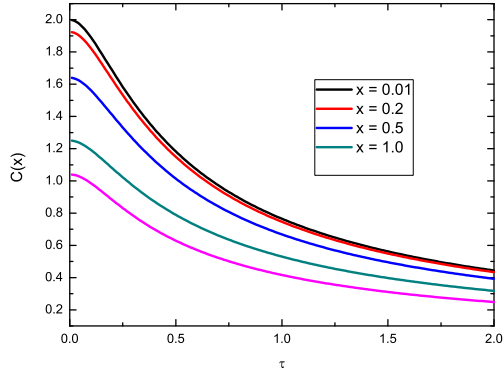


Figura 39: Comportamento da condutância em função da taxa de transmissão para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores possíveis de campo em questão.

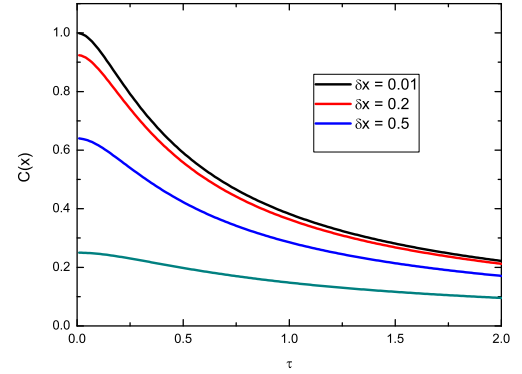


Figura 40: Comportamento da condutância em função da taxa de transmissão para o ponto quântico acoplado aos reservatórios 1 e 2 através dos guias 1 e 2, respectivamente. Os reservatórios são mantidos à temperatura não nula T e mantidos nos potenciais químicos μ_1 e μ_2 . Mostramos esse comportamento para quatro valores de incrementos de campo diferentes.

Pode-se ver, como era esperado, que o comportamento da integral quando resolvida numericamente reproduz os resultados obtidos à simulação onde foi utilizada a teoria de matrizes aleatórias de Landauer-Büttiker à construção dos elementos da matriz de espalhamento de Mahaux-weindermüller. Vimos que as médias destes elementos nos conduzem a resultados estatísticos de grande relevância. A partir destas médias, foi possível construir correlatores que descrevem o comportamento do ponto quântico, no que se refere ao transporte de informação, sob condições de temperaturas nulas e não nulas. Essas informações podem ser obtidas a partir do surgimento das correlações magnéticas à temperatura finita, tanto no transporte de carga, quanto no transport de spins. O que nos permite pensar em outras aplicações com temperatura finita, cujas respostas podem ser analisadas a partir destas correlações. Os resultados deste trabalho, aqui apresentados, serão submetidos a apreciação, onde esperamos que se lhe dê o mérito de sua devida publicação.

5 CONCLUSÃO

Analisando o transporte de carga elétrica em sistemas clássicos - no que se refere apenas ao transporte convencional de carga elétrica -, podemos levar problema da condutância desses sistemas para limites nos quais a teoria clássica deixa de ter alcance e não nos dá respostas adequadas à descrição dos mesmos. Diante disso, levamos as dimensões do sistema ao limite mesoscópico e vimos que, dentro desses limites, naturalmente surge uma necessidade primeira de levar a ideia de condutância ao limite quântico. Nessa escala, a ideia de continuidade deve ser analisada a partir de uma nova ótica cuja descrição se dá a partir da teoria de matizes aleatórias de Landauer-Büttiker. Fazendo-se as devidas considerações que levam o sistema aos limites quânticos, podemos deduzir a fórmula de Mahaux-weindermüller que nos permite encontrar os elementos da matriz de espalhamento do sistema, quando consideramos o hamiltoniano do mesmo contendo os termos que são inerentes a escala de comprimento em questão. Os resultados obtidos via simulação numérica reproduzem o que é previsto analiticamente. Para tanto, utilizamos um ensemble que representa a classe de simetrias características dos sistemas consideradas dentro da delimitação deste trabalho.

A partir do ensemble que representa essa classe de simetrias características, fizemos simulações numéricas onde se pôde calcular os cumulantes estatísticos característicos dessas distribuições, tal como as médias que nos possibilitaram compreender, por exemplo, as questões relacionadas com a condutância de sistemas nessa escala e - ainda a partir de médias desses elementos de matriz - as correlações entre observáveis do sistema que nos esclarecem qual o comportamento do mesmo quando for submetido a condições específicas de temperaturas. Estas condições específicas de temperatura, por sua vez, fazem surgir, não só questões convencionais como as relacionadas ao transporte de carga elétrica, como também o transporte de informação via os spins, como foi visto no efeito Seebeck, por exemplo.

Vimos que, apenas o primeiro cumulante estatístico, já nos possibilitou uma ampla análise de sistemas como o ponto quântico. Porém, cumulantes de ordem maior podem nos oferecer informações ainda mais refinadas sobre estes sistemas, como, por exemplo, os efeitos de ruídos de temperatura cujas informações podem ser encontradas na potência do ruído de disparo, por exemplo. Ou mesmo, quando utilizarmos outras classes de simetrias, à análise de questões relacionadas ao skewness, ou mesmo a kurtosis do sistema, que nos trazem informações sobre as simetrias do mesmo e sobre o grau de aproximação da distribuição Gaussiana com essas distribuições. Sendo assim, o procedimento aqui aplicado pode ser utilizado à obtenção dos mesmos - e de outros - correlatores quando consideramos estas outras classes de simetria no estudo de problemas relacionados à condutância quântica; ou, no estudo dos mesmos efeitos quando consideramos o comportamento do sistema submetidos a condições de temperaturas críticas; ou ainda, no cálculo de correlatores das próprias correntes que surgem nos processos de transporte quântico à temperatura nula ou mesmo diferente de zero, etc. Isto posto, podemos ver que a teoria de matrizes aleatórias em consonância com o procedimento utilizado por Mahaux-weindermüller são uma poderosa ferramenta que nos conduz à compreensão de questões relacionadas ao transporte de informação em sistemas de natureza quântica, que vem se consolidando como uma área promissora à construção de novas tecnologias que sirvam para acelerar o processamento da informação, como se deseja conseguir com a tão esperada computação quântica.

Referências

- [1] Mello, P. A; Kumar, N. Quantum transport in mesoscopic system: Complexity and statistical fluctuations (A maximum statistics via point), 1. Ed. Oxford University Press, 2004.
- [2] Ramos, J. G. S. Modelo sigma não linear supersimétrico: aplicações em nanoestruturas caóticas 2010. 200 f. Tese (Doutorado em Física). Universidade Federal de Pernambuco, Recife.
- [3] Sakurai, J. J. - Modern quantum mechanics. - 2nd ed. I J.J. Sakurai, Jim Napolitano. - Ed. Addison-Wesley.
- [4] Alhassid, Y. The statistical theory of quantum dots, Review of Modern Physics, New Haven, Connecticut 06520, v.72, No 4, p. 895-968, 2000.
- [5] Bohr, N. Neutron capture and nuclear constitution. Nature, 137:344, 1936.
- [6] Nussenzveig, Herch Moysés. Curso de Física Básica - 4ª edição - São Paulo - Edgar Blücher, 2002.
- [7] S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simovic, R. Schleser, T. Ihn, P. Studerus, K. Ensslin, D. C. Driscoll e A. C. Gossard. Counting statistics of single-electron transport in a quantum dot. Physical Review Letters, 96:076605, 2006.
- [8] Wishart, J. Generalized product moment distribution in samples. Biometrika 20 A (1928) no. 1/2, 32-52 [Correction: ibid. 20 A.(1928) p.425]
- [9] James, A. T. Normal multivariate analysis and the orthogonal group. Ann. Math. Statist. v. 25 (1954) no.1, 40-75; James, A. T. The Distribution of the Latent Roots of the Covariance Matrix. Ann. Math. Statist. v. 31 (1960) no.1, 151-158; James, A. T. Distributions of Matrix Variates and Latent Roots Derived from Normal Samples. Ann. Math. Statist. v. 35 (1964) no.2, 475-501
- [10] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, D. Bazeia, M. S. Hussein, and C. H. Lewenkopf; Generalized correlation functions for conductance fluctuations and the mesoscopic spin Hall effect PHYSICAL REVIEW B 86, 235112 (2012)
- [11] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas; Generalized many-channel conductance formula with application to small rings Phys. Rev. B 31, 6207 – Published 15 May 1985
- [12] J.J.M. Verbaarschot, H.A. Weidenmüller, M.R. Zirnbauer, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg; Grassmann integration and the theory of compound-nucleus reactions, West Germany Received 26 September 1984, Available online 10 October 2002
- [13] Gustavsson 1, R. Leturcq 1, B. Simovič 1, R. Schleser 1, T. Ihn 1, P. Studerus 1, K. Ensslin 1, D. C. Driscoll 2, and A. C. Gossard 2; Counting Statistics of Single Electron Transport in a Quantum Dot; Materials Department, University of California, Santa Barbara, California 93106, USA (Received 11 October 2005; published 24 February 2006)

- [14] Sokolov V.V. and Zelevinsky V.G., Dynamics and Statistics of Unstable Quantum States; Institute of Nuclear Physics, 630090, Novosibirsk, USSR. Received 22 August 1988.
- [15] F. A. G. Almeida, S. Rodríguez-Pérez, and A. M. S. Macêdo; Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, PE, Brazil Distribution of charge cumulants of a chaotic quantum dot with nonideal contacts; PHYSICAL REVIEW B 80, 125320, 2009.
- [16] H.J. Sommers, W. Wiczeoreka and D.V. Savin; Statistics of Conductance and Shot-Noise Power for Chaotic Cavities; 73.23.b, 73.50.Td, 05.45.Mt, 73.63.Kv
- [17] Robert J. Young¹, R. Mark Stevenson¹, Paola Atkinson², Ken Cooper², David A. Ritchie², Andrew J. Shields¹; Entangled photons on-demand from single quantum dots; 03.67.Mn, 78.67.Hc, 78.55.Cr
- [18] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker, Conductance distribution of a quantum dot with nonideal single-channel leads, Physical Review B Vol. 50, N. 15 15 October 1994-I
- [19] Lars Onsager; Reciprocal relations in irreversible processes. I. - Department of Chemistry, Brown University, December 8, 1930.
- [20] <https://www.nde-ed.org/EducationResources/CommunityCollege/MagParticle/Physics/Measuring.htm>. Em 10/12/2015.
- [21] Uri Lachish, *guma science*; Thermoelectric Effect Peltier Seebeck and Thomson, (2014).
- [22] Philippe Jacquod, Robert S. Whitney, Jonathan Meair, and Markus Büttiker; Onsager relations in coupled electric, thermoelectric, and spin transport: The tenfold way. Physical Review B 86, 155118 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.86.155118
- [23] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshihara, K. Ando, S. Maekawa e E. Saitoh; Observation of the spin Seebeck effect; Nature, Vol 455|9 October 2008| doi:10.1038/nature07321
- [24] E. Saitoh, A. M. Ueda, and H. Miyajima; Conversion of spin current into charge current at room temperature: Inverse spin-Hall effect; Applied Physics Letters 88, 182509 (2006); DOI: 10.1063/1.2199473
- [25] <http://www.mspc.eng.br/eletro/peltier.shtml> - Em 17-12-2015
- [26] <https://pt.wikipedia.org/wiki/Efeito-Seebeck>. Em 17-12-2015
- [27] Gerrit E. W. Bauer, Eiji Saitoh, and Bart J. van Wees; Spin caloritronics; NATURE MATERIALS | VOL 11 | MAY 2012 | www.nature.com/naturematerials.
- [28] Uri Lachish; Thermoelectric Effect Peltier, Seebeck and Thomson; *guma science*
- [29] Onsager, L. Reciprocal relations in irreversible processes, I. Phys. Rev. 37, 405-426 (1931)
- [30] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B 78, 195125 (2008).

- [31] F. Zhai and H. Q. Xu, Phys. Rev. Lett. 94, 246601 (2005).
- [32] A. Altland and M. R. Zirnbauer, Phys. Rev. B 55, 1142 (1997).
- [33] J. Flipse, F. L. Bakker, A. Slachter, F. K. Dejene, and B. J. van Wees, Nat. Nanotechnology 7, 166 (2012).
- [34] Th. Martin and R. Landauer- IBM Research Division, Thomas J. Watson Research Center, P.O. Box 218, Yorktown Heights, New York 10598
- [35] J. G. G. S. Ramos,¹ D. Bazeia,¹ M. S. Hussein,² and C. H. Lewenkopf - Conductance Peaks in Open Quantum Dots - PRL 107, 176807 (2011)
- [36] F. A. G. Almeida, S. Rodríguez-Pérez, and A. M. S. Macêdo - Distribution of charge cumulants of a chaotic quantum dot with nonideal contacts - Physical Review B 80, 125320 (2009)
- [37] H.-J. Sommers, W. Wiecek, and D. V. Savin, Acta Phys. Pol. A 112, 691 2007.
- [38] J. H. Bardarson, I. Adagideli, and Ph. Jacquod - Mesoscopic Spin Hall Effect - PRL 98, 196601 (2007).
- [39] C.W. J. Beenakker, Random-matrix theory of quantum transport - Rev. Mod. Phys. 69, 731 (1997).
- [40] J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics (John Wiley, New York, 1952).
- [41] K. B. Efetov, Temperature Effects in Quantum Dots in the Regime of Chaotic Dynamics, Physical Review Letters, Volume 74, Number 12, 20/03/1995.