



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

TESE DE DOUTORADO

FENÔMENOS DE TRANSPORTE COERENTE EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

por

Sergio Rodríguez Pérez

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo (Orientador-UFPE)
Prof. Giovani Lopes Vasconcelos (DF - UFPE)
Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho (DF - UFPE)
Prof. Marcel Novaes (DF – UFSCar)
Prof. José Carlos Egues de Menezes (DF – USP-SC)

Recife - PE, Brasil
Dezembro - 2009

Pérez, Sergio Rodríguez.

Fenômenos de transporte coerente em sistemas
mesoscópicos / Sergio Rodríguez Pérez. - Recife : O
Autor, 2009.

xiv, 124 folhas: il. fig.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN. Física, 2009.

Inclui bibliografia e apêndice.

1. Física do estado sólido. 2. Nanociência. I. Título.

530.41 CDD (22.ed.) FQ 2010-002



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (+55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (+55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

Sérgio Rodriguez Perez

FENÔMENOS DE TRANSPORTE COERENTE EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

A Banca Examinadora composta pelos Professores Antônio Murilo Santos Macêdo (Presidente e Orientador), Giovani Lopes Vasconcelos, Maurício Domingues Coutinho Filho, todos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Marcel Novaes, do Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos e José Carlos Egues de Menezes, do Departamento de Física da Universidade de São Paulo - Campus de São Carlos, consideram o candidato:

☒ Aprovado

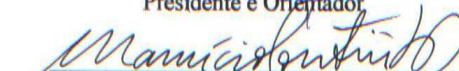
☐ Reprovado

☐ Em exigência

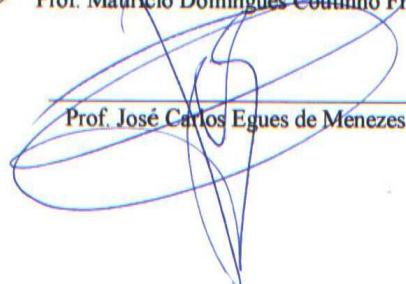
Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos dez dias do mês de dezembro de 2009.


Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo
Presidente e Orientador


Prof. Giovani Lopes Vasconcelos


Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho


Prof. Marcel Novaes


Prof. José Carlos Egues de Menezes

À Elizangela

AGRADECIMENTOS

Foram tantas as boas intenções que me guiaram no trajeto *Chaparra* → *Recife* durante meus anos de estudante, que dificilmente possa escrever meus agradecimentos de maneira completa com tão poucas palavras. Sempre serei grato àqueles que de alguma maneira ou outra fizeram possível minha chegada até aqui. Agradeço:

- Ao **Cnpq** e à **Pós-Graduação de física da UFPE**, por ter-me dado a oportunidade de fazer o doutorado.
- A **Antônio Murilo Santos Macêdo**, meu orientador, pelo esforço que fez para transmitir-me vários de seus conhecimentos durante estes anos. E por ajudar-me a sublimar a minha “ingenuidade ousada” em resultados concretos.
- Aos meus companheiros do grupo: **Gerson Cortês**, **Francisco de Assis**, **Fredson Braz**, **Anderson Barbosa**, **Jorge Gabriel Ramos**, e àqueles que um dia fizeram parte: **Ailton Macêdo** e **Roberto Dias**. Por nossos valerosos intercâmbios.
- Ao professor **Pascal Lederer** pelas estimulantes conversas científicas, ao professor **André Souza** por nossa colaboração, e a vários dos professores do **df** que sempre estiveram dispostos a interagir e a esclarecer dúvidas.
- Aos professores **Flávio Menezes de Aguiar** e **Cid Bartolomeu de Araújo**, pela sua solidariedade oportuna.
- A **Roberto Rodríguez Suárez**, **Eduardo Padrón** e suas respectivas famílias, pela enorme ajuda que me deram no início de meu doutorado. E ao resto da comunidade cubana: **Ernesto Valdés**, **Ramón Ramayo**, **Yurisán**, **Suset** e **Raiden**.
- Aos meus grandes amigos **Gustavo Silva**, **Felipe Peres Calheiros** e **André Carlos**, e a toda a “galera” que conheci através deles.
- A meus primos **Raulito**, **Mary**, **Luciano** e **Freya**, por seu suporte econômico e moral. Em particular a Luciano, por todas as suas sábias dicas.
- A minha **família brasileira**, por acolher-me como a um filho.
- A minha **família cubana**, tanto aos que vivem quanto à memória dos que partiram, por guiar-me pelo caminho certo e por seu apoio na procura de meus sonhos.
- A minha esposa **Elizangela**, por estar ao meu lado em todos os momentos de alegria e de dor, e por acreditar em mim.

RESUMO

Estudamos vários aspectos do transporte coerente em amostras mesoscópicas acopladas a diferentes tipos de reservatórios de partículas. A maior parte do trabalho foi desenvolvida usando a teoria de matrizes aleatórias. Uma qualidade unificadora na aplicação deste formalismo em diferentes sistemas foi o uso de um modelo de estube. Generalizamos a parametrização da matriz de espalhamento do modelo de estube para ser utilizada num circuito quântico com topologia arbitrária acoplado a reservatórios normais, e estabelecemos um conjunto de regras através das quais as matrizes da parametrização podem ser construídas. Como aplicação de tal generalização, calculamos a correção de localização fraca da condutância para uma cadeia linear de cavidades caóticas quânticas acopladas através de contatos com transparência arbitrária, e para quatro cavidades acopladas com a topologia do quadrado. Estudamos o fator Fano de uma cavidade caótica conectada a reservatórios ferromagnéticos com magnetizações não colineares. Apresentamos um conjunto de parâmetros livres para cada conector deste sistema híbrido, suficiente para calcular qualquer observável com estatística linear nos autovalores de transmissão. Encontramos expressões analíticas para estes parâmetros nos casos de contatos ideais e junções de tunelamento. Analisamos o comportamento da condutância e do fator Fano de uma cavidade caótica com simetria de reversão temporal quebrada, acoplada a um reservatório normal e a outro supercondutor. Este estudo revelou uma transição entre localização e antilocalização na correção da condutância, completamente induzida pela transparência das barreiras. Fizemos simulações numéricas para calcular as distribuições dos primeiros quatro cumulantes de carga transmitida num ponto quântico caótico, acoplado a reservatórios normais por contatos com poucos canais de transmissão abertos. Observamos a existência de não analiticidades nas distribuições, e explicamos teoricamente as causas de sua aparição e como calcular sua localização exata na distribuição. Usando a teoria quântica de circuito, descrevemos um sistema de multicamadas normais e ferromagnéticas alternadas, escolhendo a configuração das magnetizações das camadas ferromagnéticas de forma helicoidal.

Palavras-chave: Física da matéria condensada, Sistemas mesoscópicos, Sistemas híbridos, Pontos quânticos.

ABSTRACT

We study some aspects of coherent transport in mesoscopic samples coupled to different kinds of particle reservoirs. The greatest part of the work was done using random matrix theory. An unifying feature in the application of this formalism to different systems was the use of a stub model. We generalize the parametrization of the scattering matrix of the stub model in order to use it for a quantum circuit, with arbitrary topology, coupled to normal reservoirs, and establish a set of rules through which the matrices of the parametrization can be built. As an application of that generalization, we calculate the weak localization correction to the conductance of a linear chain of quantum chaotic cavities coupled through contacts with arbitrary transparency, and of four coupled cavities with the topology of a square. We study the Fano factor of a chaotic cavity connected to ferromagnetic reservoirs with non-collinear magnetizations. We present a set of free parameters for each connector of this hybrid system, which are enough to calculate any observable with linear statistic on the transmission eigenvalues. We find analytical expressions for these parameters in the case of ideal contacts and tunneling junctions. We analyze the behavior of the conductance and the Fano factor of a chaotic cavity with broken time reversal symmetry and coupled to both normal and superconductor reservoirs. This analysis brought to light a transition between localization and anti-localization of the conductance correction induced by the barriers' transparencies. We did numerical simulations for calculating the distributions of the first four cumulants of transmitted charge in a chaotic quantum dot, coupled to normal reservoirs through contacts with a few open transmission channels. We observed the presence of nonanalyticities in the distributions, and explained its emergence and how to calculate its exact localization in the distribution. Using quantum circuit theory, we describe a multilayer system with alternated normal and ferromagnetic layers, choosing the configuration of the magnetizations of the ferromagnetic layers as spiral.

Keywords: Condensed matter physics, Mesoscopic systems, Hybrid systems, Quantum dots.

SUMÁRIO

Capítulo 1—Introdução	1
1.1 Bilhares caóticos quânticos	2
1.2 Modelo efetivo de guias de ondas	4
1.3 Limite semiclássico	5
1.3.1 Barreira dupla	6
1.4 Sistemas híbridos	8
1.4.1 Sistemas NF	9
1.4.2 Sistemas NS	10
1.5 Visão geral da tese	11
Capítulo 2—Teoria quântica de circuitos	14
2.1 Introdução	14
2.2 Corrente matricial	15
2.3 Válvula de spin (FNF)	16
2.3.1 Leis de conservação	18
2.3.2 Configurações colineares	19
2.3.3 Configurações não colineares	20
2.4 Cadeia de multi-camadas FNF...NF	24
2.4.1 Configuração de magnetizações helicoidal	26
2.5 Sumário	27
Capítulo 3—Generalização da parametrização de estube	30
3.1 Introdução	30
3.2 Generalidades do método diagramático	32
3.3 Parametrização de estube	34
3.3.1 Núcleo de Poisson	36
3.4 Generalização do modelo de estube	38
3.4.1 Dois pontos acoplados em série	38
3.4.2 Regras para construir as matrizes da parametrização	40
3.5 Média sobre as matrizes das cavidades	41
3.6 Aplicações do método	45
3.6.1 Cadeia linear de cavidades quânticas caóticas	46
3.6.2 Quatro cavidades acopladas com a topologia do quadrado	49
3.7 Sumário	50

Capítulo 4—Método diagramático para sistemas híbridos normal-ferromagnético	52
4.1 Introdução	52
4.2 Fórmula de Landauer-Büttiker	53
4.3 Modelo físico e parametrização da matriz de espalhamento	56
4.4 Média sobre o grupo unitário	59
4.5 Cálculo da condutância	60
4.6 Cálculo do fator Fano	62
4.6.1 Contatos balísticos ideais	66
4.6.2 Junções de tunelamento	69
4.7 Parâmetros relevantes	73
4.8 Sumário	76
Capítulo 5—Bilhar de Andreev na ausência de simetria de reversão temporal	77
5.1 Introdução	77
5.2 Equações de Bogoliubov-De Gennes	78
5.3 Teoria de espalhamento	79
5.3.1 Modelo para as matrizes de espalhamento	79
5.3.2 Parametrização de estube	81
5.4 Termo dominante da condutância	82
5.4.1 Caso unitário <i>versus</i> caso ortogonal	83
5.4.2 Adaptação dos diagramas	83
5.5 Fator Fano	84
5.6 Correção de localização fraca da condutância	86
5.6.1 Pares de trajetórias interferentes	86
5.6.2 Termo de localização fraca	88
5.7 Analogia com dois pontos acoplados em série	91
5.8 Sumário	93
Capítulo 6—Além do limite semiclássico	94
6.1 Introdução	94
6.2 Estatística de contagem de carga	95
6.2.1 Exemplo simples: uma junção de tunelamento com um canal de propagação aberto	96
6.2.2 Fórmula de Levitov-Lesovik	97
6.3 Distribuições de cumulantes	98
6.3.1 Simulações numéricas	100
6.3.2 Não analiticidade das distribuições	104
6.4 Sumário	109
Capítulo 7—Conclusões e perspectivas	110

Apêndice A—Propriedades das matrizes de projeção	112
Apêndice B—Expressões algébricas para os elementos de $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ e $\mathcal{L}$	113
Apêndice C—Metodologia para reduzir o número de elementos de $\mathcal{T}^2$ a serem calculados	115
Apêndice D— Expressões explícitas dos coeficientes das fórmulas do fator Fano	117

LISTA DE FIGURAS

1.1	a) Na esquerda mostra-se o fundo da banda de condução da heteroestrutura (linha sólida) e a energia de Fermi (linha tracejada). Na direita está representada a heteroestrutura de GaAs e AlGaAs. b) Cavityde quântica feita num gás bidimensional. A área cinza representa o eletrodo, colocado na superfície da heteroestrutura, que confina os elétrons dentro da cavityde. A linha branca indica o tamanho de $1\mu\text{m}$. As figuras foram tiradas das referências [10] e [9] respectivamente.	3
1.2	a) No topo é representado um guia de onda ideal, com seção transversal constante. Na parte inferior está desenhado um guia de onda adiabático com uma constrição. b) Representação gráfica das barreiras de potencial que surgem na análise do guia de onda adiabático. A linha preta grossa representa a energia de um elétron que incide na constrição. Esta figura foram tiradas da ref. [1].	5
1.3	a) Representação do sistema de barreira dupla. As linhas tracejadas representam um dos caminhos possíveis que pode seguir o elétron. b) Comportamento da condutância da barreira dupla em relação à fase de referência χ_0 , quando variamos o número de canais de transmissão abertos.	7
1.4	a) Processo de espalhamento na interface NF de um elétron que vem do lado normal. O torque transmitido e a magnetização do material ferromagnético são representados pelos vetores $\vec{\tau}$ e $\vec{m}$ respectivamente. b) Processo de reflexão de Andreev na interface NS. Um buraco é refletido com spin e velocidade opostos às do elétron incidente. No lado supercondutor um par de Cooper é criado.	11
2.1	Representação esquemática da válvula de spin (esquerda) e o circuito equivalente na TQC (direita).	18
2.2	Circuitos equivalentes para a válvula com magnetizações a) paralelas e b) anti-paralelas. c) Densidade de estados no metal normal e desequilíbrio entre os potenciais químicos para elétrons com spin com orientações opostas.	21
2.3	Dependência angular da condutância (painel esquerdo) e do torque aplicado à camada F_1 (painel direito), num sistema de válvula de spin com conectores simétricos, para diferentes valores de polarização P	24
2.4	Dependência angular da condutância (painel esquerdo) e do torque aplicado à camada F_1 (painel direito), num sistema de válvula de spin com conectores assimétricos, fixando o valor da polarização $P_1 = 0.9$ e tomando vários valores para P_2	25
2.5	Circuito equivalente para a cadeia de multi-camadas.	25

2.6	Variação da condutância (painel esquerdo) e o torque aplicado à primeira camada (painel direito) com relação ao ângulo relativo entre as magnetizações de duas camadas ferromagnéticas adjacentes, para a cadeia com vários conectores simétricos. A condutância G dos conectores têm sido escolhida para todas as cadeias ter a mesma condutância na configuração paralela. Para $N_c = 2$ escolhemos $G = 200 G_0$	28
2.7	Comportamento da condutância e o torque aplicado à primeira camada em função da variação do ângulo entre a primeira e segunda camada, numa cadeia com 15 camadas magnéticas. Mantemos as 14 últimas camadas com uma configuração helicoidal fixa definida pelo número de voltas N_v	29
3.1	Simbologia introduzida na ref. [52] para o uso do método diagramático. .	32
3.2	a) Representação gráfica da função de condutância para um ponto com contatos ideais. b) Média da condutância de um ponto com contatos ideais em termos de diagramas. O diagrama da esquerda é um diagrama tipo escada, enquanto que o diagrama da direita é um diagrama cruzado. . . .	35
3.3	a) Modelo de estube para uma cavidade caótica acoplada a um terminal através de um contato. b) Mapeamento de uma cavidade caótica acoplada a n terminais num modelo de estube. Os pontos representam os guias intermediários até chegar ao n -ésimo.	37
3.4	Mapeamento de dois pontos conectados em série num sistema de estube. Os guias de cor sombreada são fictícios.	38
3.5	a) Modificação da simbologia do método diagramático para incluir os blocos de pontos. b) Diagrama tipo escada que surge no cálculo da média da condutância de um circuito quântico com reservatórios normais. Adotamos a convenção de Einstein para as somas dos índices de pontos que pertencem a diferentes laços-T.	42
3.6	Definição e representação diagramática de F^L , F^R , f^{UU} e f^{TT} para sistemas com reservatórios normais.	44
3.7	Representação dos diagramas cruzados que contribuem para a correção de localização fraca da condutância em sistemas com reservatórios normais.	45
3.8	Circuito quântico composto por quatro cavidades caóticas acopladas com a topologia do quadrado. Os guias de cor sombreada e seus respectivos conectores são fictícios.	48
4.1	Amostra acoplada a reservatórios com magnetizações não colineares $\vec{m}_a$ e $\vec{m}_b$, através de guias de onda ferromagnéticas ideais. Nos operadores de aniquilação omitimos os índices de canal e de spin por simplicidade. . . .	56
4.2	Diagrama de escada que surge na média da função f . Usamos a convenção de Einstein para as somas dos índices de spin que pertencem a diferentes laços-T.	59
4.3	Diagrama de escada que aparece no cálculo da condutância para um sistema FNF.	62

4.4	Representação diagramática das matrizes F_{σ_1, σ_2}^L (parte superior) e F_{σ_1, σ_2}^R (parte inferior) para um sistema FNF.	64
4.5	Diagramas planares gerados a partir da média de $\hat{\text{Tr}} \left[(\hat{t} \hat{t}^\dagger)^2 \right]$ para um sistema FNF.	65
4.6	Fator Fano para contatos balísticos. a) Fixamos $\theta = 0$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . b) Fixamos $\theta = \pi$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . c) Escolhemos os contatos simétricos e variamos o ângulo θ entre as magnetizações. d) Escolhemos contatos com diferentes polarizações, fazemos $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos o ângulo θ entre as magnetizações.	67
4.7	Transição entre o comportamento monotônico e não monotônico do fator Fano em relação a $\cos(\theta)$, representada pela linha sólida no plano das polarizações p_a e p_b . A linha tracejada representa o caso simétrico.	70
4.8	Fator Fano para junções de tunelamento. a) Admitimos que $\theta = 0$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . b) Fixamos $\theta = \pi$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . c) Escolhemos contatos simétricos e variamos o ângulo entre as magnetizações. d) Consideramos contatos com diferentes polarizações, fazemos $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos o ângulo entre as magnetizações.	71
4.9	Representação tridimensional da função D_R em unidades percentuais. Consideramos $p_a = 1$, variamos p_b e o $\cos(\theta)$	73
5.1	Diferentes componentes do sistema unidos por guias ideais. Da esquerda para a direita: conector b do lado normal, cavidade caótica, conector a do lado supercondutor e a interface NS. Em cada caso é indicada a matriz de espalhamento correspondente ao elemento.	79
5.2	Diagrama típico do tipo escada envolvido no cálculo da condutância. Usamos a convenção de Einstein para as somas dos índices de elétron-buraco que pertencem a diferentes laços-T.	83
5.3	Valor médio da condutância em unidades de NG_0 do caso unitário (linhas sólidas) e o caso ortogonal (linhas tracejadas). Curvas com a mesma cor representam o mesmo valor do parâmetro fixo. Na esquerda (direita) Γ_b (Γ_a) é variada enquanto que Γ_a (Γ_b) é fixada nos valores 0.2, 0.6 and 1. Os dados do caso ortogonal foram obtidos por Gerson Cortés.	85
5.4	Fator Fano como função de Γ_a (Γ_b) é representado no painel esquerdo (direito). Γ_b é fixado em 0, 0.01, 0.25 e 1, enquanto que Γ_a em 0, 0.25, 0.5 e 1.0.	86
5.5	a) Duas trajetórias que interferem num metal normal difusivo, sendo o laço de uma a inversão temporal do da outra. b) e c) Duas trajetórias que interferem num sistema normal difusivo adjacente a um supercondutor. Linhas sólidas representam trajetórias de elétrons, as linhas tracejadas as dos buracos e o ponto preto a reflexão de Andreev.	87
5.6	Definição de quatro séries diagramáticas necessárias para a construção dos diagramas com topologias diferentes.	88
5.7	Os dois diagramas maximamente cruzados e topologicamente diferentes obtidos usando as três primeiras séries da fig. 5.6.	89

5.8	Os seis diagramas maximamente cruzados e topologicamente diferentes obtidos usando as duas primeiras e a última séries da fig. 5.6.	89
5.9	Localização fraca da condutância em unidades de G_0 variando Γ_a (Γ_b) no painel esquerdo (direito) e fixando Γ_b (Γ_a) em 0.25, 0.5, 0.75 e 1. As linhas sólidas pretas representam guias para os olhos.	91
5.10	Sistema de dois pontos quânticos caóticos acoplados em série, equivalente à cavidade quântica caótica unida a reservatórios híbridos NS na ausência de simetria elétron-buraco.	92
6.1	a) Flutuações universais de condutância para um fio condutor. As medições foram feitas a uma temperatura de 38 mK . b) Histograma construído a partir das flutuações. Uma curva aproximadamente gaussiana ajusta o histograma. $\langle g \rangle$ e $\langle gg \rangle$ representam o valor médio e a variância da condutância respectivamente. c) Representação de duas distribuições para as quais o terceiro cumulantes é não nulo. d) Gráfico de duas distribuições cujos quartos cumulantes são diferentes de zero. Os sinais de mais e de menos nos dois últimos gráficos representam o sinal do terceiro e do quarto cumulante, respectivamente. A figura foi extraída da ref. [106]	99
6.2	Distribuições de condutância g , potência do ruído de disparo p , o terceiro CCT q_3 e o quarto q_4 , para o caso ortogonal, considerando $\Gamma = 0.75$. As linhas sólidas pretas em cada painel representam um ajuste gaussiano feito para cada cumulante quando $N = 7$, enquanto que as linhas pontilhadas representam guias para os olhos. O número de amostras usado na simulação foi 10^6	101
6.3	Distribuições de condutância g , potência do ruído de disparo p , o terceiro CCT q_3 e o quarto q_4 , para o caso ortogonal. O número de canais abertos em cada guia é dois e foram usados ensembles de 10^6 matrizes. As linhas pontilhadas representam guias para os olhos.	102
6.4	Distribuições de condutância g , potência do ruído de disparo p , o terceiro CCT q_3 e o quarto q_4 , para o caso unitário. O número de canais abertos em cada guia é dois e foram usados ensembles de 10^6 matrizes. As linhas pontilhadas representam guias para os olhos.	103
6.5	Família de curvas $HS_2^{(m)}$ determinadas por alguns valores dos primeiros quatro CCT. Os sinais + e - representam máximos e mínimos das respectivas superfícies $HS_{2+1}^{(m)}$. a) Condutância. b) Ruído de disparo. c) Terceiro cumulante. d) Quarto cumulante.	108

LISTA DE TABELAS

4.1	Expressões algébricas associadas aos diagramas representados na fig. 4.5, incluindo suas multiplicidades e pesos.	68
C.1	Tabela de simetrias para a matriz $\mathcal{T}^2$	116
D.1	Expressões algébricas para os coeficientes da fórmula geral do fator Fano no caso de junções de tunelamento.	117
D.2	Expressões algébricas para os coeficientes da fórmula geral do fator Fano no caso de contatos balísticos.	118

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O termo “mesoscópico” tem sido usado dentro da física para fazer referência ao ramo que estuda sistemas que apresentam comportamento quântico em dimensões espaciais que estão entre as escalas atômicas e as macroscópicas. Esta área começou a ter uma intensa atividade experimental a partir da década de oitenta [1]. Para estudar as propriedades de transporte dos sistemas mesoscópicos, comumente é aplicada uma diferença de potencial nos terminais conectados à amostra. Cada terminal tenta impor a esta última seu próprio potencial e como consequência disto, o sistema sai do equilíbrio e entra num regime de transporte.

Usaremos as escalas de energia e as de condutância para explicar onde se inserem os sistemas estudados nesta tese dentro do mundo do transporte em sistemas mesoscópicos. Num dado experimento, estabelece-se externamente a escala “operacional” de energia, que é determinada por eV e/ou $k_B T$, onde V é a diferença de potencial aplicada e T a temperatura. Com a letra e denotamos a carga do elétron e k_B é a constante de Boltzmann. Existem outras escalas internas de energia, que estão determinadas pelas características específicas da amostra. Uma delas é dada pela quantidade $E_{\text{perm}} = \hbar/\tau_{\text{perm}}$, onde τ_{perm} é o tempo de permanência do elétron dentro da nanoestrutura. Mais duas escalas são estabelecidas pela capacitância C da amostra e pelo tempo de coerência de fase τ_ϕ . A primeira é $E_C = e^2/2C$ e representa o custo energético para um elétron entrar na amostra, caracterizando assim as interações entre elétrons, e a segunda é dada por $\hbar/\tau_\phi$.

O tempo de coerência de fase dos elétrons está determinado em geral pelos processos de espalhamento inelásticos. Através de toda a tese assumiremos que o tempo de coerência de fase é muito maior do que o tempo de permanência dos elétrons dentro da amostra, e portanto trabalharemos num regime de *transporte coerente*. Além do mais, admitiremos que a nossa amostra tem uma capacitância grande o suficiente para que possamos considerar que $E_C \ll E_{\text{perm}}$. Desta forma desprezaremos o efeito das interações entre as quasepartículas no sistema.

A condutância da nanoestrutura pode ser comparada ao quantum de condutância, dado por $G_0 = 2e^2/h$. Exceto no caso da cavidade caótica estudada no capítulo 6, todos os demais sistemas têm uma condutância $G \gg G_0$. Esta condição expressa que em tais sistemas existem muitos canais de transmissão abertos e se encontram então num regime de *transporte semiclássico*. Diferentemente, no capítulo 6 estudaremos um sistema onde $G \sim G_0$. Denominaremos este regime de transporte como *limite quântico extremo*.

Admitiremos em todos os capítulos que a escala de energia eV é constante no tempo, de maneira que os sistemas estão num estado de não equilíbrio estacionário.

1.1 BILHARES CAÓTICOS QUÂNTICOS

Bilhares caóticos são modelos que descrevem a dinâmica de uma partícula puntiforme em uma cavidade bidimensional, em cujas paredes a partícula sofre reflexões especulares através de espalhamentos elásticos. Entre colisões sucessivas, a partícula descreve um movimento retilíneo uniforme. A dinâmica pode ser regular ou caótica, dependendo exclusivamente das propriedades geométricas da fronteira. Bilhares caóticos vêm sendo estudados há décadas [2]. Atualmente, pequenas cavidades com dimensões da ordem de microns ou centenas de nanômetros são construídas em heteroestruturas semicondutoras, de maneira que a descrição da dinâmica das partículas (elétrons) deve levar em conta as propriedades quânticas das mesmas.

Na fig. 1.1a está representado um gás de elétrons bidimensional de alta mobilidade, que é formado na interface AlGaAs/GaAs mais interna, onde o mínimo da banda de condução cai abaixo do nível de Fermi. Neste poço quântico, sub-bandas de energia laterais podem ser populadas de maneira controlada com a aplicação de uma tensão de porta no metal do substrato. Num gás bidimensional o comprimento de livre caminho médio dos elétrons pode chegar a ser de até dezenas de microns. Isto permite que as cavidades, como a mostrada na fig. 1.1b, possam ser desenhadas de tal forma que o movimento dos elétrons no seu interior seja balístico.

O regime de caos quântico, diferentemente do clássico, não é manifestado através de uma super-sensitividade às condições iniciais, mas é refletido de outras formas no sistema, como na estatística espectral de níveis de energia [3]. Por tal motivo foi batizado inicialmente com o nome de caologia, ao invés de caos quântico [4].

Quando um elétron entra na cavidade, sua função de onda tem um tamanho da ordem do comprimento de onda de Fermi. À medida que o sistema evolui, o pacote de onda começa a dispersar-se até que a função de onda alcança um tamanho da ordem das dimensões da cavidade. Uma vez passado este intervalo de tempo, conhecido como tempo de Ehrenfest e denotado por τ_E , o elétron não pode mais ser descrito deterministicamente usando o teorema de Ehrenfest [5]. Assumindo que a incerteza espacial do elétron cresce proporcionalmente a um fator da forma $e^{\alpha t}$ e que a dimensão da cavidade é da ordem de L , o tempo de Ehrenfest é dado por [6]

$$\tau_E = \alpha^{-1} \ln \frac{L}{\lambda_F}. \quad (1.1)$$

Esta escala de tempo determina o crossover entre o comportamento clássico (corpúscular) e quântico (ondulatório) do elétron dentro da cavidade.

Uma outra escala de tempo importante é o tempo ergódico, denotado por τ_{erg} , e definido como o tempo necessitado pelo elétron para explorar todo o espaço de fase. A partir desta grandeza pode ser definida a energia de Thouless como $E_T = \hbar/\tau_{\text{erg}}$ ¹. A condutância adimensional da cavidade pode ser estimada como E_T/δ [7], onde δ é o espaçamento médio entre os níveis de energia. Se admitimos que g é a ordem da condutância adimensional dos contatos, então a condutância do dispositivo todo será

¹As vezes a definição de energia de Thouless é encontrada na literatura de cavidades quânticas como $E_T = \hbar/\tau_{\text{perm}}$, onde τ_{perm} é o tempo de permanência do elétron dentro da cavidade [8].

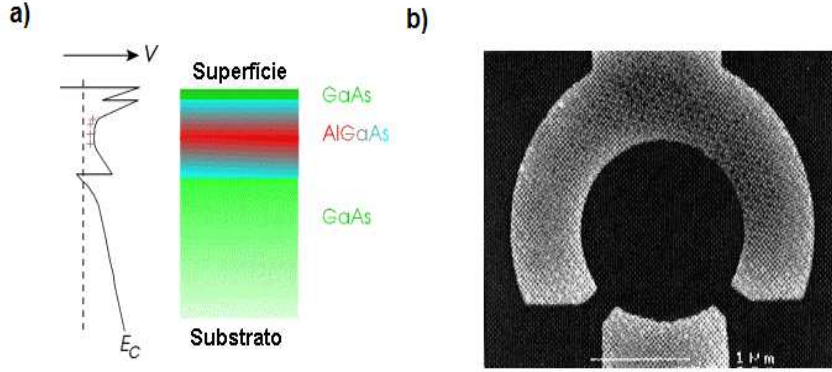


Figura 1.1 a) Na esquerda mostra-se o fundo da banda de condução da heteroestrutura (linha sólida) e a energia de Fermi (linha tracejada). Na direita está representada a heteroestrutura de GaAs e AlGaAs. b) Cavidade quântica feita num gás bidimensional. A área cinza representa o eletrodo, colocado na superfície da heteroestrutura, que confina os elétrons dentro da cavidade. A linha branca indica o tamanho de $1 \mu\text{m}$. As figuras foram tiradas das referências [10] e [9] respectivamente.

dominada pelos contatos se for satisfeita a condição $g \ll E_T/\delta$. Assumiremos que todas as cavidades caóticas estudadas neste trabalho cumprem esta condição.

A cavidade alcança um regime universal de caos quântico apenas se o tempo de permanência dos elétrons dentro da cavidade τ_{perm} , for muito maior do que os tempos τ_{erg} e τ_E . Nestas circunstâncias o sistema pode ser descrito usando a teoria de matrizes aleatórias. Existe uma grande evidência numérica indicando que a estatística de níveis em bilhares caóticos é a mesma do que a correspondentes aos ensembles de Wigner-Dyson [11], tal crença se conhece como *conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit* [12].

Há mais ou menos uma década, um novo tipo de cavidades caóticas quânticas conhecidas como bilhares de Andreev, tem sido estudado. A principal peculiaridade é que a cavidade está conectada a um material supercondutor. Foi mostrado que a estatística de níveis destes sistemas é descrita por novas classes de ensembles de matrizes aleatórias, denominadas classes de Bogoliubov - De Gennes [13, 14]. Além da simetria de reversão temporal e de rotação de spin, usadas nas classes de Wigner-Dyson, as matrizes destes ensembles possuem simetria de elétron-buraco (ver capítulo 5). Para uma revisão sobre as propriedades dos bilhares de Andreev fechados remetemos ao leitor à ref. [15]. Uma descrição detalhada sobre os limites de aplicabilidade da teoria de matrizes aleatórias aos bilhares de Andreev abertos é dada na ref. [16].

Em capítulos posteriores, referiremo-nos frequentemente às cavidades caóticas quânticas como pontos quânticos. Este termo também é usado para cavidades com poucos elétrons [17], que não devem ser confundidas com as estudadas aqui.

1.2 MODELO EFETIVO DE GUIAS DE ONDAS

Quase a totalidade desta tese é desenvolvida usando o formalismo de matrizes de espalhamento, no qual é essencial o conceito de *guia de onda*. Por tal motivo, expomos aqui algumas ideias apresentadas detalhadamente na referência [1], com o objetivo de esclarecer as flexibilidades do uso deste modelo.

A descoberta experimental da quantização da condutância foi feita estabelecendo uma constrição num gás bidimensional, através da aplicação de um potencial eletrostático usando uma porta metálica [18]. A observação dos platôs produziu certa surpresa nos descobridores, pois a constrição empregada estava localizada numa região relativamente curta do gás bidimensional. Desta forma o sistema estava longe de poder ser considerado um guia de onda ideal (com seção transversal constante), contudo foi observado o efeito da quantização.

É possível mostrar através da solução explícita da equação de Schrödinger que mesmo não sendo constante a seção transversal do guia de onda, como mostrado na fig. 1.2a, existirão um número finito de canais de transmissão abertos no sistema. Este número é determinado pela parte mais estreita do guia. Para ilustrar isto, considere o modelo de um *guia de onda adiabático*, com seção transversal retangular de lados $a(x)$ e $b(x)$, paralelos aos eixos y e z respectivamente (ver fig. 1.2a). Por adiabático entende-se que os lados da seção transversal variam muito lentamente, de forma que as mudanças são notáveis apenas para dimensões muito maiores que o próprio comprimento dos lados. Desta maneira, uma separação de variáveis pode ser feita localmente, e a função de onda é escrita como

$$\psi_n(x, y, z) = \psi(x) \Phi(a(x), b(x), y, z), \quad (1.2)$$

onde $\Phi(a(x), b(x), y, z) = 2 \sin(k_y^n(y - a/2)) \sin(k_z^n(z - b/2)) / \sqrt{ab}$, $k_y^n = \pi n_y/a$ e $k_z^n = \pi n_z/b$. Os números n_y e n_z são inteiros maiores do que zero. Então a dinâmica na direção x é dada pela seguinte equação:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_n(x) \right) \psi(x) = E \psi(x), \quad (1.3)$$

com

$$E_n(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_y^2}{a^2(x)} + \frac{n_z^2}{b^2(x)} \right), \quad (1.4)$$

onde m^* é a massa efetiva dos elétrons. A função E_n representa uma barreira de potencial efetiva, como mostrado na figura 1.2b. Desta forma, mostramos que um sistema sem barreira, apenas com uma constrição, é equivalente a um guia ideal com uma barreira de potencial. Veja que à medida que o índice n cresce tanto a altura quanto a largura da barreira são cada vez maiores, e que o valor máximo da barreira está na posição $x = 0$, coincidindo com a posição da parte mais estreita da constrição. Para um valor fixo de E (representado pela linha preta e grossa da figura 1.2b, existe um número finito de barreiras (3 na figura) cujo máximo não excede o valor da energia. Por sua vez, as alturas e as larguras das barreiras aumentam tão rapidamente com o crescimento de n , que para energias menores do que a altura da barreira (exceto para valores muito próximos ao seu

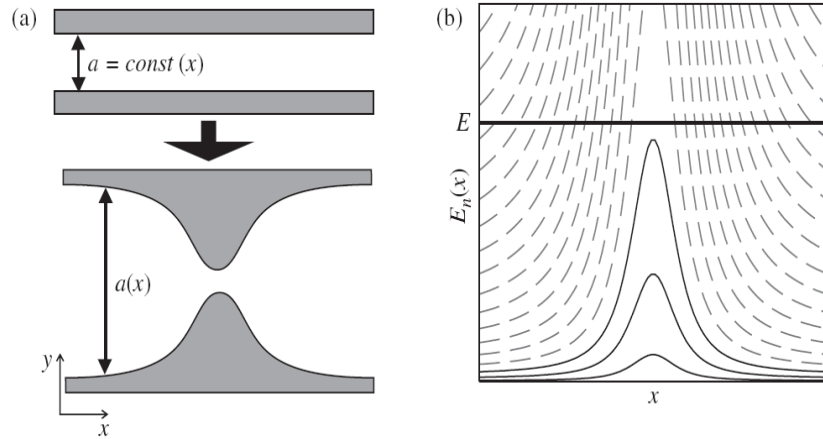


Figura 1.2 a) No topo é representado um guia de onda ideal, com seção transversal constante. Na parte inferior está desenhado um guia de onda adiabático com uma constricção. b) Representação gráfica das barreiras de potencial que surgem na análise do guia de onda adiabático. A linha preta grossa representa a energia de um elétron que incide na constricção. Esta figura foram tiradas da ref. [1].

valor máximo) os elétrons são completamente refletidos. Reciprocamente, para energia maiores do que a altura da barreira os elétrons são completamente transmitidos. As barreiras então têm um comportamento quase clássico, de maneira que para uma energia dada, o número de barreiras cujos valores são menores do que a energia determinam o número de canais abertos no sistema.

De toda a análise anterior podemos concluir que o transporte através de um número discreto de canais pode existir mesmo na ausência de guias de onda ideais. Embora a geometria das nanoestruturas reais seja bem diferente daquela de um guia de onda ideal, estes últimos são usados como um modelo efetivo para estudar as propriedades de transporte.

1.3 LIMITE SEMICLÁSSICO

Quando o comprimento de onda das partículas é pequeno em comparação com as dimensões características do sistema, então as propriedades deste último são bem descritas semiclassicamente [19]. Na área de ótica, este critério é o que estabelece a transição entre ótica ondulatória e ótica geométrica [20]. Matematicamente, o limite semiclassico é tomado fazendo $\hbar \sim 0$, o que equivale a fazer o comprimento de onda $\lambda = 2\pi\hbar/p$ muito pequeno. Num guia ideal tridimensional, com seção transversal de área A , a relação de dispersão dos elétrons é dada por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + E_n, \quad (1.5)$$

onde E_n é a energia de corte do modo n , a qual não explicitamos. Se o guia não for muito estreito podemos considerar condições de fronteira periódicas no plano $y - z$, e o número

de modos dentro dele pode ser estimado. No plano $k_y - k_z$ do espaço recíproco a cada estado corresponde uma área igual a $4\pi^2/A$. Para que existam modos propagantes deve cumprir-se que $E > E_n$. Na energia de Fermi E_F , os estados nesse plano podem ocupar uma área de até πk_F^2 , e portanto o número de modos possíveis é

$$N_{\text{abertos}}^{3D} = \text{Int} \left[\frac{\pi A}{\lambda_F^2} \right], \quad (1.6)$$

onde Int representa a operação de parte inteira, e λ_F é o comprimento de onda de Fermi dos elétrons. Uma análise similar pode ser feita no caso de um gás bidimensional, sendo que se o guia tiver largura L , o número de canais abertos na energia de Fermi é

$$N_{\text{abertos}}^{2D} = \text{Int} \left[\frac{2L}{\lambda_F} \right]. \quad (1.7)$$

Em materiais semicondutores, e portanto em gases bidimensionais, o comprimento de onda de Fermi dos elétrons pode variar entre 30 nm e 80 nm aproximadamente, enquanto que em metais é da ordem de Angströms. Isto significa que existe uma diferença de duas ordens de magnitude entre os comprimentos de onda de Fermi típicos para estes tipos de materiais. Façamos uma estimativa: admitindo que um guia bidimensional semiconductor tem largura $L = 1 \mu\text{m}$, enquanto que a área da seção transversal de um guia metálico tridimensional tem dimensões lineares da ordem de 100 nm e portanto $A = 10^4 \text{ nm}^2$. Escolhendo de maneira conservadora $\lambda_F \approx 30 \text{ nm}$ no caso do semiconductor e $\lambda_F \approx 5 \text{ Angströms}$ para o metal, encontramos que no primeiro caso o número de canais abertos é aproximadamente 65, e para o metal aproximadamente 12 000. Uma diferença de três ordens de grandeza!

1.3.1 Barreira dupla

Para melhor entender as implicações do limite semiclássico, analisemos um sistema de barreira dupla, como a mostrada na fig. 1.3a. Admita inicialmente que existe apenas um canal aberto nos guias adjacentes a cada barreira. Assumamos que quando um elétron se desloca entre as duas barreiras, ele ganha uma fase de $\chi/2$, onde $\chi = 2d\sqrt{2mE}/\hbar$, E e m são a energia e a massa do elétron respectivamente, e d é a distância entre as barreiras. Para calcular a amplitude de probabilidade de transmissão no sistema devemos considerar os processos de reflexões múltiplas entre ambas as barreiras, assim levamos em conta todas as formas possíveis em que o elétron pode ser transmitido do guia no extremo esquerdo para o guia no extremo direito. Assuma que as barreiras são caracterizadas pelas amplitudes de transmissão e reflexão t_i e r_i respectivamente, onde $i \in \{1, 2\}$. A função de onda de um elétron transmitido do extremo esquerdo até o direito do sistema vai estar determinada pelo “caminho” do elétron. Dessa forma, a função de onda do elétron no guia do extremo direito será a superposição coerente das funções de onda do elétron para todos os caminhos possíveis. Portanto, a amplitude de probabilidade de transmissão é dada por

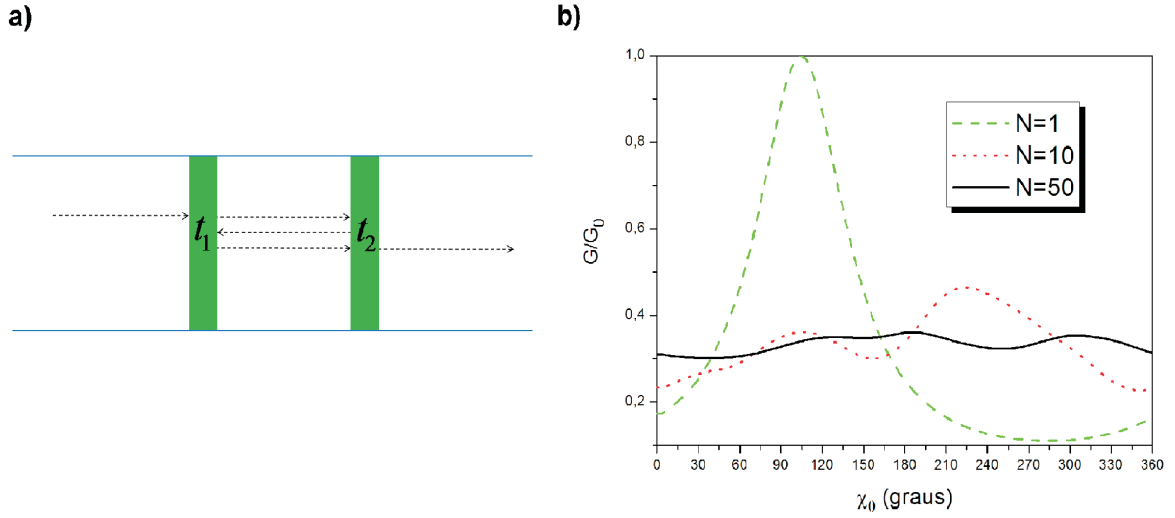


Figura 1.3 a) Representação do sistema de barreira dupla. As linhas tracejadas representam um dos caminhos possíveis que pode seguir o elétron. b) Comportamento da condutância da barreira dupla em relação à fase de referência χ_0 , quando variamos o número de canais de transmissão abertos.

$$\begin{aligned}
 t_T &= t_1 t_2 + t_1 r_2 e^{i\chi/2} r_1 e^{i\chi/2} t_2 + t_1 r_2 e^{i\chi/2} r_2 e^{i\chi/2} r_1 e^{i\chi/2} r_1 e^{i\chi/2} t_2 + \dots \\
 &= \frac{t_1 t_2}{1 - r_1 r_2 e^{i\chi}}.
 \end{aligned}$$

Então a condutância do sistema é dada pela fórmula de Landauer [21]

$$G/G_0 = |t_T|^2 = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - \sqrt{R_1 R_2} \cos \chi}, \quad (1.8)$$

onde $T_i = |t_i|^2$ e $R_i = |r_i|^2$.

Primeiramente, perceba da eq. (1.8) que a condutância não é determinada apenas pelos coeficientes de transmissão de cada barreira, mas depende também da fase adquirida pelos elétrons no deslocamento entre as barreiras. Esta fase reflete os efeitos da coerência quântica do sistema. Mas, o que acontece quando o número de canais de transmissão aumenta? Na construção de nanoestruturas, é impossível evitar a presença de impurezas e defeitos, o qual tem efeitos significativos nos fenômenos de transporte. Se considerarmos que o comprimento de onda dos elétrons é muito menor do que as dimensões típicas da amostra, apenas mudar uma impureza de posição poderia mudar completamente a fase adquirida pelo elétron quando este percorre a amostra. A referida ausência de controle no processo de construção da nanoestrutura implica no desconhecimento de alguns desvios

de fase que caracterizam o espalhamento no sistema, estes são comumente introduzidos no modelo como variáveis aleatórias. Para ver qual o efeito deles, admitamos que existam N canais abertos em cada guia representado na fig. 1.3a, e que a fase χ_i acumulada por cada canal é aleatória e independente ². Desta forma a condutância é dada por

$$G/G_0 = \sum_{i=1}^N \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - \sqrt{R_1 R_2} \cos \chi_i}. \quad (1.9)$$

Na fig. 1.3b representamos a dependência da condutância com relação a uma fase de referência χ_0 . A energia do elétron é variada num dado intervalo, menor do que as alturas das barreiras, de forma tal que a fase χ_0 percorre os valores entre 0 e 2π . Cada fase χ_i foi gerada como a soma da fase χ_0 e um número gerado aleatoriamente entre 0 e 2π usando uma distribuição uniforme. Escolhemos $T_1 = T_2 = 0.5$, e consideramos 1, 10 e 50 canais abertos. Quando existe apenas um canal aberto nos guias, a condutância exibe um pico de ressonância para um dado valor de χ_0 , indicando a existência de um estado de energia discreto entre as barreiras (podem existir mais estados discretos fora do intervalo de energia variado). À medida que aumentamos o número de canais abertos, os picos de ressonância para cada canal atingem o valor máximo em diferentes valores aleatórios da fase de referência, de maneira que quando somamos as contribuições de cada canal na eq. (1.9) a condutância tem uma menor dependência com a fase χ_0 , o que representa uma atenuação dos efeitos de interferência no sistema. Este efeito é conhecido como *auto-média*, e de forma geral acontece com todos os observáveis de transporte no limite semiclássico. Por esta razão as correções quânticas neste regime, como a correção de localização fraca da condutância por exemplo, são relativamente pequenas.

1.4 SISTEMAS HÍBRIDOS

Na seção anterior analisamos as consequências da coerência de fase para a barreira dupla. Nesse sistema o elétron tem a possibilidade de se deslocar de um ponto a outro no espaço, o que dá lugar a efeitos de interferência quando as funções de ondas determinadas por vários caminhos possíveis são superpostas. Nos sistemas mesoscópicos híbridos são “ativados” outros graus de liberdade além do espacial, que dão lugar a novas formas de superposições coerentes das funções de onda. Este fato, unido à existência de *contatos ativos*, traz para estes sistemas uma nova e rica fenomenologia. Por contato ativo, entendemos aquele cuja matriz de espalhamento é sensível ao grau de liberdade em questão.

Neste trabalho estudaremos dois tipos de sistemas híbridos: sistemas com componentes normais e ferromagnéticas (**NF**), e sistemas com componentes normais e supercondutoras (**NS**). Por componente normal entenderemos tudo o que não seja ferromagnético ou supercondutor, incluindo desta maneira materiais metálicos normais e semicondutores.

²Num modelo mais realista o espalhamento entre as barreiras deve misturar os canais de propagação, como veremos nos próximos capítulos para outros sistemas, mas por enquanto esta simplificação é suficiente para nossos propósitos.

1.4.1 Sistemas NF

Um material ferromagnético é caracterizado por uma temperatura crítica, conhecida como temperatura de Curie (T_{curie}), na qual acontece uma transição de fase. Abaixo da temperatura de Curie a simetria de rotação de spin é espontaneamente quebrada, tendo lugar um ordenamento macroscópico do spin dos elétrons [22]. A observação experimental de altas temperaturas de Curie nos materiais ferromagnéticos é explicada microscopicamente como uma combinação da interação coulombiana e do princípio de exclusão de Pauli.

Quando um metal ferromagnético é justaposto a um metal normal, forma-se na interface um contato magneticamente ativo, de maneira que suas propriedades de espalhamento dependem da direção do spin do elétron incidente. Dois fatores, que podem combinar-se em maior ou menor medida, estão intimamente ligados a esta sensibilidade na interface [23]. Primeiramente, a existência de impurezas cujas seções de choque transversais dependem da direção do spin. Em segundo lugar, a diferença entre as estruturas de banda para elétrons com spin majoritários e minoritários no material ferromagnético. Mesmo que o contato seja completamente limpo como acontece no regime balístico, esta diferença o fará magneticamente ativo. Em vários sistemas NF, a resistência da interface domina a resistência devido ao espalhamento difusivo no interior do material. Existem outros tipos de contatos ativos, como contatos balísticos, contatos difusivos, barreiras de tunelamento e constrições geométricas [40]. Nos contatos difusivos, a contribuição do espalhamento difusivo à resistência é bem maior do que a contribuição da interface.

Para um dado material, existe uma escala de comprimento l_{sf} através da qual o elétron se desloca sem ter seu spin invertido. Enquanto que para um metal ferromagnético l_{sf} é da ordem de nanômetros (~ 50 nm para o Co), num metal normal l_{sf} pode ser da ordem de microns ($\sim 1 \mu\text{m}$ no Cu) [23]. Desta forma, injetando uma corrente de spin num metal normal através de um metal ferromagnético é possível “magnetizar” o metal normal numa escala de comprimento relativamente grande. Esta magnetização do metal normal acontece no regime de transporte e portanto é um fenômeno de não equilíbrio.

Quando as magnetizações de todos os elementos da nanoestrutura são colineares, o transporte dos elétrons com spin opostos pode ser descrito independentemente. O cenário muda por completo quando as magnetizações são não colineares. Neste caso as funções de onda dos elétrons devem ser consideradas como superposições coerentes de uma base no espaço de spin. Por exemplo, um dos autoestados do operador $\vec{S} \cdot \hat{n}$, onde $\vec{S}$ é o operador de spin e $\hat{n}$ é o vetor de norma 1 na direção definida pelos ângulos polar β e azimutal α , é dado por [5]

$$|\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle = \cos(\beta/2)|+\rangle + e^{i\alpha} \sin(\beta/2)|-\rangle, \quad (1.10)$$

onde $|+\rangle$ e $|-\rangle$ são os autoestados de S_z .

Para entender como o contato magneticamente ativo mistura as componentes no grau de liberdade de spin, consideremos a interface NF mostrada na fig. 1.4a, onde a magnetização do material ferromagnético é paralela à direção z . Vamos assumir que a interface transmite completamente a componente de spin paralela à magnetização, e que reflete a componente antiparalela. Consideremos que um elétron no estado $|S_x; +\rangle$ ($\alpha = 0$ e $\beta = \pi/2$) vindo do lado normal é espalhado na interface, então o elétron poderá ser

refletido com probabilidade $1/2$ e nesse caso passará a ocupar o estado $|-\rangle$. Se for transmitido, o que também acontece com probabilidade $1/2$, ocupará o estado $|+\rangle$ (ver fig. 1.4a). Fazendo um balanço do momento angular, percebe-se que o lado ferromagnético absorveu uma componente perpendicular à sua magnetização. Este fenômeno é conhecido como transferência de *torque de spin* [25]. Na figura representamos o torque com o vetor $\vec{\tau}$.

Hoje em dia, existe uma área na física conhecida como *spintrônica*, que estuda fenômenos como o explicado acima. Este campo começou a desenvolver-se a partir da descoberta da magnetoresistência gigante [26], que em poucos anos foi incorporada na indústria da computação, evidenciando assim o grande potencial tecnológico da área. A spintrônica tem por foco o estudo de dispositivos onde o grau de liberdade de spin tem um papel determinante. O seu principal objetivo é aprender a controlar o spin dos elétrons, tendo como propósito final encontrar novas aplicações tecnológicas. Nos capítulos 2 e 4 estudaremos alguns sistemas onde o spin é controlado a partir do ângulo entre as magnetizações das componentes magnéticas da nanoestrutura.

1.4.2 Sistemas NS

Os supercondutores são materiais cuja resistência se anula abaixo de certa temperatura crítica T_c . Para os supercondutores convencionais (aqueles que são bem entendidos em termos da teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer), as temperaturas críticas podem ser de até umas poucas dezenas de Kelvins [27]. O estado fundamental de um supercondutor é descrito por uma função de onda macroscópica, na qual os elétrons estão acoplados em pares formando um estado de singleto, denominados pares de Cooper. Apesar da interação Coulombiana entre elétrons ser repulsiva, pode existir uma interação efetiva atrativa entre eles que é mediada por fônons, a qual dá lugar a estados ligados. A função de onda dos pares de Cooper é não nula numa escala espacial denominada comprimento de coerência, denotada por ξ_S . Para supercondutores balísticos temos que $\xi_S \sim \hbar v_F / \Delta$, onde v_F é a velocidade de Fermi e Δ denota o tamanho do gap no espectro de excitação das quase-partículas, neste caso o comprimento de coerência é da ordem de vários microns. Quando o supercondutor é difusivo temos que $\xi_S \sim \sqrt{\hbar D / \Delta}$, sendo D a constante de difusão. Neste regime a coerência elétron-buraco pode manifestar-se em escalas da ordem de centenas de nanômetros [28].

Quando um material normal é acoplado a um supercondutor, o primeiro faz uma “mímica” das propriedades do segundo. Enquanto que os portadores de carga para energia $E < \Delta$ no lado supercondutor são os pares de Cooper, no lado normal são os elétrons e buracos. Se uma diferença de potencial V for aplicada no sistema NS a energia dos elétrons e buracos pode ser estimada como $\max\{eV, k_B T\}$. Similarmente ao comprimento de coerência ξ_S dos pares de Cooper, no lado normal a presença do supercondutor induz um comprimento de coerência entre elétrons e buracos. Este comprimento, denotado por ξ , é estimado como $\hbar v_F / E$ para materiais normais no regime balístico e por $\sqrt{\hbar D / E}$ no regime difusivo. Portanto, para escalas menores do que ξ as funções de onda de elétrons e buracos não podem ser descritas de maneira independente, pois há uma superposição coerente dos estados de elétron e de buraco [29]. A mesma pode ser escrita como

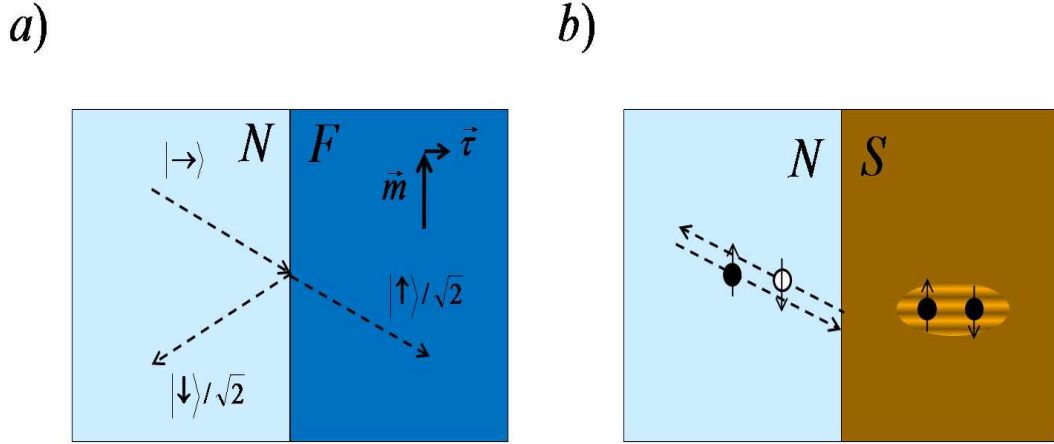


Figura 1.4 a) Processo de espalhamento na interface NF de um elétron que vem do lado normal. O torque transmitido e a magnetização do material ferromagnético são representados pelos vetores $\vec{\tau}$ e $\vec{m}$ respectivamente. b) Processo de reflexão de Andreev na interface NS. Um buraco é refletido com spin e velocidade opostos às do elétron incidente. No lado supercondutor um par de Cooper é criado.

$$\Psi(\vec{r}) = \psi_e(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_b(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Na equação anterior os vetores coluna representam uma base no espaço definido através do grau de liberdade elétron-buraco (também conhecido como espaço de Nambu), enquanto que ψ_e e ψ_b são as funções de onda do elétron e buraco respectivamente.

As interfaces NS são ativas na estrutura de Nambu, pois para energias $E < \Delta$ tem lugar um processo de transmissão de carga em unidades de $2e$, através do qual um elétron vindo do lado normal é refletido como buraco com velocidade e spin opostos, criando-se dessa forma um par de Cooper no lado supercondutor. Este mecanismo é conhecido como *reflexão de Andreev* [30], e está esquematizado na fig. 1.4b.

Vale salientar que os sistemas NS também possuem um grande potencial tecnológico. Por exemplo, o fenômeno de reflexão de Andreev é usado para construir sensores que medem polarização dos elétrons num determinado material [31]. Um outro exemplo muito notável é o uso do efeito Josephson [32] na construção de dispositivos usados na magnetometria [33], tecnologia de qubits [34], entre outros.

1.5 VISÃO GERAL DA TESE

É conveniente dividir os resultados desta tese em duas partes: aqueles obtidos através da teoria quântica de circuitos e os obtidos usando a teoria de matrizes aleatórias. A teoria de circuitos é usada apenas no capítulo 2 para sistemas híbridos NF, enquanto que a teoria de matrizes aleatórias é a ferramenta utilizada nos capítulos 3, 4, 5 e 6. Um ponto comum e unificador destes quatro capítulos é o modelo de estube, que é usado para parametrizar as matrizes de espalhamento de sistemas normais, NF e NS.

No capítulo 2 explicamos inicialmente as generalidades da teoria de circuitos. Em seguida passamos à aplicação da mesma num sistema de válvula de spin, onde introduzimos alguns conceitos importantes e analisamos as situações nas quais as magnetizações são colineares ou não. Calculamos observáveis como torque de spin e condutância, e discutimos a fenomenologia. Posteriormente estudamos um sistema de multi-camadas normais e ferromagnéticas alternadas, e exploramos de maneira particular o caso em que as magnetizações possuem uma configuração helicoidal.

O principal tema abordado no capítulo 3 é a possibilidade de se estudar um circuito quântico com topologia arbitrária fazendo a composição das matrizes de espalhamento que caracterizam separadamente a cada elemento do sistema. Na primeira parte do capítulo apresentamos alguma informação sobre a teoria de matrizes aleatórias, explicamos brevemente o método diagramático para fazer médias sobre ensembles circulares, assim como a essência do modelo de estube. Logo mostramos que é possível modelar um circuito quântico com topologia arbitrária como um estube. Estabelecemos um conjunto de regras que indicam como construir, para um circuito dado, as matrizes da parametrização de estube. Com o objetivo de mostrar as possibilidades de cálculo usando esta parametrização, redefinimos a simbologia do método diagramático, e importamos os diagramas para o cálculo da localização fraca da condutância de um sistema com um único ponto. Calculamos a localização fraca de um sistema com um número genérico de cavidades caóticas acopladas em série através de contatos com transparência arbitrária, e reproduzimos os casos limites disponíveis na literatura. Também calculamos o mesmo observável para quatro cavidades acopladas com a topologia do quadrado.

No capítulo 4 fazemos uma dedução da fórmula de Landauer-Büttiker considerando os guias acoplados à amostra como sendo ferromagnéticos. Mostramos como modelar uma cavidade caótica acoplada a um número arbitrário de reservatórios normais e ferromagnéticos com magnetizações não colineares. Definimos um conjunto reduzido de parâmetros que caracterizam cada contato, suficientes para calcular qualquer observável com estatística linear nos autovalores de transmissão, e calculamos explicitamente estes parâmetros para o caso de contatos ideais e junções de tunelamento. Exploramos particularmente o fator Fano num sistema FNF com contatos assimétricos, tanto no caso de contatos balísticos quanto para junções de tunelamento.

O sistema estudado no capítulo 5 é uma cavidade caótica acoplada a um reservatório normal e a outro supercondutor através de contatos com uma determinada transparência, na qual é aplicado um campo magnético que quebra a simetria de reversão temporal. Apresentamos primeiramente as equações de Bogoliubov-De Gennes, e explicamos o regime de trabalho assim como a forma na qual modelamos o sistema. Depois de implementar a parametrização de estube para este bilhar de Andreev, calculamos o termo dominante da condutância, explicando algumas diferenças entre os casos com simetria de reversão temporal e sem ela. Posteriormente calculamos o fator Fano e analisamos alguns casos limites. Explicamos as razões pelas quais a correção da localização fraca da condutância pode existir num sistema NS mesmo quando a simetria de reversão temporal está quebrada. Esta explicação é feita utilizando a linguagem de pares de trajetórias interferentes e em termos da técnica diagramática. Por último calculamos a correção de localização fraca da condutância e encontramos uma interessante transição entre loca-

lização e antilocalização completamente induzida pelas transparências das barreiras. Na última seção fazemos um mapa exato entre um sistema NS e duas cavidades caóticas acopladas em série a reservatórios normais. Todos os resultados analíticos obtidos no capítulo 5 foram comprovados usando simulações numéricas, embora estas não sejam apresentadas.

Dos sistemas explorados neste trabalho, o único que não está num regime de transporte semiclássico é o analisado no capítulo 6. No referido capítulo estudamos vários cumulantes de carga transmitida numa cavidade caótica acoplada a reservatórios normais através de barreiras com transparências arbitrárias, sendo que nos contatos existem poucos canais de transmissão abertos. Na primeira parte do capítulo introduzimos o formalismo da estatística de contagem de carga transmitida. Na segunda parte explicamos a forma como são feitas as simulações numéricas, e mostramos o resultado das simulações para os quatro primeiros cumulantes de carga transmitida. Estes resultados revelam a existência de não analiticidades nas distribuições. Com o objetivo de explicar e calcular a localização exata das não analiticidades dentro da distribuição, seguimos uma idéia sugerida por Sommers *et al.* no contexto de cavidades com contatos ideais [92]. Descobrimos dessa forma um novo tipo de singularidade, análogas às singularidades de Van Hove para a densidade de estados eletrônica num sólido cristalino.

Finalmente, no capítulo 7, apresentamos nossas conclusões e perspectivas.

CAPÍTULO 2

TEORIA QUÂNTICA DE CIRCUITOS

2.1 INTRODUÇÃO

Existem várias teorias que modelam nanoestruturas através de um *circuito quântico*, com o objetivo de estudar as suas propriedades de transporte. Este novo conceito nasceu com uma teoria semiclássica denominada *teoria quântica de circuitos* (**TQC**), concebida inicialmente para sistemas híbridos normal-supercondutor [35]. Em poucos anos o uso da TQC foi estendido a sistemas híbridos normal-ferromagnético [36, 37] e normal-ferromagnético-supercondutor [38].

A TQC é construída a partir de uma combinação de dois formalismos, a teoria de funções de Green de Keldysh e a abordagem de matrizes de espalhamento. A principal diferença destes formalismos em relação a teorias mais convencionais usadas em sistemas macroscópicos, como a equação de Boltzmann por exemplo, é que eles são capazes de levar em conta a coerência de fase dos elétrons. Esta coerência, como foi mostrado na introdução, têm um papel fundamental nos fenômenos de transporte em sistemas mesoscópicos.

Modelar uma nanoestrutura por um circuito quântico implica em associar a cada parte da mesma um de três tipos de elementos básicos, a citar reservatórios, nós e conectores. Esta classificação é feita de acordo com as propriedades termoelétricas de cada parte do sistema. Os terminais macroscópicos adjuntos à amostra mesoscópica podem ser considerados como reservatórios infinitos de elétrons em equilíbrio local. As partes da nanoestrutura que têm maior resistência elétrica modelam-se como conectores, enquanto que as que têm uma resistência desprezível e encontram-se em regimes de transporte que isotropizam o movimento dos elétrons tomam-se como nós. Os dois mecanismos microscópicos mais comuns que produzem tal isotropização são o espalhamento devido a impurezas e o caos quântico.

Tanto os nós quanto os reservatórios são descritos por *matrizes de voltagem*, que são funções de Green de Keldysh isotropizadas no espaço dos momentos. Aos conectores por sua parte, atribui-se-lhe um conjunto reduzido de parâmetros denominado às vezes como *código chave*, que caracteriza as propriedades de transmissão dos mesmos. Para conectores que não são ativos no espaço de spin o código chave é o conjunto de autovalores de transmissão. Quando o dispositivo mesoscópico tem componentes ferromagnéticas não colineares, a TQC tem encontrado alguns inconvenientes técnicos que serão brevemente explicados na próxima seção. Uma consequência prática disto é que a estrutura de Keldysh das funções de Green necessita ser abandonada, e perde-se assim grande parte do potencial do formalismo. Contudo, o uso de uma equação de taxa tipo Boltzmann definida sobre o grupo $SU(2)$ é suficiente para levar em conta a superposição coerente de diferentes estados de spin, o que permite abarcar uma ampla e riquíssima gama de fenômenos envolvendo este grau de liberdade.

Neste capítulo explicaremos brevemente como é construída a TQC. A mesma será usada para estudar observáveis como torque de spin e condutância em dois sistemas. Com o objetivo de ganhar intuição e explicar alguns conceitos importantes, estudaremos primeiro uma válvula de spin com estrutura pilar, do tipo FNF. Finalmente analisaremos uma cadeia de multi-camadas metálicas híbridas normais e ferromagnéticas.

2.2 CORRENTE MATRICIAL

A principal aproximação da teoria quântica de circuitos é assumir que os nós, similarmente a reservatórios macroscópicos, são caracterizados por funções de Green de Keldysh isotropizadas no espaço dos momentos, denominadas matrizes de voltagem [1]. Esta simplificação permite encontrar uma expressão para a corrente generalizada que passa através de um conector, e obter leis de conservação, também generalizadas, nos nós. A corrente generalizada define-se como

$$\check{I}(x; E) = \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x'} \right) \frac{ie\hbar}{2m} \int d\vec{\rho} \check{G}(\vec{r}, \vec{r}', E). \quad (2.1)$$

onde $\check{G}(\vec{r}, \vec{r}', E)$ é a função de Green de Keldysh no extremo do conector, a qual não está isotropizada. O vetor $\vec{\rho}$ denota as coordenadas transversais. Para achar esta função de Green, Nazarov assumiu um mecanismo particular de isotropização, *i.e.* o espalhamento difusivo. Esse mecanismo tem efeito no que ele denominou de “zonas de isotropização”, as quais estão entre o conector e o nó. O grande sucesso conceitual dessa hipótese foi possibilitar encontrar condições de contorno universais, que não dependem do mecanismo de isotropização, e relacionam a função de Green não isotropizada no extremo do conector com a função de Green isotropizada no nó. Estas condições, somadas ao fato de que as funções de Green não isotropizadas em ambos os lados do conector podem ser relacionadas através da matriz de transferência do mesmo, permitem achar a corrente generalizada como função das propriedades de transmissão do conector e as funções de Green nos nós adjacentes [35].

No caso em que o sistema mesoscópico tem componentes ferromagnéticas, com magnetizações não colineares de maneira geral, apesar de estabelecer-se condições de contorno universais, elas não permitem obter a expressão da corrente generalizada como função de um conjunto reduzido de parâmetros para conectores arbitrários, por causa de obstáculos técnicos que aparecem devido à não comutatividade no espaço de spin das matrizes envolvidas. A expressão generalizada de corrente é expressa como uma função de toda a matriz de espalhamento do conector, sendo assim inútil para cálculos analíticos. Apenas em casos particulares de conectores, como junções de tunelamento, uma redução de parâmetros pode ser feita [38]. Por tal razão, a estrutura de Keldysh da matriz de corrente deve ser abandonada, o que impede a descrição da estatística completa de contagem de carga transmitida quando os conectores são ativos no espaço de spin.

Pelos motivos explicados acima, a TQC para sistemas NF atribui aos nós e reservatórios matrizes de distribuição $\hat{f}$ que têm a informação sobre a *acumulação de carga* e *acumulação de spin*. Cada conector por sua parte é caracterizado por um *tensor de condutância*, sendo este o novo “código chave”. Todos estes conceitos serão esclareci-

dos adiante. Da corrente generalizada, trabalha-se na TQC apenas com a componente Keldysh, que coincide com a definição de corrente no espaço de spin

$$I_{s,s'}(x; E) = \frac{ie\hbar}{2m} \int d\vec{r} \left\langle \frac{\partial \psi_{s'}^\dagger}{\partial x} \psi_s - \psi_{s'}^\dagger \frac{\partial \psi_s}{\partial x} \right\rangle, \quad (2.2)$$

onde $\psi_s(\vec{r}, E)$ é o operador de criação de férmion com spin s , na posição $\vec{r}$ e com energia E . De agora em diante denominaremos $I_{s,s'}(x; E)$ de corrente matricial.

Para um conector ativo no espaço de spin, unindo um nó ferromagnético a um normal, obtém-se que a corrente matricial no lado normal é dada por [36]:

$$\hat{I}_{F|N} = \frac{e}{h} \sum_{n,m} \left[\hat{t}'_{nm} \hat{f}^F (\hat{t}'_{mn})^\dagger + \hat{r}_{nm} \hat{f}^N (\hat{r}_{mn})^\dagger - \delta_{nm} \hat{f}^N \right]. \quad (2.3)$$

Na expressão acima as somas vão de 1 ao número de canais abertos no lado normal, $\hat{r}$ e $\hat{t}'$ são os blocos de reflexão e transmissão da matriz de espalhamento do conector, enquanto que $\hat{f}^F$ e $\hat{f}^N$ são as matrizes de distribuições nos nós ferromagnético e normal respectivamente. Se supusermos que as duas matrizes de distribuição são proporcionais à identidade, o que acontece nos reservatórios, a fórmula de Landauer-Büttiker é recuperada. Contudo, devemos lembrar que o formalismo de Landauer-Büttiker é válido num domínio muito mais amplo, que não se limita ao regime semiclássico.

2.3 VÁLVULA DE SPIN (FNF)

Analisemos de que forma podemos modelar a válvula de spin representada na parte esquerda da fig. 2.1. A nanoestrutura está constituída por três camadas com estrutura pilar. A corrente flui perpendicular ao plano das magnetizações. As duas camadas externas são feitas de um material ferromagnético duro (como o ferro por exemplo) e cada uma delas têm uma magnetização caracterizada pelas direções $\vec{m}_1$ e $\vec{m}_2$. Vamos supor que existe apenas um domínio magnético na camada e que a magnetização é uniforme. Este modelo é denominado de *modelo de macro-spin*. A camada espaçadora é feita de um metal normal que consideraremos ter um comprimento de relaxação de spin muito maior do que suas dimensões. Vamos assumir também que as resistências das camadas ferromagnéticas são muito maiores do que a da camada normal, de modo que podemos usar a teoria de circuitos modelando as duas camadas ferromagnéticas como conectores e a camada normal como um nó. Contudo, devemos esclarecer que a condição anterior é um tanto limitada para sistemas de multi-camadas, onde comumente as camadas magnéticas são também bastante condutoras. De fato, na ref. [40] foi feita uma generalização da teoria de circuitos para superar este limitante e a principal modificação da teoria foi uma renormalização dos parâmetros que caracterizam o conector. Portanto, procederemos a aplicar a teoria de circuito da maneira usual. Um modelo mais realista deste mesmo sistema pode ser encontrado na ref. [41].

Os terminais acoplados às duas camadas ferromagnéticas serão modelados como reservatórios infinitos de elétrons. O circuito equivalente pode ser representado então como mostrado na parte direita da fig. 2.1. Tanto o nó como os dois reservatórios são representados por círculos na figura, correspondendo a cada um deles uma função distribuição

$\hat{f}_k = f_k^0 \hat{1} + \vec{f}_k \cdot \hat{\vec{\sigma}}$ com $k \in \{1, 2, 3\}$, e sendo $\hat{\vec{\sigma}}$ um vetor que tem como componentes as matrizes de Pauli. A quantidade escalar f_k^0 quantifica a acumulação de carga, enquanto que $\vec{f}_k$ quantifica a acumulação de spin. Por sua vez, os conectores são representados por retângulos. Note que ilustramos o ângulo relativo entre as magnetizações, mas deve ser lembrado que os vetores da magnetização estão contidos no plano das camadas magnéticas. É instrutivo esclarecer que se o sistema estudado fosse uma camada normal adjunta a dois reservatórios ferromagnéticos, estando estes últimos em equilíbrio local, a forma de modelar o sistema através da teoria de circuito seria exatamente a mesma, pois em equilíbrio local não existe acumulação de spin, mesmo que os reservatórios sejam ferromagnéticos. A acumulação de spin só tem lugar fora do equilíbrio. Portanto teremos que $\vec{f}_k = \vec{0}$ para $k \in \{1, 3\}$; e as acumulações de carga estarão dadas pelas distribuições de Fermi-Dirac. Isto implica que as distribuições matriciais serão proporcionais à matriz identidade $\hat{1}$. Para a função $\hat{f}_2$ esta condição não é satisfeita de maneira geral, pois o nó encontra-se fora do equilíbrio. Esta função será a incógnita em nosso problema e deve ser achada usando as leis de conservação de carga e de spin.

Tentemos agora adaptar a expressão (2.3) válida para a parte normal de uma interface NF. Devido ao fato de que em nenhum momento da dedução, feita na ref. [23], se faz uso explícito da estrutura interna das funções de distribuição no espaço de spin, o nó ferromagnético pode ser substituído por um normal. Nesse caso, a corrente matricial para cada conector terá a forma:

$$\begin{cases} \hat{I}_1 = \frac{e}{h} \sum_{n,m} \left[\hat{t}'_{1,nm} \hat{f}_1(\hat{t}'_{1,mn})^\dagger + \hat{r}_{1,nm} \hat{f}_2(\hat{r}_{1,mn})^\dagger - \delta_{nm} \hat{f}_2 \right], \\ \hat{I}_2 = \frac{e}{h} \sum_{n,m} \left[\hat{t}'_{2,nm} \hat{f}_3(\hat{t}'_{2,mn})^\dagger + \hat{r}_{2,nm} \hat{f}_2(\hat{r}_{2,mn})^\dagger - \delta_{nm} \hat{f}_2 \right]. \end{cases} \quad (2.4)$$

Aqui tivemos o cuidado de definir as correntes no nó, pois devido ao fato das camadas magnéticas absorverem parte da corrente de spin, essa grandeza não se conserva.

Agora faremos uma simplificação referente à matriz de espalhamento dos conectores. Consideraremos que no espalhamento dos elétrons nos conectores não estão envolvidos processos de *reversão de spin*. Isto implica que os elementos fora da diagonal na estrutura de spin, de cada bloco da matriz de espalhamento do i -ésimo conector $\hat{r}_i$, $\hat{r}'_i$, $\hat{t}_i$ e $\hat{t}'_i$, são nulos na representação onde a direção de quantização coincide com a da magnetização do próprio conector. Por exemplo, para o bloco $\hat{r}_i$ teremos $r_i^{\uparrow\downarrow} = r_i^{\downarrow\uparrow} = 0$. Num outro sistema de coordenadas, cada bloco deverá ser rotacionado usando a correspondente transformação do grupo SU(2). Essa rotação será feita de maneira implícita usando as *matrizes de projeção* definidas como $\hat{u}_i^s = \frac{1}{2}(\hat{1} + s\vec{m}_i \cdot \hat{\vec{\sigma}})$. Os blocos envolvidos nas eqs. (2.4) podem então ser escritos como:

$$\begin{cases} \hat{r}_{i,nm} = \sum_s \hat{u}_i^s r_{i,nm}^s, \\ \hat{t}'_{i,nm} = \sum_s \hat{u}_i^s (t')_{i,nm}^s. \end{cases} \quad (2.5)$$

Algumas propriedades destas matrizes são apresentadas no apêndice A. Substituindo

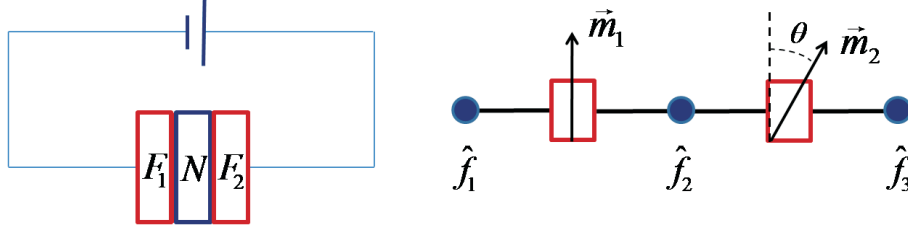


Figura 2.1 Representação esquemática da válvula de spin (esquerda) e o circuito equivalente na TQC (direita).

as eqs. (2.5) em (2.4), usando o fato de que $\hat{f}_{1,3}$ são proporcionais à identidade e as propriedades (A.4) e (A.5) do apêndice A obtém-se

$$\hat{I}_i = \frac{1}{e} \sum_{s,s'} G_i^{s,s'} \hat{u}_i^s (\hat{f}_i - \hat{f}_{i+1}) \hat{u}_i^{s'}, \quad (2.6)$$

com $G_i^{s,s'}$ sendo o tensor de condutância, definido como:

$$G_i^{s,s'} = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} \left(\delta_{nm} - r_{i,nm}^s r_{i,mn}^{s'} \right). \quad (2.7)$$

Para $s = s'$ os elementos do tensor são reais e são dados por

$$G_i^{s,s} = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} t_{i,nm}^s t_{i,mn}^s = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} (t')_{i,nm}^s (t')_{i,mn}^s, \quad (2.8)$$

que segue da condição de unitariedade da matriz de espalhamento do conector, enquanto que para $s \neq s'$ os elementos são de maneira geral complexos. Estes últimos são chamados de condutância de mistura, e são relevantes apenas quando o transporte é não colinear.

Note como na dedução da equação (2.6) fizemos uma redução de parâmetros. Enquanto que a eq. (2.4) depende de toda a matriz de espalhamento do conector, a expressão (2.6) usa apenas a informação do tensor de condutância. Ao invés da definição (2.7), comumente são usados os parâmetros $G_i = G_i^{\uparrow\uparrow} + G_i^{\downarrow\downarrow}$, $P_i = (G_i^{\uparrow\uparrow} - G_i^{\downarrow\downarrow})/G_i$, $\eta_i' = 2\text{Re}(G_i^{\uparrow\downarrow})/G_i$ e $\eta_i'' = 2\text{Im}(G_i^{\uparrow\downarrow})/G_i$. Em particular o parâmetro P_i é conhecido como *polarização*.

2.3.1 Leis de conservação

Será muito útil explicitar as componentes de corrente de carga e de spin, expressando a corrente matricial como $\hat{I}_i = \frac{1}{2} [I_{C,i} \hat{1} + \vec{I}_{S,i} \cdot \vec{\sigma}]$. Aplicando a propriedade (A.3) do apêndice A mostra-se que para o i -ésimo conector a corrente de carga é dada por:

$$I_{C,i} = \frac{1}{e} \left[(G_i^{\uparrow\uparrow} + G_i^{\downarrow\downarrow})(f_i^0 - f_2^0) - (G_i^{\uparrow\downarrow} - G_i^{\downarrow\uparrow}) \vec{m}_i \cdot \vec{f}_2 \right], \quad (2.9)$$

e a de spin é dada por:

$$\begin{aligned} \vec{I}_{S,i} = \frac{1}{e} \left[\left((G_i^{\uparrow\uparrow} - G_i^{\downarrow\downarrow})(f_i^0 - f_2^0) + (2\text{Re}G_i^{\uparrow\downarrow} - G_i^{\uparrow\uparrow} - G_i^{\downarrow\downarrow}) \vec{m}_i \cdot \vec{f}_2 \right) \vec{m}_i - \right. \\ \left. 2\text{Re}G_i^{\uparrow\downarrow} \vec{m}_i \times \vec{f}_2 \times \vec{m}_i - 2\text{Im}G_i^{\uparrow\downarrow} \vec{f}_2 \times \vec{m}_i \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Explicuemos agora brevemente qual será o procedimento a seguir para calcular ambas as correntes. Primeiro devemos aplicar as leis de conservação de carga e de spin para obter um sistema de equações, que terá como incógnita as componentes da função de distribuição no nó. Isto se faz exigindo que:

$$\hat{I}_1 = \hat{I}_2. \quad (2.11)$$

Como consideramos o comprimento de relaxação de spin muito maior do que as dimensões da camada normal, não precisamos levar em conta a perda de coerência de spin no nó. Na TQC as perdas de coerência introduzem-se, de maneira geral, através de *correntes de escape* que fluem para reservatórios fictícios [1].

Depois de resolvido o sistema substituímos a solução na equação (2.6) e integramos sobre a energia. Omitindo o índice do conector, o resultado pode ser escrito como:

$$\hat{i} = \int d\epsilon \hat{I}(\epsilon) = \frac{1}{2} \left[i_C \hat{1} + \vec{i}_S \cdot \hat{\vec{\sigma}} \right]. \quad (2.12)$$

Esclarecido isto, vamos substituir as eqs. (2.6) na expressão (2.11) para obter o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} (G_1 + G_2)f_2^0 + (G_1P_1 \vec{m}_1 + G_2P_2 \vec{m}_2) \cdot \vec{f}_2 = G_1 f_1^0 + G_2 f_3^0, \\ (G_1 \eta_1' + G_2 \eta_2') \vec{f}_2 + (G_1P_1 \vec{m}_1 + G_2P_2 \vec{m}_2) f_2^0 + \\ (G_1\eta_1'' \vec{m}_1 + G_2\eta_2'' \vec{m}_2) \times \vec{f}_2 + [G_1(1 - \eta_1') \vec{m}_1 \vec{m}_1 + \\ G_2(1 - \eta_2') \vec{m}_2 \vec{m}_2] \cdot \vec{f}_2 = G_1P_1 \vec{m}_1 f_1^0 + G_2P_2 \vec{m}_2 f_3^0. \end{array} \right. \quad (2.13)$$

A primeira equação resulta da lei de conservação de carga, enquanto que a segunda é consequência da lei de conservação de spin.

2.3.2 Configurações colineares

Para ganhar intuição, vamos considerar primeiro o caso onde as magnetizações são paralelas e antiparalelas. Tomemos como eixo de quantização aquele definido pela direção $\vec{m}_1$. Façamos $\vec{m}_1 = \pm \vec{m}_2 = \vec{m}$. É fácil ver que nestas configurações existirão só duas incógnitas, *i.e.*, a acumulação de carga no nó f_2^0 e a componente paralela da acumulação

de spin $f_2^{\parallel} = \vec{f}_2 \cdot \vec{m}$. Multiplicando a segunda equação em (2.13) pela componente $\vec{f}_2 \times \vec{m}$ mostra-se que seu módulo é nulo. Dessa forma o novo sistema de equações se reduz a

$$\begin{cases} (G_1 + G_2)f_2^0 + (G_1P_1 \pm G_2P_2)f_2^{\parallel} = G_1f_1^0 + G_2f_3^0, \\ (G_1P_1 \pm G_2P_2)f_2^0 + (G_1 + G_2)f_2^{\parallel} = f_1^0G_1P_1 \pm f_3^0G_2P_2, \end{cases} \quad (2.14)$$

onde o sinal positivo é referente à configuração paralela e o negativo à anti-paralela. Veja que a informação da condutância de mistura desaparece do sistema de equações. A solução do sistema 2.14 não será apresentada aqui por brevidade. Vamos supor que $\int d\epsilon f_1^0(\epsilon) = eV$ e $\int d\epsilon f_3^0(\epsilon) = 0$. Substituindo então a solução de (2.14) em (2.6) e integrando sobre a energia encontramos que as correntes de carga e de spin, em termos dos tensores $G_i^{s,s'}$, são dadas por:

$$\begin{cases} i_C = \left[\frac{G_1^{\uparrow\uparrow}G_2^{s,s}}{G_1^{\uparrow\uparrow} + G_2^{s,s}} + \frac{G_1^{\downarrow\downarrow}G_2^{\bar{s},\bar{s}}}{G_1^{\downarrow\downarrow} + G_2^{\bar{s},\bar{s}}} \right] V, \\ \vec{i}_S = \left[\frac{G_1^{\uparrow\uparrow}G_2^{s,s}}{G_1^{\uparrow\uparrow} + G_2^{s,s}} - \frac{G_1^{\downarrow\downarrow}G_2^{\bar{s},\bar{s}}}{G_1^{\downarrow\downarrow} + G_2^{\bar{s},\bar{s}}} \right] V \vec{m}, \end{cases} \quad (2.15)$$

onde $s = \uparrow$ para a configuração paralela e $s = \downarrow$ para a anti-paralela.

Das expressões acima podemos perceber que existem dois circuitos equivalentes para as configurações paralelas e anti-paralelas, os quais são mostrados na fig. 2.2a e 2.2b, respectivamente. Nos mesmos, existem dois canais que transmitem elétrons com spin para “acima” e para “abaixo”, de maneira independente. Desse fato provêm a denominação de *modelo de dois canais*. A corrente de carga é dada pela soma das correntes em ambos os canais, enquanto que a corrente de spin coincide com a diferença. Na fig. 2.2c representamos o que acontece com o fator de preenchimento no nó a temperatura nula. A densidade de estado independe da direção do spin porque o nó representa a camada metálica normal, no entanto existe um desequilíbrio entre os potenciais químicos dos elétrons com spins com orientações opostas, o que dá lugar a uma acumulação de spin. Este desequilíbrio dividido pela carga do elétron coincide com a diferença de potencial $V_2^{\uparrow} - V_2^{\downarrow}$ entre os dois pontos pretos representados para cada canal dos circuitos da fig. 2.2. Note-se que no caso de conectores simétricos, essa diferença de potencial se anula para a configuração paralela, e é não nula quando as magnetizações são anti-paralelas.

2.3.3 Configurações não colineares

Consideremos agora que existe um ângulo θ diferente de zero e 180° entre as duas magnetizações. De maneira geral, $\vec{f}_2$ terá uma componente perpendicular às magnetizações, que está relacionada com a corrente de spin absorvida pela camada, *i.e.* o torque de spin.

Para decompor em componentes o sistema de equações (2.13) devemos escolher um sistema de coordenadas. Por conveniência escolheremos um sistema cartesiano definido pela base ortonormal:

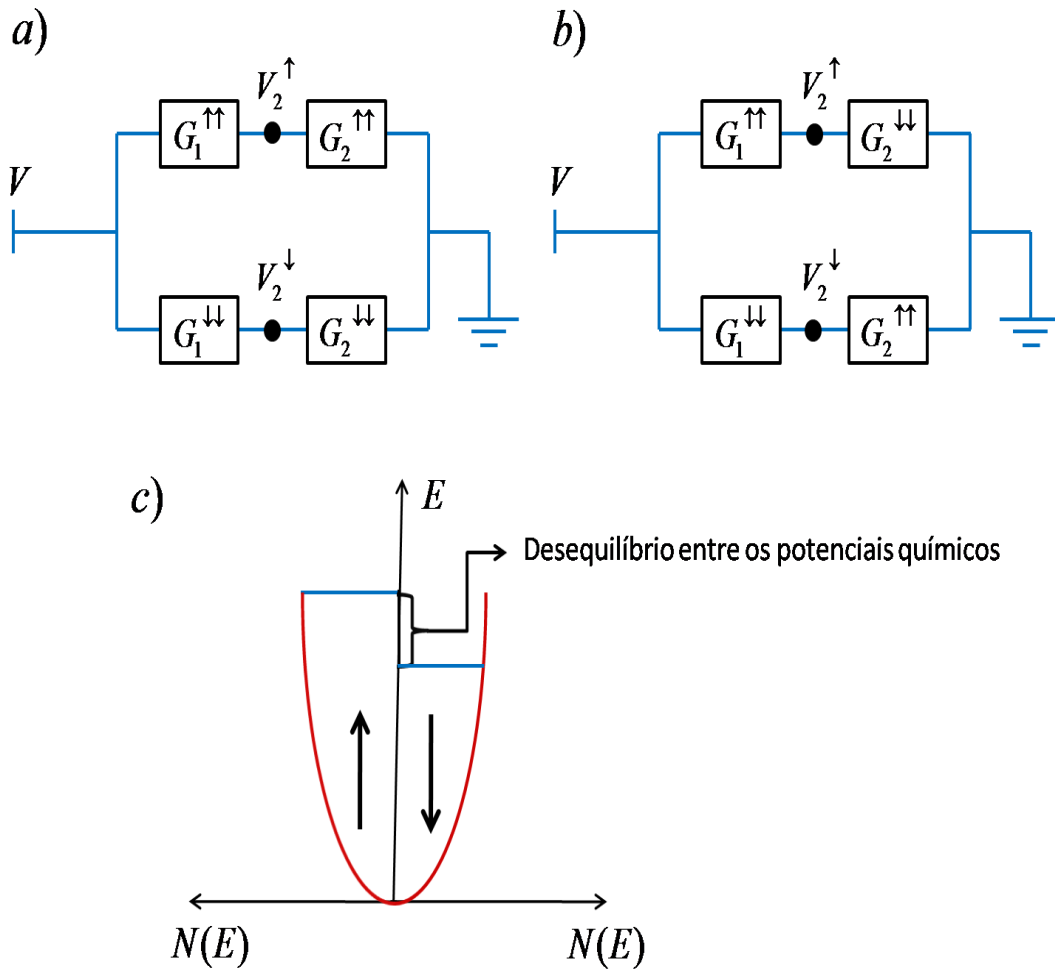


Figura 2.2 Circuitos equivalentes para a válvula com magnetizações a) paralelas e b) anti-paralelas. c) Densidade de estados no metal normal e desequilíbrio entre os potenciais químicos para elétrons com spin com orientações opostas.

$$\begin{cases} \vec{e}_1 = \vec{m}_1, \\ \vec{e}_2 = \frac{1}{\sin \theta} \vec{m}_2 \times \vec{m}_1, \\ \vec{e}_3 = \frac{1}{\sin \theta} \vec{m}_1 \times (\vec{m}_2 \times \vec{m}_1). \end{cases} \quad (2.16)$$

A corrente flui na direção de $\vec{e}_2$. Expressando a acumulação de spin como $\vec{f}_2 = \sum_{i=1}^3 f_2^i \vec{e}_i$ e levando em conta que $\vec{m}_2 = \cos \theta \vec{e}_1 + \sin \theta \vec{e}_3$, o sistema (2.13) fica:

$$\begin{cases} (G_1 + G_2) f_2^0 + (G_1 P_1 + G_2 P_2 \cos \theta) f_2^1 + G_2 P_2 \sin \theta f_2^3 = G_1 f_1^0 + G_2 f_3^0, \\ G_2 \eta_2'' \sin \theta f_2^1 + (G_1 \eta_1' + G_2 \eta_2') f_2^2 - (G_1 \eta_1'' + G_2 \eta_2'' \cos \theta) f_2^3 = 0, \\ G_2 P_2 \sin \theta f_2^0 + G_2 (1 - \eta_2') \sin \theta \cos \theta f_2^1 + (G_1 \eta_1'' + G_2 \eta_2'' \cos \theta) f_2^2 + \\ [G_1 \eta_1' + G_2 (\sin^2 \theta + \eta_2' \cos^2 \theta)] f_2^3 = G_2 P_2 \sin \theta f_2^2, \\ (G_1 P_1 + G_2 P_2 \cos \theta) f_2^0 + [G_1 + G_2 (\cos^2 \theta + \eta_2' \sin^2 \theta)] f_2^1 + \\ G_2 (1 - \eta_2') \sin \theta \cos \theta f_2^3 - G_2 \eta_2'' \sin \theta f_2^2 = G_1 P_1 f_1^0 + G_2 P_2 \cos \theta f_2^0. \end{cases} \quad (2.17)$$

Agora resta apenas resolver o sistema e seguir o mesmo procedimento usado no caso colinear. Quando os tensores de cada conector são diferentes, as expressões para corrente de carga e de spin são extensas e pouco instrutivas. Por esta razão não serão apresentadas aqui. Para o caso simétrico chega-se à seguinte fórmula para a corrente de carga:

$$i_C = \frac{G}{2} \left[1 - P^2 \frac{\eta' \tan^2(\theta/2)}{|\eta|^2 + \eta' \tan^2(\theta/2)} \right] V, \quad (2.18)$$

onde $\eta = \eta' + i\eta''$ e omitimos o índice do conector nos parâmetros pois nos referimos ao caso simétrico. Por sua parte, a corrente de spin pode ser representada como:

$$\vec{i}_S = i_S^{\parallel} \vec{e}_1 + i_{S,1}^{\perp} \vec{e}_2 + i_{S,2}^{\perp} \vec{e}_3. \quad (2.19)$$

O primeiro termo define a corrente de spin paralela à magnetização $\vec{m}_1$ da primeira camada, enquanto que os dois últimos determinam o torque $\vec{\tau}$ aplicado à mesma camada. Para o sistema de válvula de spin com conectores simétricos as componentes da corrente de spin são dadas por:

$$\begin{cases} i_S^{\parallel} = \frac{GPV}{2} \frac{|\eta|^2}{|\eta|^2 + \eta' \tan^2(\theta/2)}, \\ i_{S,1}^{\perp} = 0, \\ i_{S,2}^{\perp} = \frac{GPV}{2} \frac{|\eta|^2 \tan(\theta/2)}{|\eta|^2 + \eta' \tan^2(\theta/2)}. \end{cases} \quad (2.20)$$

A componente do torque $i_{S,1}^{\perp}$ é nula, independentemente do valor de η'' . Quando $\eta'' = 0$, a expressão para $i_{S,2}^{\perp}$ reproduz o resultado apresentado na ref. [23]. Algo diferente acontece para a válvula assimétrica. Nesse caso a componente $i_{S,1}^{\perp}$ anula-se apenas se $\eta_1'' = \eta_2'' = 0$. Considerar aproximadamente zero o valor da parte imaginária da condutância de mistura é completamente plausível com os resultados para interfaces metálicas encontrados a partir de primeiros princípios [42, 23].

Vejamos o comportamento de alguns dos observáveis calculados quando variamos o ângulo entre as magnetizações. De agora em diante consideraremos $\eta_1'' = \eta_2'' = 0$. Na fig. 2.3a e 2.3b representamos a dependência angular da condutância total do sistema G^T em unidades de e^2/h e do módulo do torque τ aplicado à camada F_1 em unidades de Ve^2/h , respectivamente. Em ambos os gráficos plotamos os observáveis para três valores da polarização P , sendo estes iguais a 0.4, 0.5 e 0.6 (a polarização do Fe é aproximadamente 0.4). Consideramos $G = 100$ e $\eta' = 2$. Com o incremento de P a injeção e detecção de spin no nó é mais eficiente, sendo que o módulo da acumulação de spin tende a crescer quanto maior for a polarização. Como foi discutido no caso colinear, quando os conectores são simétricos a acumulação de spin se anula na configuração paralela, de maneira que para um ângulo arbitrário a projeção do vetor $\vec{f}_2$ nas direções de magnetização variará desde zero quando as magnetizações são paralelas até um valor máximo (ou mínimo) quando são anti-paralelas. Como consequência, segundo a eq. (2.9), existirá um aumento do intervalo de variação (janela) da magnetoresistência angular para polarizações maiores. O torque, por sua vez, anula-se quando as configurações são paralelas, como esperado. Entre os ângulos 0° e 180° a componente da corrente de spin perpendicular à magnetização da camada F_1 têm um máximo, e entre 180° e 360° há um mínimo, o qual provoca segundo a eq. (2.10) os extremos do torque. Similar à componente paralela, a perpendicular também cresce com a polarização, implicando um aumento do torque. Note que a condutância tem um comportamento totalmente monotônico em função do ângulo no intervalo $0^\circ < \theta < 180^\circ$, e o torque muda de sinal só quando o ângulo $\theta = 180^\circ$.

Um efeito interessante aparece quando as camadas ferromagnéticas são assimétricas. Para polarizações diferentes a condutância pode alcançar um máximo numa configuração que não é a paralela, *i.e.* deixa de ser monotônica com respeito ao ângulo. Lembremos que da fig. 2.2 podemos inferir que a acumulação de spin quando $\theta = 0^\circ$ é nula só se os conectores são simétricos, quando as polarizações são diferentes esse valor é finito, mas não é um extremo. Na medida em que o ângulo aumenta a componente paralela $\vec{f}_2 \cdot \vec{m}_1$ passa por dois mínimos e um máximo para $\theta = 180^\circ$, enquanto que a perpendicular anula-se três vezes. Isto se reflete qualitativamente na não monotonicidade da condutância e nas varias mudanças de sinal do torque (representadas por valores nulos) na fig. 2.4. Nos

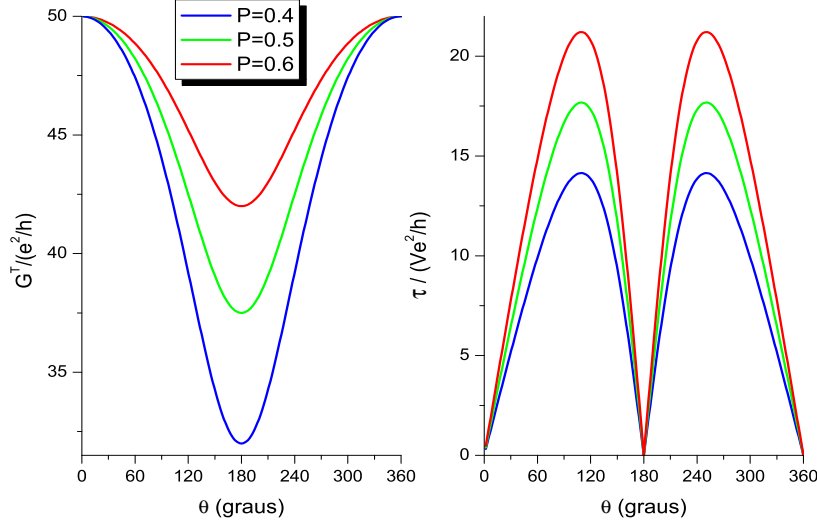


Figura 2.3 Dependência angular da condutância (painel esquerdo) e do torque aplicado à camada F_1 (painel direito), num sistema de válvula de spin com conectores simétricos, para diferentes valores de polarização P .

gráficos ali representados fixamos o valor $P_1 = 0.9$ e escolhemos valores de P_2 iguais a 0.6, 0.3 e 0.1. Este fenômeno foi descrito na ref. [43].

2.4 CADEIA DE MULTI-CAMADAS FNF...NF

Para uma aplicação nova da teoria de circuitos, analisemos agora um sistema de multi-camadas com estrutura pilar. As características exigidas das camadas ferromagnéticas e das normais serão as mesmas que no caso da válvula de spin. O circuito equivalente para um sistema com N_c camadas magnéticas está representado na figura 2.5. Devemos notar uma diferença essencial em relação ao exemplo da válvula. Na hora de fazer uma redução de parâmetros a partir da fórmula geral para a corrente no j -ésimo conector, não podemos usar o fato de que um dos nós adjacentes está em equilíbrio local, como foi feito anteriormente. Isto leva à introdução de um novo parâmetro na fórmula de corrente. Partindo da eq. (2.4) aplicada ao conector j obtemos

$$\hat{I}_j = \sum_s \frac{1}{e} \left[G_j^{s,s} \hat{u}_j^s (\hat{f}_j - \hat{f}_{j+1}) \hat{u}_j^s - G_j^{s,\bar{s}} \hat{u}_j^s \hat{f}_{j+1} \hat{u}_j^{\bar{s}} + G_{j,t}^{s,\bar{s}} \hat{u}_j^s \hat{f}_j \hat{u}_j^{\bar{s}} \right], \quad (2.21)$$

onde aparece o novo parâmetro complexo:

$$G_{j,t}^{s,\bar{s}} = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} (t')_{j,nm}^s (t')_{j,mn}^{\bar{s}}. \quad (2.22)$$

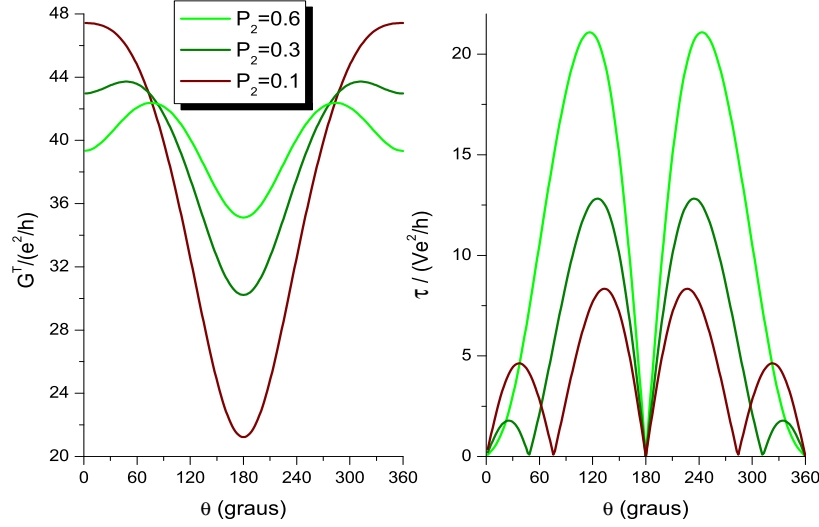


Figura 2.4 Dependência angular da condutância (painel esquerdo) e do torque aplicado à camada F_1 (painel direito), num sistema de válvula de spin com conectores assimétricos, fixando o valor da polarização $P_1 = 0.9$ e tomando vários valores para P_2 .

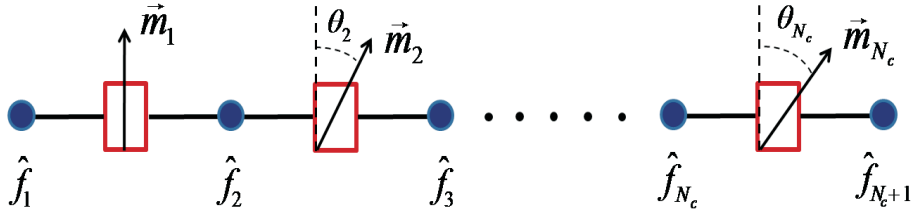


Figura 2.5 Circuito equivalente para a cadeia de multi-camadas.

Contudo, similarmente ao que ocorre com a parte imaginária da condutância de mistura em interfaces metálicas, cálculos a partir de primeiros princípios mostram que tanto a parte real quanto a imaginária do parâmetro $G_{j,t}^{s,\bar{s}}$ se anulam para camadas de espesura maior do que umas poucas camadas atômicas [23]. Por essa razão, consideraremos daqui em diante $\text{Im}G_j^{s,\bar{s}} = G_{j,t}^{s,\bar{s}} = 0$. Também assumiremos por simplicidade que todas as camadas magnéticas estão caracterizadas pelo mesmo tensor de condutância.

Fazendo as simplificações descritas acima, as matrizes de corrente no $(j+1)$ -ésimo nó dos conectores adjacentes são dadas por:

$$\begin{cases} \hat{I}_j = \frac{1}{e} \sum_{s,s'} G^{s,s'} \hat{u}_j^s (\delta_{s,s'} \hat{f}_j - \hat{f}_{j+1}) \hat{u}_j^{s'}, \\ \hat{I}_{j+1} = \frac{1}{e} \sum_{s,s'} G^{s,s'} \hat{u}_{j+1}^s (\delta_{s,s'} \hat{f}_{j+2} - \hat{f}_{j+1}) \hat{u}_{j+1}^{s'}. \end{cases} \quad (2.23)$$

Aplicando as leis de conservação $\hat{I}_j = \hat{I}_{j+1}$ obtemos o seguinte sistema de equações lineares, que relaciona a acumulação de carga e de spin no nó $(j+1)$ às mesmas quantidades nos nós adjacentes:

$$\begin{cases} 2f_{j+1}^0 - f_{j+2}^0 - f_j^0 = P \left[(\vec{f}_{j+2} - \vec{f}_{j+1}) \cdot \vec{m}_{j+1} - (\vec{f}_{j+1} - \vec{f}_j) \cdot \vec{m}_j \right], \\ \eta' \left[2\vec{f}_{j+1} - \vec{f}_{j+1} \cdot (\vec{m}_{j+1}\vec{m}_{j+1} + \vec{m}_j\vec{m}_j) \right] = (\vec{f}_{j+2} - \vec{f}_{j+1}) \cdot \vec{m}_{j+1}\vec{m}_{j+1} - \\ (\vec{f}_{j+1} - \vec{f}_j) \cdot \vec{m}_j\vec{m}_j + P \left[(f_{j+2}^0 - f_{j+1}^0) \vec{m}_{j+1} - (f_{j+1}^0 - f_j^0) \vec{m}_j \right], \end{cases} \quad (2.24)$$

onde j vai de 1 até $N_c - 1$. O sistema acima pode ser resolvido numericamente para uma dada configuração de magnetização. Uma vez achada a solução, a condutância da cadeia e o torque aplicado sobre a j -ésima camada podem ser calculados através das fórmulas:

$$\begin{cases} G^T = G \left[(f_{j+1}^0 - f_j^0) + P(\vec{f}_{j+1} - \vec{f}_j) \cdot \vec{m}_j \right], \\ \vec{\tau}_j = -G \eta' \left(\vec{f}_j - \vec{f}_j \cdot \vec{m}_j \vec{m}_j \right). \end{cases} \quad (2.25)$$

2.4.1 Configuração de magnetizações helicoidal

Para concretizar, vamos estudar uma cadeia com configuração de magnetizações helicoidal. Tomando como referência um sistema cartesiano de coordenadas, e supondo que a cadeia cresce na direção x , as direções de magnetizações serão parametrizadas como:

$$\vec{m}_j = \left[0, \sin \left(\frac{2\pi N_v(j-1)}{N_c - 1} \right), \cos \left(\frac{2\pi N_v(j-1)}{N_c - 1} \right) \right], \quad (2.26)$$

onde introduzimos o parâmetro N_v representando o número de voltas da configuração, que pode variar entre 0 e $N_c - 1$, enquanto que j varia de 1 a N_c . A diferença angular entre duas magnetizações consecutivas é dada por $\delta\theta = 2\pi N_v/(N_c - 1)$.

Na fig. 2.6 apresentamos, para cadeias com diferente números de conectores, os resultados para a condutância total e o torque aplicado sobre a primeira camada magnética, quando variamos $\delta\theta$ entre 0° e 360° (ou equivalentemente N_v entre 1 e $N_c - 1$). Fixamos a polarização $P = 0.5$ e $\eta' = 2$. A condutância de cada camada magnética para a mesma cadeia foi reescalada de modo que todas as cadeias têm a mesma condutância total na configuração paralela. Desta forma poderemos comparar qualitativamente cadeias de diferentes tamanhos. Para $N_c = 2$ escolhemos $G = 200 G_0$. Na figura 2.6, tomamos $N_c = 2, 5, 10, 20, 30$ e 100 . Note como tanto para a condutância quanto para o torque, as curvas a partir de $N_c = 10$ quase colapsam no limite em que $N_c = 100$. Isto significa que na medida em que se aumenta o tamanho da cadeia, os *efeitos de tamanho finito* começam a ser desprezíveis, de maneira que no limite $N_c \gg 1$, os observáveis estudados

não dependem qualitativamente do comprimento da cadeia (2.24). Consequentemente, a magnetoresistência que pode ser definida como:

$$GMR = [G^T(\delta\theta = 0^\circ) - G^T(\delta\theta = 180^\circ)] / G^T(\delta\theta = 0^\circ), \quad (2.27)$$

obedece uma lei invariante de escala quando o número de conectores não é muito pequeno, *i.e.* $GMR \approx f^*(P, \eta')$.

Vejamos agora como se comporta a cadeia quando usada como um “conector efetivo”, em função do número de voltas da sua configuração helicoidal. Para isto construímos uma estrutura de multicamadas com 15 conectores, escolhendo $G = 1500 G_0$ e $\eta' = 2$. Os últimos 14 conectores farão parte do conector efetivo e terão uma configuração helicoidal com um número de voltas fixo, enquanto que a magnetização do primeiro conector será girada de tal sorte que o ângulo entre o primeiro e o segundo conector $\delta\theta_1$ variará entre 0° e 360° .

Os gráficos para condutância do dispositivo todo e o torque aplicado sobre a primeira camada ferromagnética são apresentados na fig. 2.7. Duas situações são consideradas: $N_v = 1$ nos painéis esquerdos e $N_v = 6$ nos painéis direitos. Como pode ser observado na figura, existe uma transição para um número de voltas intermediário na qual a condutância deixa de ser monotônica em relação ao ângulo e o torque anula-se três vezes fora da configuração paralela, similar ao que acontece na válvula com polarizações assimétricas. O efeito líquido de variar o número de voltas consiste em mudar o tensor de condutância efetivo que caracteriza os últimos 14 conectores. Em particular, pode-se perceber que a polarização efetiva diminui muito, pois a janela de magnetoresistência angular decresce uma ordem de grandeza.

2.5 SUMÁRIO

Neste capítulo apresentamos brevemente as generalidades da teoria quântica de circuitos para sistemas híbridos normal-ferromagnético. Explicamos os inconvenientes técnicos que aparecem quando se deseja preservar a estrutura de Keldysh no formalismo, como é feito na versão inicial da teoria para sistemas híbridos NS. Mostramos como aplicar a teoria num sistema FNF, e analisamos observáveis como a condutância e o torque de spin quando as magnetizações das camadas magnéticas são colineares e não colineares. Também exploramos algumas propriedades de um sistema de multicamadas, escolhendo a configuração das magnetizações das camadas ferromagnéticas de forma helicoidal. Analisamos a condutância e o torque para cadeias com diferentes comprimentos, fixando a configuração das magnetizações. Por último, estudamos o comportamento da cadeia como um conector efetivo.

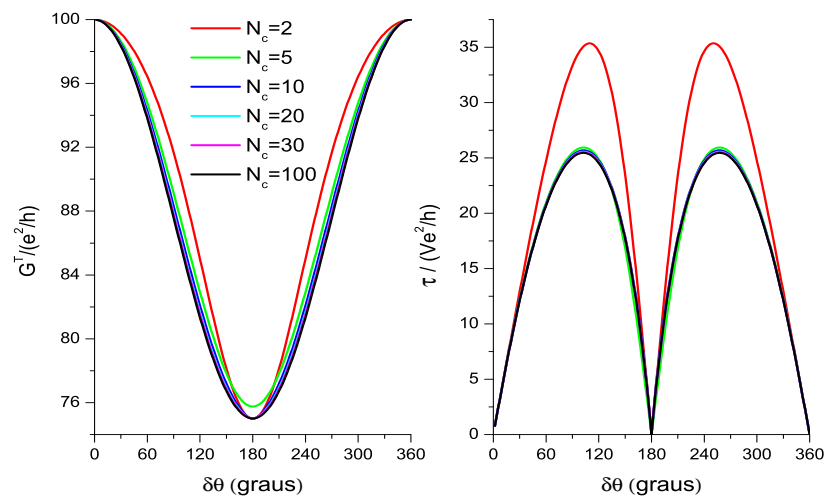


Figura 2.6 Variação da condutância (painel esquerdo) e o torque aplicado à primeira camada (painel direito) com relação ao ângulo relativo entre as magnetizações de duas camadas ferromagnéticas adjacentes, para a cadeia com vários conectores simétricos. A condutância G dos conectores têm sido escolhida para todas as cadeias ter a mesma condutância na configuração paralela. Para $N_c = 2$ escolhemos $G = 200 G_0$.

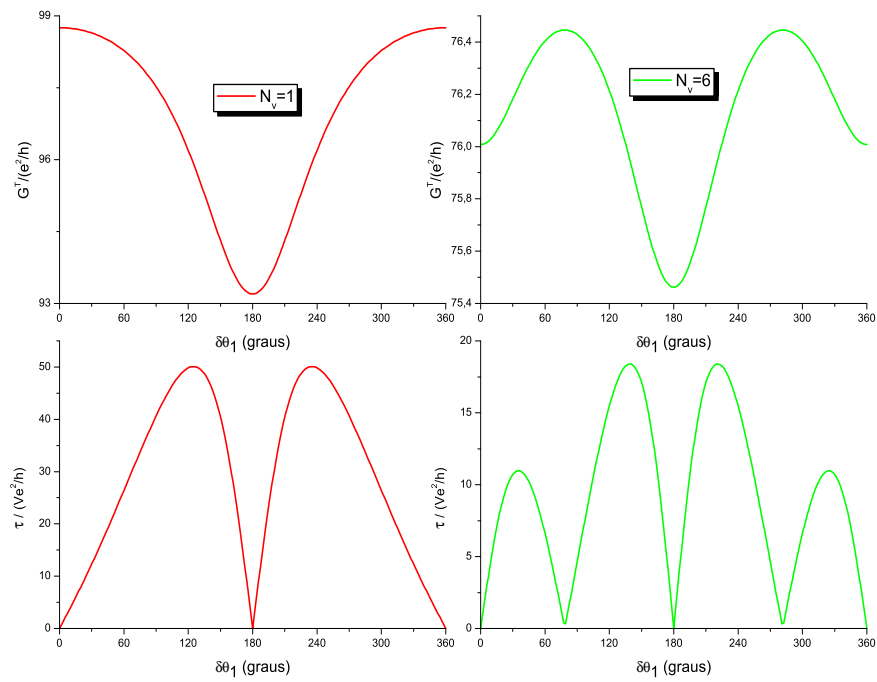


Figura 2.7 Comportamento da condutância e o torque aplicado à primeira camada em função da variação do ângulo entre a primeira e segunda camada, numa cadeia com 15 camadas magnéticas. Mantemos as 14 últimas camadas com uma configuração helicoidal fixa definida pelo número de voltas N_v .

GENERALIZAÇÃO DA PARAMETRIZAÇÃO DE ESTUBE

3.1 INTRODUÇÃO

A teoria de matrizes aleatórias (**TMA**) descreve as propriedades estatísticas de diferentes classes de conjuntos de matrizes. Estes conjuntos são denominados ensembles e distinguem-se mutuamente por suas propriedades de simetria, e pela forma como são construídos. A principal razão pela qual se modela um sistema físico através da TMA, é que existem sistemas muito complexos para os quais construir um hamiltoniano a partir de primeiros princípios é praticamente impossível (e indesejável) pela grande quantidade de detalhes microscópicos que este possui. Ao invés disso, o sistema é caracterizado por suas simetrias fundamentais, que por sua vez são usadas para identificar um ensemble de matrizes aleatórias. A partir da distribuição de probabilidade das matrizes dentro do ensemble, podem ser calculadas funções de correlação dos seus autovalores, autovetores ou dos próprios elementos de matriz [44, 45]. Estas quantidades, por sua vez, permitem a obtenção de vários observáveis físicos [7].

Uma cavidade caótica quântica é um exemplo típico da classe de sistemas mencionados acima. Sua dinâmica é tão complexa que seu hamiltoniano pode ser substituído por um membro de um ensemble de matrizes aleatórias, conhecido como ensemble gaussiano [46]. Existem três classes de ensembles gaussianos, caracterizadas por diferentes simetrias. Quando o sistema possui simetria de reversão temporal e de rotação de spin o ensemble é denominado ortogonal e o índice de Dyson, que é usado para identificar os ensembles, é $\beta = 1$ ³. Se o sistema possui simetria de reversão temporal, mas a simetria de rotação de spin é quebrada, o ensemble é o simplético e $\beta = 4$. No caso em que não existe simetria de reversão temporal temos $\beta = 2$ e o ensemble é denominado unitário.

Quando a cavidade caótica está aberta e é conectada a dois reservatórios normais, as suas propriedades de transporte podem ser descritas pela matriz de espalhamento do sistema. Se os contatos forem ideais, a matriz de espalhamento pertence a um ensemble circular [7]. Os ensembles circulares, diferentemente dos gaussianos, não são construídos a partir da distribuição estatística dos elementos de matriz, mas através da definição de uma medida invariante sob transformações do grupo unitário, denominada medida de Haar [44]. Uma característica dos ensembles circulares é que suas matrizes estão distribuídas de maneira uniforme no ensemble. Se os contatos são não ideais, as matrizes de espalhamento pertencem a ensembles denominados circulares generalizados, onde a distribuição das matrizes é dada pelo núcleo de Poisson [45].

³O índice de Dyson coincide com o número de parâmetros livres dos elementos matriciais, e é comumente representado através da letra grega β .

Ainda mais complexos são os sistemas representados por um circuito quântico, cuja definição introduzimos no capítulo anterior no contexto da teoria de circuitos. Para um circuito com reservatórios normais, existem na literatura duas teorias capazes de caracterizar vários de seus observáveis. A primeira foi apresentada por Campagnano *et al.* através do formalismo de funções de Green de Keldysh [48]. A mesma permite em princípio acessar as correções quânticas de qualquer cumulante de carga transmitida, assim como as variâncias dos mesmos. Ela também não se limita a reservatórios normais, nem a ensembles puros como os mencionados acima. Podem ser levados em conta fenômenos como interação spin-órbita e campos magnéticos, que permitem o estudo do crossover entre ensembles puros [49]. A segunda teoria foi elaborada por Kupferschmidt *et al.* para um circuito quântico acoplado a dois reservatórios normais, e usa o formalismo de matrizes aleatórias [8]. Esta teoria tem como foco a correção de localização fraca da condutância, no entanto considera a interação elétron-elétron e a dependência da localização com a temperatura.

As propriedades de transporte de um circuito quântico constituído por nós e conectores são caracterizadas por sua matriz de espalhamento, que pode ser construída a partir das matrizes de espalhamento de cada elemento do sistema. As matrizes de espalhamento dos conectores são em princípio conhecidas e são responsáveis pela condutância do sistema. Em contraposição a isto, nos nós ocorre a mistura dos modos de transmissão, e a função de onda dos elétrons adquire fases que são incontornáveis experimentalmente. Esta mistura estatística pode ser modelada na TMA assinando a cada nó uma matriz que pertence a um ensemble circular. Por tal motivo, a construção da matriz de espalhamento do sistema carrega muita informação que é irrelevante, e que em outras teorias como a **TQC** é retirada *a priori*. De fato, este inconveniente técnico têm causado certa rejeição da TMA [1].

No presente capítulo consideraremos um circuito quântico com topologia arbitrária, sem levar em conta a dependência dos observáveis com relação à temperatura, interação elétron-elétron, campo magnético e interação spin-órbita. Mostraremos, no entanto, que a informação das matrizes de espalhamento dos constituintes do sistema pode ser reorganizada numa parametrização de estube de forma tal que a composição das mesmas deixa de ser um problema técnico essencial. Além do mais, tal reorganização permite importar os resultados obtidos através da técnica diagramática do caso de um único ponto quântico para a análise de um circuito de topologia arbitrária. Embora nos limitemos a um regime bastante particular, como indicado anteriormente, devemos salientar a possibilidade de inclusão no formalismo de fenômenos de interação dos elétrons com um campo magnético, interação spin-órbita e fenômenos de descoerência. Estes efeitos têm sido modelados para um ponto quântico através de um estube adjunto à cavidade [50, 51].

O capítulo é organizado da seguinte maneira. Na seção 3.2 apresentamos de forma resumida o método diagramático para fazer médias sobre ensembles circulares. Dedicamos a seção 3.3 a explicar em detalhes a parametrização de estube. A generalização de tal parametrização é feita na seção 3.4, onde explicamos cuidadosamente o caso de dois pontos, e logo apresentamos as regras para construir as matrizes da parametrização generalizada. A simbologia usada no método diagramático é redefinida na seção 3.5. Finalizamos com algumas aplicações do método na seção 3.6.

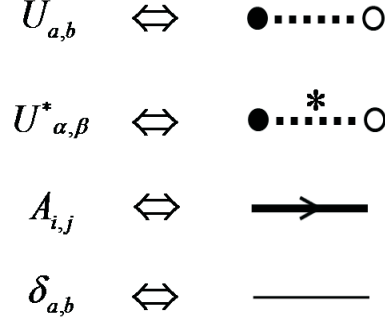


Figura 3.1 Simbologia introduzida na ref. [52] para o uso do método diagramático.

3.2 GENERALIDADES DO MÉTODO DIAGRAMÁTICO

Comumente, a principal utilidade dos métodos diagramáticos é construir e calcular os termos de uma série perturbativa, a partir do uso de certas regras estabelecidas pela teoria em questão. Para matrizes aleatórias que pertencem ao ensemble circular unitário (**ECU**), o objetivo central é fazer integrações do tipo

$$\langle f \rangle = \int dU f(U), \quad (3.1)$$

onde $U \in \mathbf{ECU}$, $f(U)$ é uma função polinomial de U , dU é a medida de Haar e usa-se a notação $\langle \dots \rangle$ para denotar a média feita sobre o ensemble. Cálculos do tipo mostrado acima podem ser feitos sistematicamente devido ao fato de que o valor médio do produto dos elementos matriciais de U é dado por

$$\langle U_{a_1, b_1} \dots U_{a_m, b_m} U_{\alpha_1, \beta_1}^* \dots U_{\alpha_n, \beta_n}^* \rangle = \delta_{n,m} \sum_{P, P'} V_{P, P'} \prod_{j=1}^n \delta_{a_j, \alpha_{P(j)}} \delta_{b_j, \beta_{P'(j)}}. \quad (3.2)$$

O conjunto dos coeficientes $\alpha_{P_1}, \dots, \alpha_{P_n}$ é a permutação P do conjunto $a_1, \dots, a_n$, e similarmente $\beta_{P'_1}, \dots, \beta_{P'_n}$ é a permutação P' do conjunto $b_1, \dots, b_n$. Note que a média escrita acima é diferente de zero apenas quando o número de elementos conjugados é igual ao número de não conjugados. Os coeficientes $V_{P, P'}$ dependem unicamente dos comprimentos $c_1, \dots, c_k$ dos ciclos da permutação $P^{-1}P'$, onde $\sum_{j=1}^k c_j = n$. Analogamente aos coeficientes $V_{c_1, \dots, c_k}$ que determinam os momentos (3.2), podem ser definidos coeficientes $W_{c_1, \dots, c_k}$ que determinam os cumulantes dos elementos de U . Pode ser mostrado que quando o posto das matrizes aleatórias é muito maior do que um ($N \gg 1$), o termo dominante dos pesos $V_{c_1, \dots, c_k}$ é dado por $\prod_{j=1}^k W_{c_j}$. Ambos os coeficientes acham-se tabulados para $n \leq 5$ na ref. [52].

O método diagramático permite gerar de uma maneira gráfica os termos que surgem devido às contrações ao realizar médias como a mostrada na eq. (3.2). Para isto definem-se quatro tipos de símbolos básicos representados na fig. 3.1. As linhas tracejadas unidas a pontos pretos e brancos com e sem o símbolo de asterisco representam os elementos de matrizes aleatórias conjugadas e não conjugadas respectivamente. Por sua vez, as linhas

sólidas grossas e dirigidas representam matrizes não aleatórias (representadas de maneira genérica na figura pela letra A), enquanto que os deltas de Kronecker são simbolizados por linhas sólidas finas não dirigidas. Esclarecida a simbologia, temos as seguintes regras diagramáticas [52]:

1. Represente a função sobre a qual se fará a média usando a simbologia mostrada na fig. 3.1.
2. Desenhe linhas finas unindo pontos pretos que correspondem a linhas tracejadas com e sem asterisco. Faça o mesmo com os pontos brancos. Certifique-se de gerar todas as topologias possíveis para obter assim todos os diagramas.
3. A cada laço fechado constituído por linhas sólidas finas e linhas sólidas dirigidas de forma alternada (denominado laço-T) em cada diagrama, corresponde o traço do produto das matrizes não aleatórias presentes no laço. Se a direção escolhida para percorrer o laço é oposta a alguma linha sólida dirigida, então a matriz correspondente deve ser transposta no argumento do traço.
4. A cada laço fechado constituído por linhas sólidas finas e linhas tracejadas alternadamente (denominado laço-U) em cada diagrama, corresponde um ciclo de tamanho c_k que coincide com a metade das linhas tracejadas incluídas no laço. O conjunto dos k laços-U determinam o peso $V_{c_1, \dots, c_k}$ do diagrama.

Devemos enfatizar que as regras enunciadas acima são exatas, *i.e.* valem para qualquer valor de N . No entanto, no regime semiclássico pode-se estimar quais são os diagramas dominantes usando o comportamento assintótico dos pesos e considerando que cada traço é de ordem N . Conclui-se que de todas as topologias possíveis, quanto maior o número total de laços maior será a ordem do diagrama.

Quando as matrizes envolvidas no cálculo pertencem ao ensemble circular ortogonal (**ECO**), a segunda regra deve ser modificada da seguinte forma:

- Desenhe linhas finas unindo pontos que correspondem a linhas tracejadas com e sem asterisco. Certifique-se de cobrir todas as topologias possíveis para gerar assim todos os diagramas.

O ensemble circular simplético (**ECS**) não será levado em conta aqui. Ilustremos agora o método diagramático com um exemplo muito simples. Vamos calcular a condutância de um ponto caótico acoplado a reservatórios normais a temperatura nula, através de contatos ideais. Vamos supor que em cada contato existem N_i canais abertos com $i \in \{a, b\}$. As letras a e b denotam os dois contatos. Segundo a fórmula de Landauer-Büttiker a condutância é dada por

$$G = G_0 \operatorname{Tr} (t'(t')^\dagger), \quad (3.3)$$

onde t' é o bloco de transmissão da matriz de espalhamento do ponto, que por sua vez pertence a um ensemble circular determinado pelos vínculos de simetria do ponto e

$G_0 = 2e^2/h$. A estrutura da matriz de espalhamento U na direção de propagação é dada por

$$U = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

As dimensões de cada bloco da estrutura de direção de propagação são dadas por $\dim(r) = N_a \times N_a$, $\dim(r') = N_b \times N_b$, $\dim(t) = N_a \times N_b$ e $\dim(t') = N_b \times N_a$. A condutância pode ser escrita como

$$G = G_0 \text{Tr} (C_a U C_b U^\dagger), \quad (3.5)$$

onde $(C_a)_{i,j} = 1$ se $i = j \leq N_a$ e zero em qualquer outro caso, enquanto que $C_b = I - C_a$, sendo I a matriz identidade de dimensão $N = N_a + N_b$. A função G/G_0 é representada simbolicamente como mostrado na fig. 3.2a (regra 1). Aplicando então a regra 2 obtemos os dois diagramas mostrados na fig. 3.2b. Se o ensemble for unitário, obtemos apenas o primeiro diagrama da figura, enquanto que para um ensemble ortogonal devemos acrescentar o segundo diagrama (cruzado) unindo pontos brancos e pontos pretos. Das regras 3 e 4 vemos que no primeiro diagrama existem um laço-U e dois laços-T, enquanto que no segundo existem um laço-U e um laço-T. Note que o produto $C_a C_b = 0$, e portanto o segundo diagrama se anula. Substituindo os traços no primeiro diagrama e sabendo que $V_1 = 1/N$ para o caso unitário e $V_1 = 1/(N + 1)$ para o caso ortogonal, obtemos que

$$\langle G \rangle = G_0 \frac{N_a N_b}{N_a + N_b + 2 - \beta}, \quad (3.6)$$

com $\beta = 1$ para o caso ortogonal e $\beta = 2$ para o caso unitário. Este resultado é exato. No limite semiclássico, quando $N_a, N_b \gg 1$, podemos expandir o resultado acima da seguinte forma:

$$\langle G \rangle / G_0 = \frac{N_a N_b}{N_a + N_b} + (2 - \beta) \frac{N_a N_b}{(N_a + N_b)^2} + \dots \quad (3.7)$$

O primeiro termo, que é da ordem do número de canais abertos em cada guia e domina a série neste regime, é o resultado da lei de Ohm. O segundo termo é da ordem da unidade e é o termo de localização fraca da condutância.

3.3 PARAMETRIZAÇÃO DE ESTUBE

Um *estube* é definido na engenharia de comunicação como um pequeno dispositivo eletrônico que se acopla a um guia de onda ou a uma antena, a fim de alterar as suas características eletromagnéticas [53]. Por analogia, o termo tem sido usado em física mesoscópica para referir-se a algumas classes de modelos [47, 51]. Um exemplo típico é mostrado na fig. 3.3a, onde um guia está conectado a uma cavidade caótica (o estube) através de um conector. Para o problema de espalhamento estar bem definido, um guia auxiliar deve ser introduzido entre o estube e o conector. Vejamos agora como pode ser parametrizada a matriz de espalhamento do sistema todo, em termo das matrizes de espalhamento dos elementos constituintes.

onde I é a matriz identidade de dimensão N . Salientamos o fato de que a relação (3.10) é obtida sem fazer uso de informação alguma sobre a estrutura interna das matrizes de espalhamento, apenas usamos o fato de que elas são unitárias e que a matriz $(S_{\text{cav}}^\dagger - r')$ é inversível. Como no nosso exemplo consideramos que a cavidade está num regime caótico, sua matriz de espalhamento está distribuída uniformemente e portanto os modos de transmissão no guia são misturados de uma maneira uniforme. Essa mistura é neste caso, o efeito de acoplar o estube ao guia, em analogia com a sua utilidade no contexto da engenharia de comunicação.

É muito instrutivo também analisar como uma cavidade caótica multiterminal pode ser mapeada num modelo de estube. Isto é possível graças ao regime de caos, que implica a perda de memória de fase do elétron, quando este abandona a cavidade, com respeito ao guia pelo qual entrou. Portanto podemos justapor todos os terminais como mostrado na fig. 3.3b. A parametrização (3.10) pode então ser usada neste tipo de sistema. O preço a pagar é um aumento na dimensão das matrizes de espalhamento para introduzir uma nova estrutura devido ao índice dos terminais. Usemos o índice i para distinguir o número de canais abertos N_i no guia i , assim como para identificar as matrizes de espalhamento S_i de cada conector, dadas por:

$$S_i = \begin{pmatrix} r_i & t'_i \\ t_i & r'_i \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

A partir do mapeamento mostrado na fig. 3.3b percebe-se que se definirmos

$$\begin{Bmatrix} (\bar{S}_{\text{tot}})_{ij} \\ R_{ij} \\ T_{ij} \\ T'_{ij} \end{Bmatrix} = \delta_{ij} \times \begin{Bmatrix} r_i \\ r'_i \\ t_i \\ t'_i \end{Bmatrix}. \quad (3.12)$$

onde os índices i, j referem-se ao número do terminal, vale a relação

$$S_{\text{tot}} = \bar{S}_{\text{tot}} + T' (I - S_{\text{cav}} R)^{-1} S_{\text{cav}} T, \quad (3.13)$$

onde a dimensão de I e S_{cav} é $N \times N$, com $N = \sum_{i=1}^n N_i$. Note que enquanto as matrizes S_i contém apenas a informação da direção de propagação através do conector i , as matrizes (3.12) especificam esse mesmo tipo de informação no sistema todo. Mais claramente, as S_i referem-se à propagação entre um reservatório e a cavidade, o qual se descreve na sua estrutura interna através das letras r_i , t_i e o símbolo linha. As matrizes (3.12) por sua vez, contém a informação de propagação de um terminal para outro, especificada pelos blocos indexados com pares (i, j) .

3.3.1 Núcleo de Poisson

Um problema conhecido em teoria de variáveis complexas é encontrar uma função harmônica dentro do círculo de raio 1, dado seu valor na fronteira. Em eletrostática aparece a mesma situação matemática quando se deseja calcular o potencial eletrostático dentro de um disco, dadas as condições de fronteira tipo Dirichlet. A solução do problema pode ser

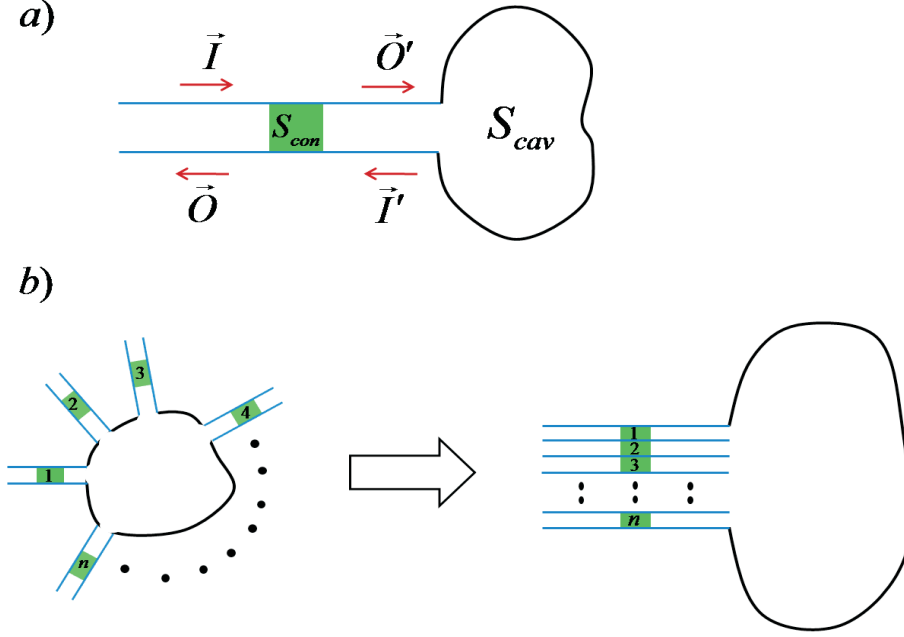


Figura 3.3 a) Modelo de estube para uma cavidade caótica acoplada a um terminal através de um contato. b) Mapeamento de uma cavidade caótica acoplada a n terminais num modelo de estube. Os pontos representam os guias intermediários até chegar ao n -ésimo.

expressa em forma integral, usando o *núcleo de Poisson*. Denominando de ϕ a função potencial e considerando o raio do disco igual a 1, temos que [54]

$$\phi(z) = \int_0^{2\pi} P(z, \theta) \phi(e^{i\theta}) d\theta, \quad (3.14)$$

onde z é uma variável do plano complexo com $|z| < 1$. O núcleo de Poisson é dado por

$$P(z, \theta) = \frac{(1 - |z|^2)}{2\pi |1 - z^* e^{i\theta}|^2}. \quad (3.15)$$

Para nosso sistema de estube surge uma extensão multidimensional do problema de Dirichlet no disco para $N > 1$. Dada uma função analítica das matrizes de espalhamento (e portanto unitárias) aleatórias $\Phi(S_{tot})$, gostaríamos de conhecer o valor da função avaliada na matriz sub-unitária $\bar{S}_{tot} = \langle S_{tot} \rangle$. Matematicamente, em analogia com a eq. (3.14) podemos escrever

$$\Phi(\bar{S}_{tot}) = \int \Phi(S_{tot}) d\mu_{S_{tot}} = \int \Phi(S_{tot}) P(S_{tot}, \bar{S}_{tot}) d\mu_{S_{cav}}, \quad (3.16)$$

onde $d\mu_{S_{tot}}$ é a medida invariante do ensemble de matrizes S_{tot} e $d\mu_{S_{cav}}$ é a medida de Haar do grupo unitário. Mostra-se que se S_{tot} está relacionada a S_{cav} através da parametrização de estube, e S_{cav} pertence a um ensemble circular, então o núcleo de Poisson multidimensional é dado por [47]

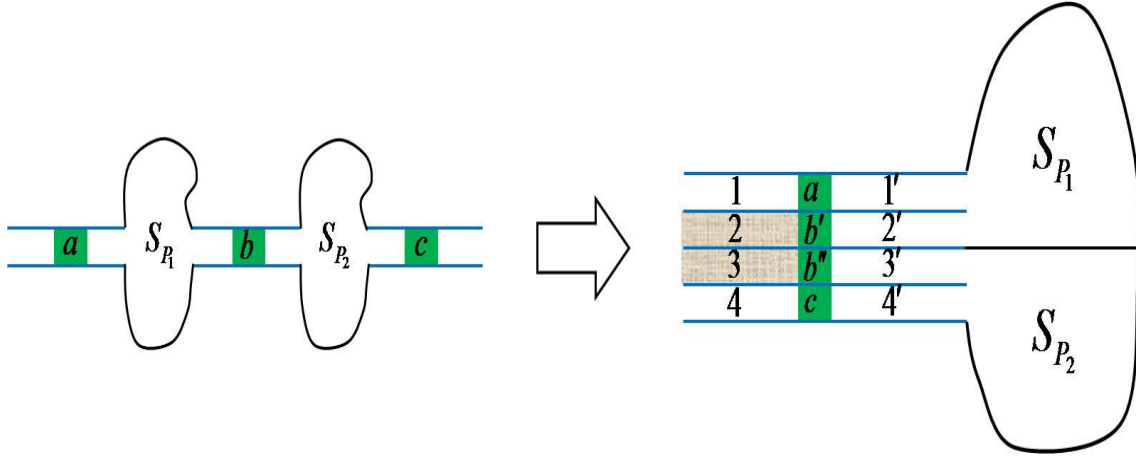


Figura 3.4 Mapeamento de dois pontos conectados em série num sistema de estube. Os guias de cor sombreada são fictícios.

$$P(S_{\text{tot}}, \bar{S}_{\text{tot}}) = V_{\beta}^{-1} \frac{\left[\det \left(I - \bar{S}_{\text{tot}} \bar{S}_{\text{tot}}^{\dagger} \right) \right]^{(\beta N + 2 - \beta)/2}}{\left[\det \left(I - S_{\text{tot}} \bar{S}_{\text{tot}}^{\dagger} \right) \right]^{(\beta N + 2 - \beta)}}, \quad (3.17)$$

onde $\bar{S}_{\text{tot}} = r_{\text{con}}$, V_{β} é um fator de normalização e β é o índice de Dyson do ensemble. Esta demonstração demanda que a matriz de espalhamento do conector (ou dos conectores) seja unitária e cumpra os vínculos de simetria que obedece a matriz de espalhamento da cavidade. Uma outra demonstração do mesmo resultado foi dada por Mello usando o princípio de máxima entropia [45].

3.4 GENERALIZAÇÃO DO MODELO DE ESTUBE

Na seção anterior mostramos que uma cavidade multiterminal pode ser modelada como um estube. Mas, será que se colocarmos outras cavidades no circuito quântico, poderemos usar a parametrização de estube para modelar a matriz de espalhamento de todo o sistema? Nesta seção mostraremos que é possível. O conteúdo da mesma foi inspirado na analogia entre um ponto quântico acoplado a reservatórios NS e dois pontos acoplados em série, apresentada na última seção do Capítulo 5. Por uma questão de conveniência, apresentaremos a generalização da parametrização de estube primeiro.

3.4.1 Dois pontos acoplados em série

Ao invés de tentar deduzir uma expressão para a matriz de espalhamento total, a partir de equações análogas à (3.9), seguiremos um “atalho gráfico”. Consideremos dois pontos “ P_1 ” e “ P_2 ” acoplados em série, cujas matrizes de espalhamento S_{P_1} e S_{P_2} pertencem a ensembles circulares, não necessariamente com mesmo β e podem ter dimensões diferentes também. Assumiremos que elas são estatisticamente independentes, o que baseia-se no

fato de que o caos quântico nas cavidades é independente. O contato “ b ” une os dois pontos enquanto que os contatos a e c unem os pontos P_1 e P_2 a reservatórios normais, respectivamente. As matrizes de espalhamento de cada contato são descritas por equações da forma (3.11).

Vamos construir agora um sistema equivalente ao mostrado na fig. 3.4a, fazendo um “desdobramento” do conector b em dois conectores, que chamaremos de b' e b'' . Os guias ideais 2 e 3 estão sombreados na figura, o que significa que neles não existem modos de propagação. Então os conectores especiais b' e b'' não transmitem do guia $2'$ para o 2 nem do $3'$ para o 3, mas além de reflexão do $2'$ para o $2'$ e do $3'$ para o $3'$, permitem processos de transmissão entre os guias $2'$ e $3'$, e vice-versa. Desta forma, podemos reorganizar a informação das matrizes $\bar{S}$, R' , T e T' da seguinte maneira:

$$\bar{S}_{\text{tot}} = \left(\begin{array}{cc|cc} r_a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_c \end{array} \right), \quad (3.18)$$

$$T^\alpha = \left(\begin{array}{cc|cc} t_a^\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_c^\alpha \end{array} \right), \quad (3.19)$$

onde α representa a presença ou a ausência do símbolo linha, e

$$R = \left(\begin{array}{cc|cc} r'_a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & r'_{b'} & t'_{b'} & 0 \\ \hline 0 & t'_{b''} & r'_{b''} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r'_c \end{array} \right). \quad (3.20)$$

A matriz da cavidade, por sua vez, é dada por

$$S_{\text{cav}} = \begin{pmatrix} S_{P_1} & 0 \\ 0 & S_{P_2} \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Para o mapa exato, devemos fazer $t'_{b'} = t_b$, $t'_{b''} = t'_b$, $r'_{b'} = r_b$ e $r'_{b''} = r'_b$.

Nas matrizes das eqs. (3.18-3.20), o elemento (i, j) representa a matriz de transmissão (ou de reflexão se $i = j$) do guia i para o j . Note também que cada par de índices dos guias pode ser colocado dentro de um subloco maior, separados nas matrizes por linhas horizontais e verticais, que por sua vez são marcados por um par de índices, cada um dos quais identifica um dos pontos do sistema. Resumindo, as matrizes envolvidas na parametrização de estube foram construídas da seguinte forma. A estrutura mais externa está determinada por blocos marcados com um par de índices de pontos, e referiremos a ela como estrutura de pontos. A estrutura intermediária dentro de cada bloco (P_i, P_j) descreve a direção de propagação para o conector que está entre o ponto P_i e um

reservatório se $P_i = P_j$, caso contrário descreve a direção de propagação para o conector entre o ponto P_i e o P_j . Por último, a estrutura mais interna é a dos modos de propagação. Todo o esforço por reorganizar a informação da maneira explicada acima, foi para garantir que a matriz do estube tenha a forma mostrada na eq. (3.21), assim poderemos fazer médias sobre os ensembles de matrizes aleatórias usando o método diagramático.

Como veremos mais adiante, será conveniente que as matrizes S_{P_1} e S_{P_2} tenham a mesma dimensão. É claro que a dimensão das mesmas está condicionada pelos canais abertos nos contatos adjacentes. Contudo, sempre podemos considerar igual tamanho para ambas as matrizes, colocando um terminal a mais com um número de canais determinado pela diferença dos canais no sistema real. No final do cálculo fazemos à transparência dos canais de propagação desse terminal fictício tender a zero, recuperando o sistema original. Vamos supor que em cada contato existem N_i canais abertos, cada um deles com transparência Γ_i , onde $i \in \{a, b, c\}$. A dimensão da matriz S_{P_1} é $(N_a + N_b) \times (N_a + N_b)$, enquanto que a dimensão de S_{P_2} é $(N_c + N_b) \times (N_c + N_b)$. Assumamos que $N_a > N_c$, então podemos colocar um terminal a mais no ponto P_2 com $N_d = N_a - N_c$ canais abertos e cada um deles com uma transparência Γ_d . Fazendo isto as dimensões das matrizes ficam iguais. Depois de implementar o método diagramático tomamos o limite $\Gamma_d \rightarrow 0$.

3.4.2 Regras para construir as matrizes da parametrização

Entendido como é construída a parametrização de estube para o caso particular de dois pontos acoplados em série, podemos escrever agora um conjunto de regras que nos guiarão na criação das matrizes envolvidas na parametrização de estube quando o sistema for um circuito quântico de topologia arbitrária. Para fazer a notação menos carregada, vamos rotular os pontos com a letra grega σ . Consideremos que existem n pontos, cada um deles acoplados a l_σ terminais, que por sua vez podem estar acoplados a outros pontos ou a reservatórios. Para construir a parametrização de estube, siga as seguintes regras:

1. Calcule as quantidades $M_\sigma = \sum_{i=1}^{l_\sigma} N_i^\sigma$ e escolha o maior deles, que denominaremos $M^{\max}$.
2. Nos pontos σ para os quais $M_\sigma < M^{\max}$, acrescente um terminal fictício com $M^{\max} - M_\sigma$ canais abertos, cada um deles com transparência $\Gamma_{l_\sigma+1}$. Tais transparências devem tomar-se nulas no final dos cálculos.
3. Construa as matrizes $\bar{S}_{\text{tot}}$, R' e T^α escolhendo a estrutura de pontos como a mais externa. Isto pode ser feito da seguinte forma:
 - A matriz R : Dos n^2 blocos de pontos, os blocos (σ_k, σ_j) com $k = j$ contém em sua diagonal apenas as matrizes de reflexão dos conectores que se encontram no ponto σ_k . Os blocos com $k \neq j$ contém as matrizes de transmissão dos contatos que unem o ponto σ_k ao σ_j . A posição exata das matrizes de reflexão e transmissão dentro de cada bloco deve obedecer à numeração feita para os conectores.

- A matriz $\bar{S}_{\text{tot}}$: Os blocos (σ_k, σ_k) contém as matrizes de reflexão dos contatos que não unem pontos, sua localização dentro do bloco deve obedecer a numeração dos conectores. Os demais blocos são nulos.
- A matriz T^α : Contrói-se de maneira idêntica à $\bar{S}_{\text{tot}}$, substituindo a letra r pela t .

As duas primeiras regras indicam como construir um circuito equivalente, introduzindo terminais fictícios quando for necessário, para garantir que as dimensões das matrizes de espalhamento das cavidades sejam as mesmas. A terceira regra nos guia na construção das matrizes envolvidas na parametrização de estube, exceto a matriz S_{cav} , que é construída de maneira trivial como foi explicado no exemplo de dois pontos.

3.5 MÉDIA SOBRE AS MATRIZES DAS CAVIDADES

Na seção 3.2 vimos como realizar médias sobre funções de polinômios de uma matriz aleatória que pertence a um ensemble circular. Para fazer cálculos análogos para funções de uma matriz de espalhamento de um circuito quântico, assumindo que esta é parametrizada como um estube, devemos saber como fazer médias sobre matrizes da forma:

$$(S_{\text{cav}})_{nm,ij,\sigma_1\sigma_2} = U_{nm,ij}^{\sigma_1} \delta_{\sigma_1\sigma_2}, \quad (3.22)$$

onde os índices (n, m) , (i, j) e (σ_1, σ_2) referem-se aos blocos de canais de propagação, aos números do guia e aos índices dos pontos, respectivamente.

Para poder usar o método diagramático, devemos adaptar a simbologia para as matrizes apresentadas anteriormente. Agora cada função sobre a qual se fará a média, deverá expressar-se através dos blocos na estrutura de ponto das matrizes S_{cav} . Redefiniremos então a simbologia ilustrada na fig. 3.5a. Cada linha tracejada ou grossa dirigida representa um bloco no espaço de pontos. Como as matrizes S_{cav} têm apenas blocos diagonais não nulos, cada ponto preto e branco da mesma linha tracejada terá o mesmo índice de ponto. As matrizes genéricas A podem ter blocos não diagonais de maneira geral. A necessidade de explicitar o índice de pontos surge do fato de que as matrizes U^σ pertencem a ensembles circulares, enquanto que S_{cav} pertence a um subconjunto de um ensemble circular.

Considere como exemplo, para ilustrar a utilidade da parametrização de estube generalizada, o cálculo da condutância de dois pontos, ou cavidades, acopladas em série. Admitamos que os números de canais abertos em cada contato são N_a , N_b e N_c , com transparências Γ_a , Γ_b e Γ_c respectivamente. Assumiremos que $N_a > N_c$. Da regra 1 da seção anterior para construir as matrizes relacionadas à parametrização temos que $M^{\text{max}} = N_a + N_b$. Seguindo a regra 2, devemos colocar um terminal fictício no segundo ponto com $N_a - N_c$ canais, cada um deles com transparência Γ_d que será feita nula no final dos cálculos. Equivalente a colocar o terminal fictício é assumir que o terminal do contato c tem N_a canais abertos, deles N_c possuem transparência Γ_c e $N_a - N_c$ têm transparência Γ_d . Se seguirmos a regra 3, construiremos exatamente as matrizes apresentadas na seção 3.4.1, a única diferença é que nos blocos da matriz de espalhamento do conector c devemos acrescentar os blocos do conector d .

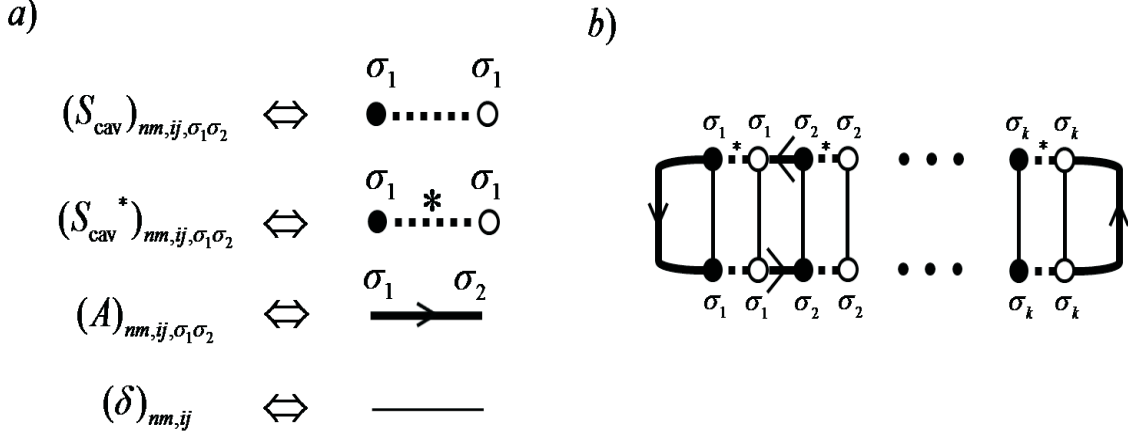


Figura 3.5 a) Modificação da simbologia do método diagramático para incluir os blocos de pontos. b) Diagrama tipo escada que surge no cálculo da média da condutância de um circuito quântico com reservatórios normais. Adotamos a convenção de Einstein para as somas dos índices de pontos que pertencem a diferentes laços-T.

Modelaremos os blocos associados à direção de propagação das matrizes de espalhamento S_i de cada conector como

$$\begin{cases} r_i = r'_i = \sqrt{1 - \Gamma_i} I_{N_i}, \\ t_i = t'_i = i\sqrt{\Gamma_i} I_{N_i}, \end{cases} \quad (3.23)$$

onde $i \in \{a, b, c, d\}$. Da fórmula de Landauer-Büttiker temos que à temperatura nula a condutância é dada por

$$G = G_0 \text{Tr} \left[t_{\text{tot}} t_{\text{tot}}^\dagger \right], \quad (3.24)$$

onde t_{tot} é o bloco de transmissão do guia 1 para o guia 4 e $G_0 = 2e^2/h$ (ver fig. 3.4). Na estrutura da matriz de espalhamento S_{tot} do sistema, este bloco está localizado no extremo superior direito (o elemento (1, 4)). Usando as matrizes de projeção

$$C_1 = \left(\begin{array}{cc|cc} I_{N_a} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right), \quad (3.25)$$

e

$$C_2 = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_{N_a} \end{array} \right), \quad (3.26)$$

podemos escrever a equação (3.24) como

$$G = G_0 \text{Tr} [C_1 \delta S C_2 \delta S^\dagger], \quad (3.27)$$

onde $\delta S \equiv S_{\text{tot}} - \bar{S}_{\text{tot}}$. Agora substituímos a eq. (3.13) na eq. (3.27) e desenvolvemos as matrizes inversas em séries de potência. Teremos então que

$$\langle G \rangle = G_0 \sum_{k=0}^{\infty} \langle \text{Tr} [A(S_{\text{cav}} R)^k S_{\text{cav}} B S_{\text{cav}}^\dagger (R^\dagger S_{\text{cav}}^\dagger)^k] \rangle, \quad (3.28)$$

onde introduzimos as matrizes $A = (T')^\dagger C_1 T'$ e $B = T C_2 T^\dagger$, e o símbolo $\langle \dots \rangle$ representa as médias sobre todas as matrizes U^σ . Para realizar tal média os diagramas devem ser explicitados com índices de pontos. Os termos dominantes da série (3.28) são representados diagramaticamente por diagramas tipo escada, como o mostrado na fig. 3.5b. Note que quando executamos a média dos termos da série apenas serão não nulos aqueles que tenham o mesmo número de matrizes U^σ e $(U^\sigma)^\dagger$, além do mais, para que os laços-U sobrevivam é necessário que contenham matrizes U^σ com o mesmo índice σ . De agora em diante, usaremos a convenção de Einstein para as somas dos índices de pontos que pertencem a diferentes laços-T.

Introduzindo os vetores $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ de n elementos, e a matriz $\mathcal{L}$ de dimensão $n \times n$ (em nosso exemplo de dois pontos temos $n = 2$) da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}_\sigma \equiv \text{Tr} [A_\sigma], \\ \mathcal{B}_\sigma \equiv \text{Tr} [B_\sigma], \\ \mathcal{L}_{\sigma_1, \sigma_2} \equiv \text{Tr} [R_{\sigma_1, \sigma_2} R_{\sigma_2, \sigma_1}^\dagger], \end{array} \right. \quad (3.29)$$

Podemos agora calcular os diagramas tipo escada, como o representado na fig. 3.5b, que é dado por $\mathcal{A} \cdot \mathcal{L}^{k-1} \cdot \mathcal{B}^\top / (M^{\text{max}})^k$. Ainda mais importante, a soma de todos eles pode ser feita exatamente e é dada por

$$\langle G \rangle / G_0 = \mathcal{A} \cdot (M^{\text{max}} \mathbf{I}_2 - \mathcal{L})^{-1} \cdot \mathcal{B}^\top. \quad (3.30)$$

O símbolo “ $\top$ ” representa a operação de transposição. Calculando explicitamente os objetos definidos na eq. (3.29), usando (3.30) e tomando o limite $\Gamma_d \rightarrow 0$ obtemos

$$\langle G \rangle / G_0 = \frac{G_a G_b G_c}{G_a G_b + G_b G_c + G_c G_a}, \quad (3.31)$$

onde $G_i = N_i \Gamma_i$. A equação acima não é mais do que a lei de Ohm para três resistores acoplados em série. É importante perceber quão redundantes são as matrizes R , T^α e $\bar{S}_{\text{tot}}$ devido ao aumento da dimensão que fizemos para incluir os blocos de pontos. Existem n^2 blocos, o que permite que possamos considerar cada ponto conectado aos $n - 1$ restantes. Esse tipo de situação nem sempre acontece e a maioria dos blocos é nula. Contudo, a redundância de informação desaparece quando fazemos os traços na execução da média.

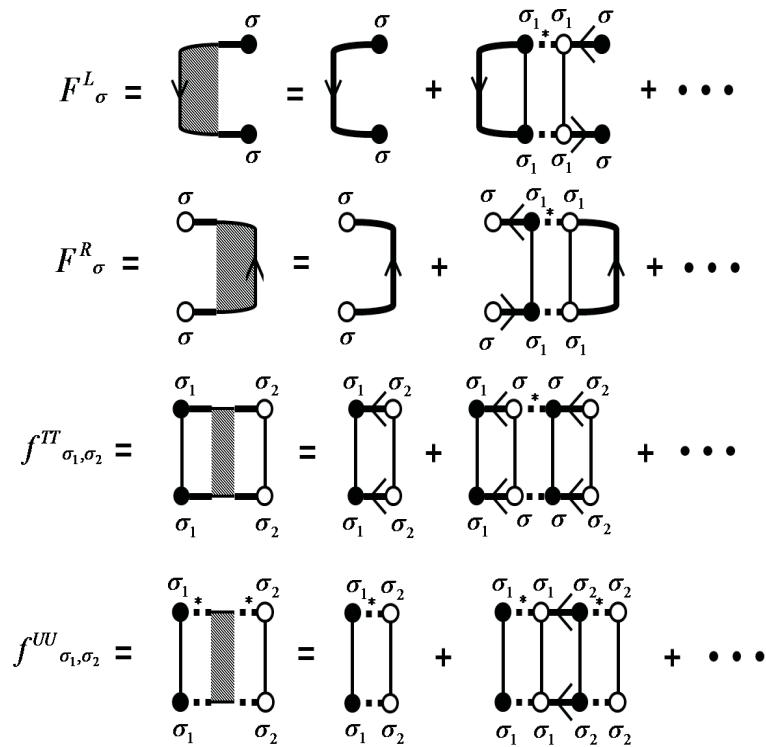


Figura 3.6 Definição e representação diagramática de F^L , F^R , f^{UU} e f^{TT} para sistemas com reservatórios normais.

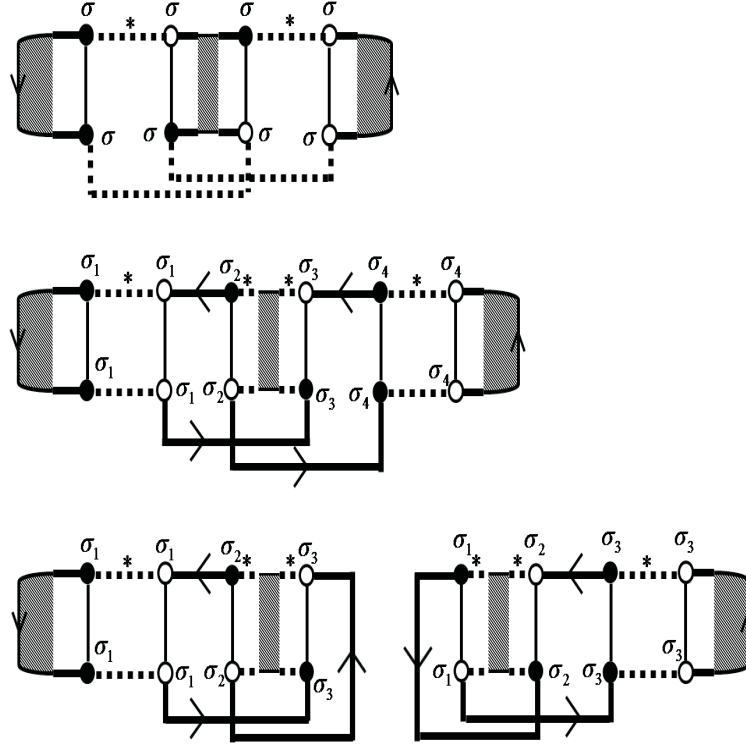


Figura 3.7 Representação dos diagramas cruzados que contribuem para a correção de localização fraca da condutância em sistemas com reservatórios normais.

3.6 APLICAÇÕES DO MÉTODO

Para mostrar a eficiência do método diagramático quando a matriz de espalhamento do circuito quântico é parametrizada como explicado na seção 3.4.2, calcularemos o termo dominante e o termo de localização fraca da condutância em dois sistemas com topologias diferentes. Em ambos os casos, admitimos que a matriz de espalhamento de cada cavidade pertence ao ensemble circular ortogonal **ECO**. Assumiremos que todos os contatos têm o mesmo número de canais abertos N , e que cada canal em cada conector é caracterizado pela mesma transparência Γ . Consideraremos também que os conectores têm as mesmas propriedades de espalhamento para os dois sentidos de propagação. Isto é expresso matematicamente fazendo $r = r' = \sqrt{1 - \Gamma} I_N$ e $t = t' = i\sqrt{\Gamma} I_N$. O valor clássico da condutância e a correção de localização fraca serão denotados por G_{cl} e δG respectivamente.

Diagramaticamente, a correção de localização fraca tem duas origens. Em primeiro lugar, quando existe simetria de reversão temporal no sistema, os pesos dos laços-U nos diagramas tipo escada dão lugar a termos que são uma ordem menor do que o termo dominante. Já encontramos esta situação quando analisamos o exemplo da cavidade com contatos ideais e chegamos à eq. (3.7). Em segundo lugar, existem novos diagramas do tipo cruzados cujos valores têm ordem da unidade. No exemplo mencionado acima o

diagrama cruzado era nulo, mas isto nem sempre acontece.

A primeira contribuição de δG , que denominaremos δG_1 é dada por [52]

$$\delta G_1 = -\mathcal{A} \cdot \mathcal{K}^2 \cdot \mathcal{B}^\top, \quad (3.32)$$

onde $\mathcal{K} = (M^{\max} \mathbf{I}_n - \mathcal{L})^{-1}$.

Para calcular a segunda correção proveniente dos diagramas cruzados, e denotada por δG_2 , é necessário introduzir as somas infinitas de diagramas mostradas na fig. 3.6. Note que tanto F^L como F^R são vetores de n componentes, enquanto que f^{UU} e f^{TT} são matrizes de dimensão $n \times n$. Os diagramas cruzados de ordem da unidade são representadas na fig. 3.7, onde usamos os símbolos da fig. 3.6. As topologias diferentes que dão lugar aos diagramas são as mesmas que as de um sistema com uma única cavidade caótica. Observe que embora nos diagramas a cor dos pontos que estão nos extremos do retângulo que representa a quantidade f^{UU} , não seja a mesma que a apresentada na fig. 3.6, o valor da grandeza não é afetado. Para continuar precisamos especificar a topologia do circuito de cavidades acopladas.

3.6.1 Cadeia linear de cavidades quânticas caóticas

Considere uma cadeia linear de n cavidades quânticas caóticas acoplada em suas extremidades a dois reservatórios normais. As matrizes R , T^α e $\bar{S}_{\text{tot}}$ são dadas respectivamente por

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{\sigma_1, \sigma_2} = r \otimes \mathbf{I}_2 \delta_{\sigma_1, \sigma_2} + t \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2+1} + t \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1+1, \sigma_2}, \\ T_{\sigma_1, \sigma_2}^\alpha = t \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, 1} + t \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, n}, \\ (\bar{S}_{\text{tot}})_{\sigma_1, \sigma_2} = r \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, 1} + r \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, n}, \end{array} \right. \quad (3.33)$$

As matrizes de projeção são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} (C_1)_{\sigma_1, \sigma_2} = \mathbf{I}_N \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, 1}, \\ (C_2)_{\sigma_1, \sigma_2} = \mathbf{I}_N \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, n}. \end{array} \right. \quad (3.34)$$

Agora podemos calcular as quantidades introduzidas na eq. (3.29), e obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}_\sigma = N \Gamma \delta_{\sigma, 1}, \\ \mathcal{B}_\sigma = N \Gamma \delta_{\sigma, n}, \end{array} \right. \quad (3.35)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\sigma_1, \sigma_2} = & 2N(1 - \Gamma) \Theta(\sigma_1 - \sigma_2) \Theta(\sigma_2 - \sigma_1) + 2N\Gamma [\Theta(\sigma_1 + 1 - \sigma_2) \times \\ & \Theta(\sigma_2 - \sigma_1 - 1) + \Theta(\sigma_2 + 1 - \sigma_1) \Theta(\sigma_1 - \sigma_2 - 1)], \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde $\Theta(x) = 1$ se $x \geq 0$ e $\Theta(x) = 0$ caso contrário. Denotaremos a matriz $(2NI_n - \mathcal{L})^{-1}$ com o símbolo $\mathcal{K}$. Pode ser mostrado que

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{\sigma_1, \sigma_2} = & \frac{1}{N\Gamma(n+1)} [\sigma_2(n+1 - \sigma_1) \Theta(\sigma_1 - \sigma_2 + 1) + \\ & \sigma_1(n+1 - \sigma_2) \Theta(\sigma_2 - \sigma_1)]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Aplicando a equação (3.30) obtemos que o termo dominante da condutância é

$$G_{cl}/G_0 = \frac{N\Gamma}{n+1}, \quad (3.38)$$

como era de se esperar pela lei de Ohm.

Passemos agora ao cálculo da localização fraca. Usando as expressões (3.32), (3.35) e (3.37), obtemos que

$$\delta G_1/G_0 = -\frac{n(n+2)}{6(n+1)}. \quad (3.39)$$

Somando os quatro diagramas da fig. 3.7 e levando em consideração as expressões específicas das matrizes (3.33) e (3.34) obtemos

$$\delta G_2/G_0 = -\frac{n[n(n+1) + 2(2 - 3\Gamma)]}{6(n+1)^2}. \quad (3.40)$$

Somando ambas as contribuições chegamos finalmente ao seguinte resultado

$$\delta G/G_0 = -\frac{n(n+3\Gamma-1)}{3(n+1)^2}, \quad (3.41)$$

que reproduz todos os casos limites encontrados na literatura. Quando consideramos por exemplo $\Gamma \ll 1$, recuperamos o resultado de Campagnano e Nazarov para uma cadeia de barreiras de tunelamento [48]

$$\delta G/G_0 = -\frac{n(n-1)}{3(n+1)^2}. \quad (3.42)$$

No regime em que os contatos são balísticos fazemos $\Gamma = 1$ na eq. (3.41) e obtemos

$$\delta G/G_0 = -\frac{n(n+2)}{3(n+1)^2}, \quad (3.43)$$

que é o resultado de Argaman para uma cadeia de cavidades caóticas acopladas idealmente [55]. Finalmente, quando $n = 1$ obtemos $\delta G/G_0 = -1/4$, como apresentado na ref. [52] para uma cavidade caótica com contatos ideais simétricos.

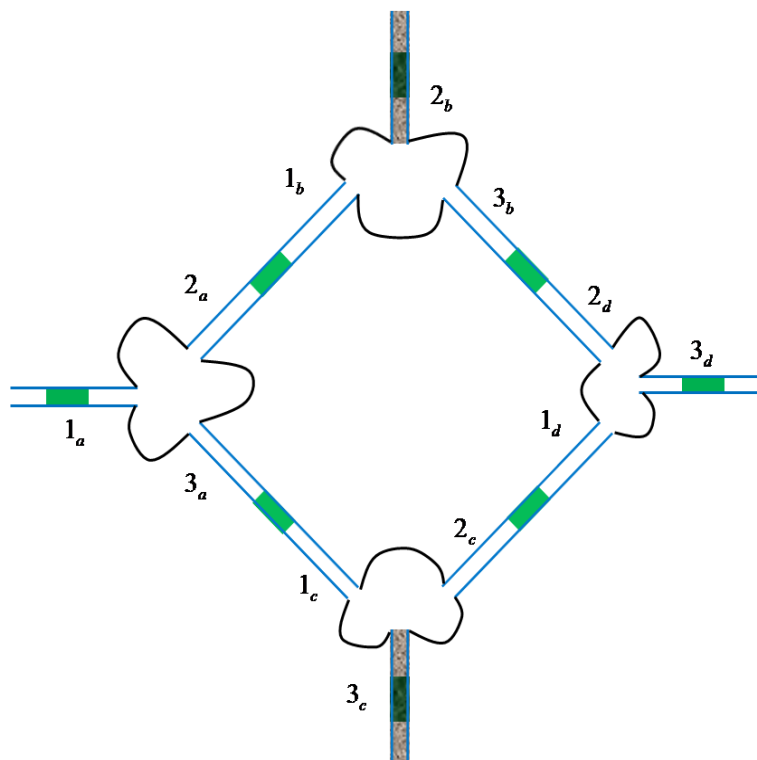


Figura 3.8 Circuito quântico composto por quatro cavidades caóticas acopladas com a topologia do quadrado. Os guias de cor sombreada e seus respectivos conectores são fictícios.

3.6.2 Quatro cavidades acopladas com a topologia do quadrado

Considere o circuito representado na fig. 3.8. Usamos as letras a , b , c e d para nos referirmos aos pontos com o cuidado de não confundir o índice de pontos com o do guia. Como cada guia tem N canais abertos, segundo a regra 2 da seção (3.4.2) devemos colocar um terminal fictício nos pontos b e c , também com N canais abertos, cada um deles com uma transparência Γ_f . Na figura os terminais fictícios têm uma cor sombreada. Segundo a regra 3, e seguindo a numeração dos guias mostrada na figura, a matriz R é dada por:

$$R_{\sigma_1, \sigma_2} = r \otimes I_3 \delta_{\sigma_1, \sigma_2} (\delta_{\sigma_1, 1} + \delta_{\sigma_1, 4}) + \left\{ r \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + r_f \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\} \delta_{\sigma_1, 2} +$$

$$\left\{ r \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + r_f \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \delta_{\sigma_1, 3} +$$

$$t \otimes \begin{pmatrix} 0 & \delta_{\sigma_1, 2} \delta_{\sigma_2, 1} + \delta_{\sigma_1, 4} \delta_{\sigma_2, 3} & \delta_{\sigma_1, 3} \delta_{\sigma_2, 1} \\ \delta_{\sigma_1, 1} \delta_{\sigma_2, 2} + \delta_{\sigma_1, 3} \delta_{\sigma_2, 4} & 0 & \delta_{\sigma_1, 4} \delta_{\sigma_2, 2} \\ \delta_{\sigma_1, 1} \delta_{\sigma_2, 3} & \delta_{\sigma_1, 2} \delta_{\sigma_2, 4} & 0 \end{pmatrix},$$

onde $r_f = \sqrt{1 - \Gamma_f} I_N$ e $t_f = i\sqrt{\Gamma_f} I_N$. Também construímos as matrizes T^α e $\bar{S}_{\text{tot}}$ como:

$$\left\{ \begin{aligned} T_{\sigma_1, \sigma_2}^\alpha &= \left\{ t \otimes \begin{pmatrix} \delta_{\sigma_1, 1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{\sigma_1, 4} \end{pmatrix} + t_f \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{\sigma_1, 2} & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{\sigma_1, 3} \end{pmatrix} \right\} \delta_{\sigma_1, \sigma_2}, \\ (\bar{S}_{\text{tot}})_{\sigma_1, \sigma_2} &= \left\{ r \otimes \begin{pmatrix} \delta_{\sigma_1, 1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{\sigma_1, 4} \end{pmatrix} + r_f \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{\sigma_1, 2} & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{\sigma_1, 3} \end{pmatrix} \right\} \delta_{\sigma_1, \sigma_2}. \end{aligned} \right. \quad (3.44)$$

As matrizes de projeção são dadas por:

$$\left\{ \begin{aligned} (C_1)_{\sigma_1, \sigma_2} &= I_N \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, 1}, \\ (C_2)_{\sigma_1, \sigma_2} &= I_N \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, 4}. \end{aligned} \right. \quad (3.45)$$

Com esta informação encontramos que

$$\begin{cases} \mathcal{A}_\sigma = N \Gamma \delta_{\sigma,1}, \\ \mathcal{B}_\sigma = N \Gamma \delta_{\sigma,4}, \end{cases} \quad (3.46)$$

e fazendo $\Gamma_f \rightarrow 0$ obtemos

$$\mathcal{K} = \frac{1}{6 N \Gamma} \begin{pmatrix} 4 & 3 & 3 & 2 \\ 3 & 6 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 6 & 3 \\ 2 & 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Usando agora (3.30) recuperamos a lei de Ohm

$$G_{\text{cl}}/G_0 = \frac{N \Gamma}{3}. \quad (3.48)$$

As correções δG_1 e δG_2 são dadas por

$$\begin{cases} \delta G_1/G_0 = -17/18, \\ \delta G_2/G_0 = (15 + 4\Gamma)/18, \end{cases} \quad (3.49)$$

de maneira que

$$\delta G/G_0 = -\frac{1 + 2\Gamma}{9}. \quad (3.50)$$

O resultado da eq. (3.50) foi verificado através de simulações numéricas [56].

A maior dificuldade técnica no cálculo da condutância clássica e do termo de localização fraca é encontrar a matriz $\mathcal{K}$, pois devemos inverter uma matriz, e fazer isto analiticamente pode ser um pouco complicado se o número de pontos no circuito for genérico. O cálculo de outros observáveis pode ser trabalhoso, mas não é necessariamente complexo. Devemos salientar que para calcular os mesmos observáveis em qualquer outro circuito quântico com reservatórios normais, apenas precisamos reconstruir as matrizes da parametrização de estube seguindo as regras da seção 3.4.2 e encontrar cada quantidade relacionada aos diagramas como fizemos nos exemplos acima. Não precisamos encontrar novos diagramas, o que é uma vantagem considerável em termos de cálculo. Basta importar os diagramas encontrados para um circuito contendo um único ponto quântico.

3.7 SUMÁRIO

Mostramos como fazer a composição das matrizes de espalhamento dos elementos de um circuito quântico com topologia arbitrária. Tal composição foi feita reorganizando a informação das matrizes de espalhamento numa parametrização de estube generalizada. Vimos que a parametrização é conveniente para calcular observáveis de transporte através

do método diagramático para fazer médias sobre ensembles circulares, desde que sejam feitas algumas modificações da simbologia usada na representação diagramática. Novas topologias podem ser modeladas com relativa flexibilidade. Para mostrar as possibilidades de cálculo do nosso método, calculamos de maneira inédita a correção de localização fraca para a condutância em dois sistemas com topologias diferentes: uma cadeia linear de cavidades caóticas acopladas por contatos com transparência arbitrária e quatro cavidades caóticas acopladas com a topologia do quadrado.

MÉTODO DIAGRAMÁTICO PARA SISTEMAS HÍBRIDOS NORMAL-FERROMAGNÉTICO

4.1 INTRODUÇÃO

O grande potencial tecnológico dos sistemas magnetoelétricos [57] tem conquistado o interesse de várias pessoas dentro da comunidade de físicos da matéria condensada. Em particular, a magnetoeletrônica não colinear tem sido uma subárea muito ativa nos últimos anos [23]. Novos fenômenos como magneto-resistência angular [58, 59] e torque por transferência de spin [25] têm estimulado as propostas de novos dispositivos como o transistor de reversão de spin e o transistor de torque de spin [60, 23].

A teoria quântica de circuitos criada por Brataas *et al.* [35], é uma ferramenta muito útil no estudo de sistemas híbridos metálicos normal-ferromagnético. Por causa da grande quantidade de informação microscópica que é retirada *ab initio* na construção do formalismo, a qual é irrelevante para caracterizar várias propriedades de transporte, resulta que fica relativamente simples o emprego da TQC, mesmo para sistemas complexos (ver capítulo 2). Ela permite, por exemplo, calcular corrente de carga e de spin na presença de processos de reversão de spin nos nós [36, 37]. Desde sua versão inicial, várias generalizações, em diferentes direções, foram feitas à TQC. Bauer *et al.* estenderam seu regime de validade para sistemas onde os componentes ferromagnéticos podem ter uma resistividade baixa, não sendo preciso que a função de distribuição seja isotrópica nos nós. Isto foi feito renormalizando o tensor de condutância dos conectores [40]. Numa outra direção, a teoria de circuitos foi reconstruída tomando como ponto de partida o formalismo de Landauer-Büttiker, com o objetivo de fazê-la capaz de descrever o ruído de disparo tanto no regime de transporte elástico quanto no inelástico. Tal generalização exigiu a introdução de novos parâmetros para caracterizar os conectores, introduzidos no formalismo através de uma matriz de ruído [61]. Mais recentemente, uma teoria semiclássica de Boltzmann-Langevin foi aplicada a um metal normal difusivo conectado a reservatórios ferromagnéticos por junções de tunelamento. Através dela é calculada a potência de ruído de disparo na presença de processos de reversão de spin no metal normal [62]. Uma característica comum destas teorias é que elas são baseadas num esquema aproximado semiclássico, o qual embora seja conveniente para a descrição de sistemas metálicos, pode não ser adequado para sistemas envolvendo componentes semicondutores, onde os efeitos de interferência quântica são mais significativos [63, 64, 65].

No contexto da teoria de matrizes aleatórias, Waintal *et al.* propuseram um formalismo para o cálculo do torque induzido por corrente num sistema FNF [39]. Embora esta teoria tenha como ponto de partida as matrizes de espalhamento de cada parte do sistema, o resultado final pode ser expresso como função de um pequeno número de parâmetros. Esta redução de parâmetros equivale a subtrair a informação que é irrele-

vante para as propriedades de transporte. A matriz de espalhamento da parte normal é modelada usando a decomposição polar, juntamente com a hipótese de isotropização [7]. Dessa forma o formalismo de Waintal leva em conta a condutância do metal normal, contudo ela não é válida para sistemas de multi-camadas, onde as interfaces são pouco resistivas [40].

No presente capítulo propomos um formalismo baseado no método diagramático para médias sobre o grupo unitário [52] e numa construção de estube, que permite estudar um sistema multiterminal consistindo de numa cavidade desordenada acoplada a um número arbitrário de reservatórios ferromagnéticos com magnetizações não colineares e reservatórios normais. Embora não consideremos aqui a condutância da cavidade, acreditamos que o nosso enfoque tem algumas vantagens. Em primeiro lugar, ele contém a informação completa da coerência de fase, sendo possível calcular cumulantes de carga transmitida de ordem maior que dois, assim como funções de correlação entre correntes de diferentes terminais, correções de localização fraca e flutuações universais da condutância. Em segundo lugar, é possível importar vários resultados diagramáticos já obtidos para um ponto quântico acoplado a dois reservatórios normais, o que permite uma maior eficiência de cálculo. Finalmente, ele abre a possibilidade de estudar observáveis de transporte, em sistemas mais complexos combinando resultados de sistemas simples conforme descrito no capítulo 3.

Organizaremos o capítulo da seguinte forma. Na seção 4.2 deduziremos a fórmula de Landauer-Büttiker para a corrente de carga quando os guias são ferromagnéticos, sendo suas magnetizações não colineares de maneira geral. Posteriormente explicaremos na seção 4.3 detalhes do sistema físico que será analisado, assim como a forma na que as matrizes de espalhamento serão modeladas. Dedicaremos a seção 4.4 para adaptar a simbologia usada no método diagramático incluindo o grau de liberdade de spin. Na seção 4.5 calcularemos a condutância para o caso de um sistema de dois terminais. Para o mesmo sistema, será calculado o fator Fano na seção 4.6, compararemos os resultados com os obtidos via teoria de circuito e analisaremos o caso mais geral de contatos assimétricos. Finalmente, usaremos a seção 4.7 para definir um conjunto reduzido de parâmetros para cada contato que permite calcular qualquer observável com estatística linear nos autovalores de transmissão. Os parâmetros serão calculados explicitamente para contatos balísticos e junções de tunelamento.

4.2 FÓRMULA DE LANDAUER-BÜTTIKER

No capítulo 2 foi apresentada a expressão para a corrente de spin matricial para uma interface NF, obtida a partir de sua definição geral usando argumentos semiclássicos. Estes últimos são introduzidos na teoria de circuitos quando se atribui a cada nó uma função de Green de Keldysh semiclássica. Foi explicado também que a fórmula coincide com a de Landauer-Büttiker (**LB**) quando os dois nós adjacentes são reservatórios normais, no entanto esclarecemos que a fórmula de LB é válida num regime muito mais amplo. Nesta seção deduziremos uma generalização da fórmula de LB incluindo o grau de liberdade de spin na matriz de espalhamento da amostra, sem o uso de nenhum argumento semiclássico, como é feito na ref. [83].

Na teoria de LB admite-se que os portadores que saem de um reservatório são distribuídos espectralmente com o mesmo fator de preenchimento do reservatório. As distribuições dos portadores entrantes dependem das distribuições dos reservatórios que lhes dão origem, assim como das propriedades de transmissão dos conectores. Na referência [61] estas hipóteses foram estendidas para os nós de um circuito quântico. No presente capítulo não será preciso usar essa extensão, pois estamos interessados apenas em transporte de carga, de maneira que a matriz de espalhamento envolvida na dedução da fórmula representará a amostra inteira (incluindo nós e conectores).

Consideremos uma amostra mesoscópica, cuja matriz de espalhamento é ativa no espaço de spin de maneira geral, conectada a dois reservatórios através de guias ferromagnéticos ideais com magnetizações não colineares, como mostrado na fig. 4.1. Vamos supor que o grau de liberdade de spin nos guias ferromagnéticos é bem descrito pelo modelo de Stoner para metais. Portanto, assumiremos que em cada guia existem duas bandas de energia, de maneira que os extremos inferiores das bandas para elétrons cujas direções de spin são opostas estão deslocados por uma quantidade Δ_i , onde o índice i identifica o guia. Consideraremos então que o i -ésimo guia é descrito pelo seguinte hamiltoniano de Stoner

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_i^*} \mathbf{I}_2 + \Delta_i \vec{m}_i \cdot \hat{\vec{\sigma}}, \quad (4.1)$$

onde m_i^* é a massa efetiva do elétron no guia i , Δ_i representa o potencial de troca, $\vec{m}_i$ é a direção de magnetização e $\hat{\vec{\sigma}}$ é o vetor das matrizes de Pauli. Admitimos que os operadores de criação (aniquilação) no guia i criam (aniquilam) elétrons com spin σ na direção da magnetização do próprio guia.

Podemos introduzir operadores de campo da forma

$$\begin{cases} \Psi_{i,\sigma}(\vec{r}, t) = \int dE e^{-iEt/\hbar} \sum_{n=1}^{N_{i,\sigma}(E)} \frac{\phi_{i,n,\sigma}(\vec{\rho})}{(2\pi\hbar v_{i,n,\sigma}(E))} (c_{i,n,\sigma} e^{ik_{i,n,\sigma}x} + d_{i,n,\sigma} e^{-ik_{i,n,\sigma}x}), \\ \Psi_{i,\sigma}^\dagger(\vec{r}, t) = \int dE e^{iEt/\hbar} \sum_{n=1}^{N_{i,\sigma}(E)} \frac{\phi_{i,n,\sigma}^*(\vec{\rho})}{(2\pi\hbar v_{i,n,\sigma}(E))} (c_{i,n,\sigma}^\dagger e^{-ik_{i,n,\sigma}x} + d_{i,n,\sigma}^\dagger e^{ik_{i,n,\sigma}x}). \end{cases} \quad (4.2)$$

Na expressão acima $i \in \{a, b\}$ denota o guia, $N_{i,\sigma}(E)$ é o número de canais abertos no guia i para elétrons com energia E e spin σ , o par $c_{i,n,\sigma}$ e $c_{i,n,\sigma}^\dagger$ ($d_{i,n,\sigma}$ e $d_{i,n,\sigma}^\dagger$) representa os operadores de criação e aniquilação de elétrons com energia E , no modo n , e com spin σ que se aproximam (distanciam) da amostra através do i -ésimo guia (ver fig. 4.1). As funções de onda transversais são representadas por $\phi_{i,n,\sigma}(\vec{\rho})$ onde $\vec{\rho}$ é o vetor que contém as coordenadas transversais. O vetor de onda e a velocidade dos elétrons em cada modo com spin σ são dados por $k_{i,n,\sigma} = \hbar^{-1} (2m_i^*(E - E_{i,n,\sigma}))^{1/2}$ e $v_{i,n,\sigma} = \hbar k_{i,n,\sigma}/m_i^*$ respectivamente, sendo $E_{i,n,\sigma}$ a energia de corte do modo n para elétrons com spin σ . Os operadores de criação e aniquilação obedecem às regras de anticomutação usuais para férmions, que se escrevem como

$$\begin{cases} \{c_{i,n,\sigma}^\dagger(E), c_{i',n',\sigma}(E')\} = \delta_{i,i'}\delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(E-E'), \\ \{c_{i,n,\sigma}(E), c_{i',n',\sigma}(E')\} = 0, \\ \{c_{i,n,\sigma}^\dagger(E), c_{i',n',\sigma}^\dagger(E')\} = 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

O símbolo $\{\dots, \dots\}$ representa a operação de anticomutação. As mesmas relações valem para $d_{i,n,\sigma}$ e $d_{i,n,\sigma}^\dagger$. Os operadores que criam ou destroem elétrons entrantes e saíntes estão relacionados pela matriz de espalhamento da amostra da seguinte forma

$$d_{i,n,\sigma} = \sum_{i',n',\sigma'} S_{i,i';n,n'}^{\sigma,\sigma'} c_{i',n',\sigma'}. \quad (4.4)$$

onde os blocos da matriz S determinados pelos pares de índices $(i = a, i' = a)$, $(i = b, i' = b)$, $(i = a, i' = b)$ e $(i = b, i' = a)$, são os blocos de reflexão $\hat{r}$, $\hat{r}'$ e transmissão $\hat{t}$, $\hat{t}'$ respectivamente. O símbolo de chapéu indica a inclusão da estrutura de spin.

Nosso objetivo é calcular a corrente de carga através da amostra, a qual é dada por

$$I_i(\vec{r}, t) = \sum_{\sigma} I_{i,\sigma,\sigma}(\vec{r}, t). \quad (4.5)$$

A corrente matricial $I_{i,\sigma,\sigma}(\vec{r}, t)$ é definida através da eq. (2.1). Substituindo a expansão dos operadores de campo na expressão acima, levando em conta a ortogonalidade das funções de onda transversais e considerando que a velocidade dos elétrons varia suavemente com a energia, chegamos à seguinte fórmula para a corrente média

$$I_i(t) = \frac{e}{h} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} \sum_{\sigma,n} \left\langle c_{i,n,\sigma}^\dagger(E) c_{i,n,\sigma}(E') - d_{i,n,\sigma}^\dagger(E) d_{i,n,\sigma}(E') \right\rangle_{\text{est}}. \quad (4.6)$$

Os símbolos angulares com o subíndice “est” representam a média sobre o operador quântico estatístico, que não se deve confundir com a média sobre a desordem. Matematicamente, a condição de que os elétrons que saem do reservatório são descritos pela mesma função distribuição do reservatório, e que isto acontece de maneira independente em cada guia, para cada canal e para cada valor do spin, é expressa como

$$\left\langle c_{i,n,\sigma}^\dagger(E) c_{i',n',\sigma'}(E') \right\rangle_{\text{est}} = \delta_{i,i'}\delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(E-E')f_i(E), \quad (4.7)$$

onde $f_i(E)$ é a distribuição de Fermi-Dirac no reservatório i . Substituindo a eq. (4.4) em (4.6), usando as relações de unitariedade da matriz S e a média (4.7), obtemos

$$I = \frac{e}{h} \int dE \hat{\text{Tr}} [\hat{t}^\dagger(E)\hat{t}(E)] [f_a(E) - f_b(E)]. \quad (4.8)$$

Na equação anterior omitimos o índice do guia, pois a carga é conservada, de modo que $I_a = -I_b$. Representamos com $\hat{\text{Tr}}$ o traço na estrutura de canal e de spin. No regime linear a eq. (4.8) fica

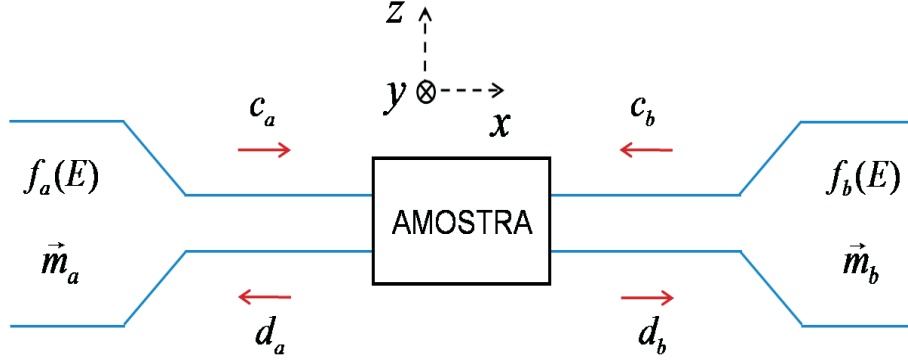


Figura 4.1 Amostra acoplada a reservatórios com magnetizações não colineares $\vec{m}_a$ e $\vec{m}_b$, através de guias de onda ferromagnéticas ideais. Nos operadores de aniquilação omitimos os índices de canal e de spin por simplicidade.

$$I = G_0 V \hat{\text{Tr}} [\hat{t}^\dagger(E_F) \hat{t}(E_F)], \quad (4.9)$$

onde E_F é a energia de Fermi, V é a diferença de potencial entre os reservatórios e $G_0 = e^2/h$. Da eq. (4.8) podemos tirar uma conclusão muito importante, que já tínhamos observado no capítulo 2. Se a amostra estiver conectada a reservatórios, que estão por hipótese em equilíbrio local, matematicamente é equivalente considerá-los como metais normais ou ferromagnéticos, apenas importando seus fatores de preenchimento.

A generalização para um sistema multiterminal é feita de maneira análoga. Obtém-se que a corrente de carga que atravessa o terminal i é dada por

$$I_i = -\frac{e}{h} \int dE \sum_j \hat{\text{Tr}} [\hat{\delta}_{i,j} - \hat{S}_{i,j}^\dagger(E) \hat{S}_{i,j}(E)] f_j(E), \quad (4.10)$$

onde a soma é sobre todos os terminais e $\hat{S}_{i,j}$ representa o bloco de transmissão do terminal i para o j quando $i \neq j$ e o de reflexão para $i = j$.

4.3 MODELO FÍSICO E PARAMETRIZAÇÃO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO

Analisemos agora um sistema multiterminal, composto de uma cavidade quântica caótica, acoplada a reservatórios normais ou ferromagnéticos através de contatos não ideais de maneira geral. O espalhamento dos elétrons pode acontecer tanto dentro da cavidade, como também nos contatos. Portanto, aplicaremos o formalismo de LB incluindo em nossa amostra os contatos, caso estes últimos não sejam ideais. Assumiremos que a condutância do sistema é dominada pela dos contatos. Estes podem ser “ativos” na estrutura de spin, na mesma direção do que a magnetização do seus correspondentes reservatórios.

Para calcular um observável de transporte usando o método diagramático, devemos fazer basicamente três coisas. Primeiro, devemos escrever o observável em termos da

matriz de espalhamento do sistema. Segundo, devemos parametrizar a matriz de espalhamento da amostra de uma forma conveniente. Terceiro, executamos a média sobre a desordem. Nesta seção faremos a parametrização da matriz S do sistema descrito acima, usando a representação de estube. A matriz de espalhamento do i -ésimo contato pode ser representada como

$$S_i = \begin{pmatrix} \hat{r}_i & \hat{t}_i' \\ \hat{t}_i & \hat{r}_i' \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Cada bloco da direção de propagação tem estrutura de spin. Por exemplo, para $\hat{r}_i$ temos

$$\hat{r}_i = \begin{pmatrix} r_i^{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & r_i^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Similarmente ao que foi feito no capítulo 2, desprezaremos os processos de reversão de spin causados por interação spin órbita, de modo que os blocos fora da diagonal se anulam, $r_i^{\uparrow\downarrow} = r_i^{\downarrow\uparrow} = 0$. O mesmo vale para $\hat{r}_i'$, $\hat{t}_i$ e $\hat{t}_i'$. A dimensão de cada subbloco na estrutura de spin é $N_i \times N_i$, onde N_i é o número de canais abertos no guia i .

Escolhamos a direção de magnetização de um dos reservatórios $\vec{m}_1$ como referência. Então a matriz de espalhamento dos contatos restantes deve ser rotacionada. Isto pode ser feito de maneira implícita usando as matrizes de projeção, como feito no capítulo 2. Uma outra forma é usar explicitamente o operador rotação

$$\hat{R}(\theta_i, \vec{n}_i) = I_{N_i} \otimes \left(I_2 \cos\left(\frac{\theta_i}{2}\right) - i\hat{\sigma} \cdot \vec{n}_i \sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right) \right), \quad (4.13)$$

onde θ_i é o ângulo formado entre $\vec{m}_i$ e $\vec{m}_1$, e $\vec{n}_i$ é o vetor diretor na direção $\vec{m}_1 \times \vec{m}_i$. Faremos coincidir o eixo z com a direção de $\vec{m}_1$. A estrutura matricial de cada bloco de spin é rotacionada como exemplificado abaixo para o bloco $\hat{r}_i$:

$$\hat{r}_i(\theta_i, \vec{n}_i) = \hat{R}(\theta_i, \vec{n}_i) \hat{r}_i(0) \left(\hat{R}(\theta_i, \vec{n}_i) \right)^\dagger. \quad (4.14)$$

Na equação anterior $\hat{r}_i(0)$ é dado pela eq. (4.12). É importante salientar o fato de que a eq. (4.11) foi apresentada com a seguinte hierarquia para seus blocos: *direção de propagação* $\rightarrow$ *spin* $\rightarrow$ *modos de propagação*, onde a primeira estrutura na ordem hierárquica é a mais externa.

A cavidade caótica, é feita de um material não magnético, o que implica que sua matriz de espalhamento S_0 descreve igualmente a dinâmica de elétrons com spin em ambas as direções. Portanto podemos escrever

$$S_0 = U \otimes I_2. \quad (4.15)$$

Pelas condições de universalidade explicadas no início da seção, a matriz U pertence a um dos ensembles circulares, com as restrições adicionais de simetria que selecionam ensemble sendo obtidas das simetrias da dinâmica dos elétrons na cavidade. No entanto, como neste capítulo estamos interessados apenas em materiais metálicos, nos quais os efeitos da interferência são muito pequenos, usaremos por simplicidade e com o objetivo

de aproveitar a generalidade do núcleo de Poisson¹⁴, matrizes U pertencentes ao ensemble circular unitário $\mathbf{ECU}(N_T)$, onde $N_T = \sum_i^l N_i$ e l é o número de terminais do sistema. Note que S_0 pertence a um subgrupo de $\mathbf{ECU}(2N_T)$, o fator 2 aparece devido ao grau de liberdade de spin. A hierarquia de blocos da eq. (4.15) é: *spin* $\rightarrow$ *direção de propagação* $\rightarrow$ *modos de propagação*. Uma conclusão importante que pode ser tirada a partir da eq. (4.15) é que a distribuição de S_0 é uniforme, ou seja

$$P(S_0) = P(U) = \text{constante.} \quad (4.16)$$

No capítulo anterior vimos que a parametrização de estube pode ser facilmente generalizada para um sistema multiterminal. Para isto basta especificar as matrizes $\bar{S}$, R , T , T' e a matriz do estube S_0 (dada na eq. (4.15)). Definimos então

$$\begin{Bmatrix} \bar{S}_{ij} \\ R_{ij} \\ T_{ij} \\ T'_{ij} \end{Bmatrix} = \delta_{ij} \times \begin{Bmatrix} \hat{r}_i \\ \hat{r}'_i \\ \hat{t}_i \\ \hat{t}'_i \end{Bmatrix}. \quad (4.17)$$

Desta forma a matriz de espalhamento do sistema amostra e contatos pode ser escrita como:

$$S = \bar{S} + T'(1 - S_0 R)^{-1} S_0 T. \quad (4.18)$$

Deve ser lembrado que as representações das matrizes (4.17) e (4.15) não são as mesmas, pois a hierarquia dos blocos difere. Por conveniência, vamos usar de agora em diante a hierarquia da matriz S_0 como padrão. A mudança de uma representação para outra é feita através de uma transformação unitária que geralmente não é difícil de encontrar. No caso de dois terminais nomeados pelas letras a e b , a transformação é dada pela matriz

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} I_{N_a} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_{N_b} & 0 \\ 0 & I_{N_a} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_{N_b} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Note que depois da transformação as eqs. (4.17) não serão diagonais na estrutura de spin. Isto é uma característica do transporte não colinear.

Mostramos até aqui que a matriz de espalhamento do sistema pode ser representada através da parametrização de estube, e que a matriz correspondente ao estube (S_0) pertence a um ensemble circular unitário. Podemos concluir então que S é descrita pelo núcleo de Poisson [47]

$$P(S) = \frac{1}{C} \left(\frac{\det(1 - \bar{S}^\dagger \bar{S})}{|\det(1 - \bar{S}^\dagger S)|^2} \right)^{2N_T}. \quad (4.20)$$

¹⁴Para a matriz de espalhamento do sistema estar descrita pelo núcleo de Poisson, as matrizes de espalhamento dos contatos devem ter ao menos, as mesmas simetrias do que a matriz de espalhamento da cavidade. Ver ref. [66] para mais detalhes.

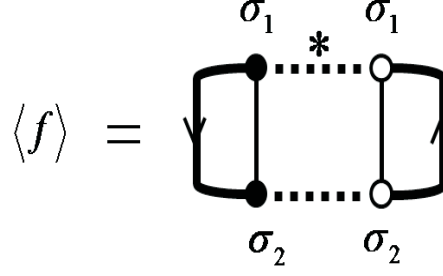


Figura 4.2 Diagrama de escada que surge na média da função f . Usamos a convenção de Einstein para as somas dos índices de spin que pertencem a diferentes laços-T.

Este fato tem consequências significativas nos observáveis, pois o núcleo de Poisson é completamente determinado pela matriz $\bar{S}$, portanto os cumulantes dos observáveis de transporte do sistema também estarão determinados por $\bar{S}$. A escolha de R , T e T' deve apenas garantir a unitariedade da matriz

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \bar{S} & T \\ T' & R \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Adotaremos no resto do capítulo que $R = \bar{S}$, e referiremo-nos a uma ou outra sem distinção.

4.4 MÉDIA SOBRE O GRUPO UNITÁRIO

O cálculo de qualquer observável de transporte do sistema através do método diagramático, exige fazer médias de polinômios das matrizes S_0 . A eq. (4.15) pode ser reescrita como:

$$(S_0)_{nm,ij,\sigma_1\sigma_2} = U_{nm,ij} \delta_{\sigma_1\sigma_2}, \quad (4.22)$$

onde os índices (n, m) , (i, j) e (σ_1, σ_2) representam os espaços de modos de propagação, direção de propagação e spin respectivamente. Para levar em conta o índice de spin nas representações diagramáticas, usamos a simbologia introduzida na seção 3.5, conforme mostramos na fig. 3.5a. A principal diferença na interpretação da simbologia com relação à dada no capítulo 3, é que os índices σ representam agora o grau de liberdade de spin, ao invés de referir-se aos índices das cavidades.

As matrizes S_0 têm apenas blocos diagonais não nulos (ver eq. (4.22)), portanto cada ponto preto e branco da mesma linha tracejada terá o mesmo índice de spin. Isto não acontece com as matrizes genéricas A . O índice de spin é explicitado porque a matriz U pertence ao ensemble $\mathbf{ECU}(N_T)$, enquanto que S_0 pertence a um subespaço de $\mathbf{ECU}(2N_T)$.

Considere por exemplo a média da função $f = \hat{\text{Tr}} [A S_0 B (S_0)^\dagger]$. Usando (4.22) podemos escrever:

$$\langle f \rangle = \langle \text{Tr} [A_{\sigma_1, \sigma_2} U B_{\sigma_2, \sigma_1} U^\dagger] \rangle, \quad (4.23)$$

onde usamos a convenção de Einstein para somar sobre os índices de spin σ_1 e σ_2 , e o símbolo Tr representa o traço sobre todos os blocos exceto o de spin. Como U pertence ao **ECU**, o único diagrama (tipo escada) que surge é o mostrado na fig. 4.2. Note que o laço-U tem índices diferentes de spin, isto é consequência de que os blocos diagonais da matriz S_0 são dados pela mesma matriz U . Introduzindo a notação vetorial

$$\begin{cases} \mathcal{A} = (\text{Tr}[A_{1,1}], \text{Tr}[A_{1,2}], \text{Tr}[A_{2,1}], \text{Tr}[A_{2,2}]), \\ \mathcal{B} = (\text{Tr}[B_{1,1}], \text{Tr}[B_{1,2}], \text{Tr}[B_{2,1}], \text{Tr}[B_{2,2}]), \end{cases} \quad (4.24)$$

temos então que:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N_T} \mathcal{A} \cdot \mathcal{B}^\top, \quad (4.25)$$

onde o símbolo “ $\top$ ” representa a operação de transposição.

4.5 CÁLCULO DA CONDUTÂNCIA

Calculemos agora a condutância de um sistema de dois terminais, cujos reservatórios são ferromagnéticos com magnetizações $\vec{m}_a$ e $\vec{m}_b$. Tomaremos $\vec{m}_a$ como sendo paralelo ao eixo z , e consideraremos que $\vec{m}_b$ encontra-se no plano $x - z$. Portanto na eq. (4.13) a direção do vetor $\vec{n}$ coincide com a direção do eixo y . Nesta geometria o operador de rotação adquire a forma

$$\hat{R}(\theta) = I_{N_b} \otimes \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Os blocos da matriz $\hat{r}_b$ são transformados como:

$$\begin{cases} r_b^{\uparrow\uparrow}(\theta) = r_b^{\uparrow\uparrow}(0) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + r_b^{\downarrow\downarrow}(0) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \\ r_b^{\downarrow\downarrow}(\theta) = r_b^{\uparrow\uparrow}(0) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + r_b^{\downarrow\downarrow}(0) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \\ r_b^{\uparrow\downarrow}(\theta) = r_b^{\downarrow\uparrow}(\theta) = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) (r_b^{\uparrow\uparrow}(0) - r_b^{\downarrow\downarrow}(0)). \end{cases} \quad (4.27)$$

Na nossa representação padrão, a matriz $\bar{S}$ tem a forma

$$\bar{S} = \left(\begin{array}{cc|cc} r_a^{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & r_b^{\uparrow\uparrow}(\theta) & 0 & r_b^{\uparrow\downarrow}(\theta) \\ \hline 0 & 0 & r_a^{\downarrow\downarrow} & 0 \\ 0 & r_b^{\downarrow\uparrow}(\theta) & 0 & r_b^{\downarrow\downarrow}(\theta) \end{array} \right), \quad (4.28)$$

onde omitimos o argumento angular nulo para os blocos do conector a . As matrizes T e T' têm exatamente a mesma estrutura que $\bar{S}$, bastando substituir a letra r por t e t'

respectivamente. Analogamente a como é feito na ref. [52], definimos as matrizes de projeção C_a e C_b para extrair a informação dos blocos de transmissão das matrizes de espalhamento. Estas matrizes são dadas por

$$C_a = \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{I}_{N_a} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \mathbf{I}_{N_a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right), \quad (4.29)$$

e

$$C_b = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}_{N_b} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{I}_{N_b} \end{array} \right). \quad (4.30)$$

Usando o fato de que $C_a \bar{S} C_b = 0$, a fórmula de LB pode ser escrita como

$$G = \frac{e^2}{h} \hat{\text{Tr}} [C_a \delta S C_b \delta S^\dagger], \quad (4.31)$$

onde $\delta S = S - \bar{S}$. Substituindo a eq. (4.18) em (4.31), desenvolvendo em séries as expressões para δS e $\delta S^\dagger$, obtemos

$$\langle G \rangle = \frac{e^2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \langle \text{Tr} [A_{\sigma_1, \sigma_2} U R_{\sigma_2, \sigma_3} \dots U B_{\sigma_{n+2}, \sigma_{n+3}} U^\dagger R_{\sigma_{n+3}, \sigma_{n+4}}^\dagger U^\dagger \dots R_{\sigma_{2n+2}, \sigma_{2n+3}}^\dagger U^\dagger] \rangle, \quad (4.32)$$

onde definimos $A = T' C_a (T')^\dagger$ e $B = T^\dagger C_b T$. Também desconsideramos os termos com número diferente de matrizes U e $U^\dagger$, visto que se anulam na média. Os termos dominantes em (4.32) são representados por diagramas tipo escada, similares ao mostrado na fig. 4.3. As linhas grossas dirigidas na parte central superior (inferior) do diagrama representam blocos da matriz $R^\dagger$ (R), enquanto que a linha do extremo esquerdo (direito) representa os blocos da matriz A (B).

Definamos agora a seguinte matriz auxiliar $\mathcal{L}$:

$$\mathcal{L}_{s_1, s_2} \equiv \text{Tr} [R_{\sigma_1, \sigma_2} R_{\sigma_3, \sigma_4}^\dagger]. \quad (4.33)$$

O índice s_1 está determinado pelo par (σ_1, σ_4) enquanto que s_2 é determinado por (σ_2, σ_3) . Para cada par é subentendida a ordem $(1, 1) \rightarrow (1, 2) \rightarrow (2, 1) \rightarrow (2, 2)$. Usando então as definições (4.33) e (4.24), a série (4.32) pode facilmente ser calculada, de maneira que a condutância pode ser escrita como:

$$\langle G \rangle = \frac{e^2}{h} \mathcal{A} \cdot (N_T \mathbf{I}_4 - \mathcal{L}) \cdot \mathcal{B}^\top. \quad (4.34)$$

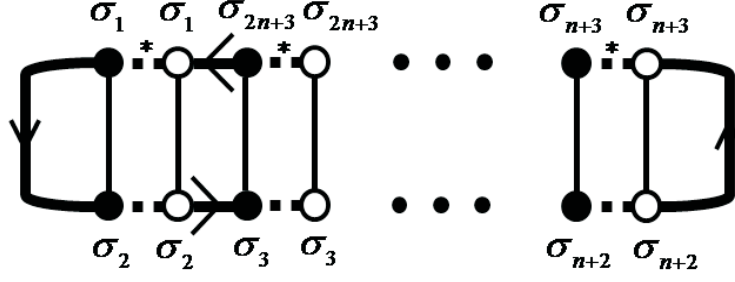


Figura 4.3 Diagrama de escada que aparece no cálculo da condutância para um sistema FNF.

As expressões para $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ e $\mathcal{L}$ podem ser encontradas no apêndice B. A fórmula (4.34) reproduz todos os casos discutidos no capítulo 2 para um nó unido a duas camadas magnéticas. Note que previamente tínhamos considerado uma geometria diferente entre a direção do fluxo de corrente e as magnetizações (no capítulo 2 a configuração foi **CPP**). Contudo, verifica-se que as expressões de condutância são idênticas. Isso não significa que não exista diferença física entre estes casos. Na equação para condutância aparecem dois tipos informação. Primeiro, o ângulo relativo entre as magnetizações, e segundo o tensor de condutância para os dois contatos. Cálculos deste último a partir de primeiros princípios são sensíveis às diferenças geométricas mencionadas acima.

4.6 CÁLCULO DO FATOR FANO

Numa medição da corrente de carga eletrônica existem várias fontes que dão lugar a ruído, tais como as flutuações térmicas, o movimento aleatório de impurezas que causa o “ruído $1/f$ ” e a discretização da carga que unida às propriedades quânticas dos portadores provoca o ruído de disparo.

Comumente, as flutuações temporais de corrente são (parcialmente) descritas usando a *densidade espectral do ruído* $P(\omega)$, que é definida como a transformada de Fourier do segundo momento do desvio em relação à média do valor da corrente, portanto

$$P(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle \Delta I(t_0) \Delta I(t_0 + t) \rangle_{\text{est}} dt, \quad (4.35)$$

onde $\Delta I(t) = I(t) - \langle I(t) \rangle_{\text{est}}$.

Em nossa cavidade caótica, podemos distinguir as frequências altas das baixas usando a escala de energia determinada pelo tempo de permanência do elétron na cavidade. Entenderemos então por baixa frequência àquelas que satisfazem a condição $\omega \ll 1/\tau_{\text{perm}}$. O ruído $1/f$ domina a frequências muito baixas, tipicamente menores que 10 kHz [67], e depende notavelmente destas. Por sua vez, no regime linear o ruído térmico é caracterizado pelo teorema de Nyquist-Johnson (um caso particular do teorema flutuação-dissipação). A densidade espectral do ruído térmico não depende da frequência (ruído branco), e é dada por [50]:

$$P = 4k_B T G, \quad (4.36)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e G é a condutância do sistema. Podemos inferir então que o ruído térmico porta apenas informação da temperatura do sistema e da condutância do mesmo, e que a temperaturas muito baixas ele pode ter um valor desprezível em comparação com as outras fontes.

Para frequências maiores do que 10 kHz e ainda muito menores do que $1/\tau_{\text{perm}}$, o ruído $1/f$ não domina mais, desaparecendo a dependência com a frequência na densidade espectral do ruído. Nesse regime a discretização da carga tem um peso maior nas flutuações de corrente. Se tomássemos como ponto de partida a eq. (4.35) e seguíssemos a mesma linha de raciocínio da seção 4.2, obteríamos no limite de frequência nula a contribuição do ruído térmico e do ruído de disparo para a potência do ruído, definida por $P \equiv P(0)$, como mostrado em detalhes na ref. [50]. A fórmula (4.36) é válida no caso limite em que a diferença de potencial V é nula e a temperatura é finita. No limite oposto para temperatura nula e V finito, a potência do ruído é completamente determinada pelo ruído de disparo, e é dada por:

$$P = P_0 \hat{\text{Tr}}[\hat{t}\hat{t}^\dagger(\hat{1} - \hat{t}\hat{t}^\dagger)], \quad (4.37)$$

onde $P_0 = 2eVG_0$ ⁵.

Quando os autovalores de transmissão da amostra são muito pequenos, os eventos de transmissão dos portadores de carga acontecem em instantes de tempo muito distantes, de forma que não existe correlação entre eles. Nesse caso temos que

$$P \approx P_0 \hat{\text{Tr}}[\hat{t}\hat{t}^\dagger] = 2eVG, \quad (4.38)$$

de maneira que o valor médio do ruído de disparo é proporcional à corrente média. Este processo de transmissão de carga se conhece como *poissoniano*, e é descrito de forma detalhada na seção 6.2. Portanto, se para uma dada amostra se cumpre que $P < 2eVG$, podemos concluir que existe correlação entre os eventos de transmissão. A razão física que justifica tal correlação nos sistemas que analisamos neste capítulo (e em toda a tese) é o *princípio de exclusão de Pauli*, pois a transmissão de um elétron através da amostra está condicionada pela ocupação ou desocupação do estado no guia para o qual ele será transmitido. É conveniente definir outra quantidade normalizada pelo ruído de disparo de um processo poissoniano, conhecida como *fator Fano*, da seguinte forma:

$$F = \langle P \rangle / 2eV \langle G \rangle. \quad (4.39)$$

Para obter o fator Fano, necessitamos calcular a média do termo $\hat{\text{Tr}}[(\hat{t}\hat{t}^\dagger)^2]$, visto que a média do primeiro termo de (4.37) foi calculada na seção anterior. O procedimento é o mesmo que foi usado no cálculo da condutância. Usamos as matrizes de projeção e a expressão para δS . Desta forma temos que

⁵No capítulo 5 consideramos $G_0 = e^2/h$. Nos restantes capítulos usamos a definição apresentada no capítulo introdutório, *i.e.* $G_0 = 2e^2/h$.

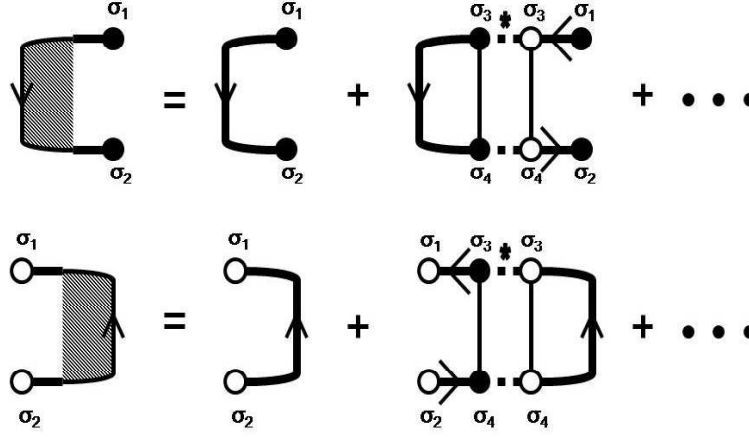


Figura 4.4 Representação diagramática das matrizes F_{σ_1, σ_2}^L (parte superior) e F_{σ_1, σ_2}^R (parte inferior) para um sistema FNF.

$$\langle G/G_0 - P/P_0 \rangle = \left\langle \hat{\text{Tr}} \left[(C_a \delta S C_b \delta S^\dagger)^2 \right] \right\rangle. \quad (4.40)$$

Desenvolvemos a matrizes δS e $\delta S^\dagger$ em série, obtendo quatro somas infinitas. Simbolicamente, a expressão que resulta dessa expansão se representa de maneira similar ao do diagrama da fig. 4.3, desconsiderando as linhas contínuas finas, e levando-se em conta que agora existirão dois blocos de matrizes A e dois de matrizes B , alternados por conjuntos de blocos de R e U ou $R^\dagger$ e $U^\dagger$. De todos os elementos das somas, apenas sobreviverão à média aqueles que tenham o mesmo número de matrizes U e $U^\dagger$. É conveniente introduzir somas infinitas denotadas por F_{σ_1, σ_2}^L e F_{σ_1, σ_2}^R , representadas diagramaticamente na parte superior e inferior na fig. 4.4, respectivamente. Os seis tipos de diagramas não cruzados, denominados também como diagramas planares, que resultam da média são representados na fig. 4.5. Note que todos os diagramas exceto o primeiro, são representados por um laço-T central, que é conectado a dois, três ou quatro estruturas F^L e F^R . No primeiro diagrama a estrutura central é um laço-U de comprimento 2.

Para fazer o cálculo dos diagramas, vamos introduzir uma notação matricial, similar a como foi feito no cálculo da condutância. Definimos então a seguinte matriz de tamanho 16×16 :

$$\mathcal{T}_{s_1 s_2}^2 \equiv \text{Tr} \left(R_{\sigma_1 \sigma_2} R_{\sigma_3 \sigma_4}^\dagger R_{\sigma_5 \sigma_6} R_{\sigma_7 \sigma_8}^\dagger \right), \quad (4.41)$$

as matrizes 16×4 :

$$\begin{cases} \mathcal{T}_{s_1 s_2}^3 \equiv \text{Tr} \left(B_{\sigma_1 \sigma_2} R_{\sigma_3 \sigma_4} R_{\sigma_5 \sigma_6}^\dagger \right), \\ \mathcal{T}_{s_1 s_2}^4 \equiv \text{Tr} \left(R_{\sigma_1 \sigma_2}^\dagger R_{\sigma_3 \sigma_4} A_{\sigma_5 \sigma_6} \right), \end{cases} \quad (4.42)$$

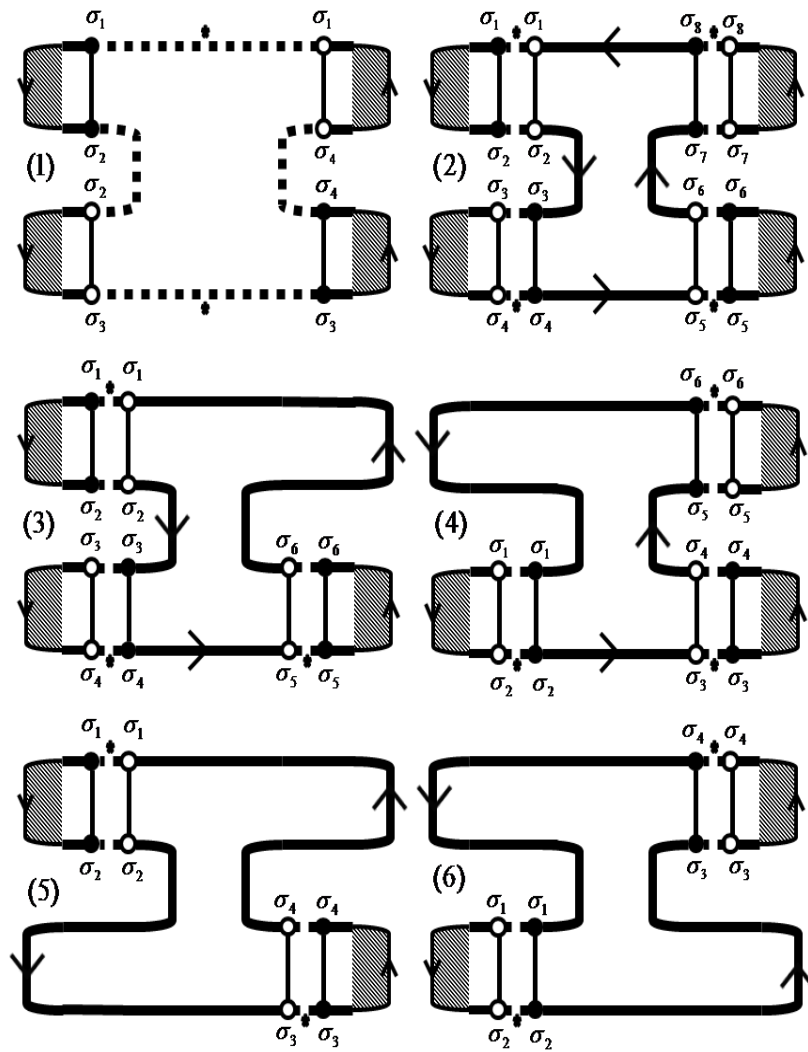


Figura 4.5 Diagramas planares gerados a partir da média de $\hat{\text{Tr}} \left[(\hat{t}\hat{t}^\dagger)^2 \right]$ para um sistema FNF.

e as matrizes 4×4 :

$$\begin{cases} \mathcal{T}_{s_1 s_2}^5 \equiv \text{Tr} (B_{\sigma_1 \sigma_2} B_{\sigma_3 \sigma_4}), \\ \mathcal{T}_{s_1 s_2}^6 \equiv \text{Tr} (A_{\sigma_1 \sigma_2} A_{\sigma_3 \sigma_4}). \end{cases} \quad (4.43)$$

Também é conveniente definir os seguintes vetores de tamanho 1×4 :

$$\begin{cases} \mathcal{F}_s^L \equiv \text{Tr} (F_{\sigma_1 \sigma_2}^L), \\ \mathcal{F}_s^R \equiv \text{Tr} (F_{\sigma_1 \sigma_2}^R), \end{cases} \quad (4.44)$$

e o vetor com 16 componentes:

$$\mathcal{F}_s^{LR} \equiv \text{Tr} (F_{\sigma_1 \sigma_2}^L) \text{Tr} (F_{\sigma_3 \sigma_4}^R). \quad (4.45)$$

Para o primeiro diagrama, definimos a matriz 4×4

$$\mathcal{T}_{s_1 s_2}^1 \equiv \text{Tr} (F_{\sigma_1 \sigma_2}^L F_{\sigma_3 \sigma_4}^L). \quad (4.46)$$

Na eq. (4.41), fixamos as linhas pelos índices $(\sigma_4 \sigma_5 \sigma_6 \sigma_7)$ e as colunas pelos índices restantes. Nas eqs. (4.44), as linhas são fixadas pelos índices $(\sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5)$ e as colunas por $(\sigma_1 \sigma_6)$. Nas eqs. (4.44), (4.45) e (4.46) usamos a mesma convenção que para a matriz $\mathcal{L}$ na seção anterior. Vale salientar que apesar do grande número de elementos das matrizes definidas acima, apenas poucos deles são independentes. Em particular, a matriz (4.41) que contém 256 elementos, possui apenas 11 elementos livres, os restantes podem ser gerados a partir da simetria de reversão de spin, operações de conjugação, as propriedades de traço e as estruturas das matrizes A , B e R . Para mais detalhes veja apêndice C.

Usando a notação anterior, os diagramas podem ser representados através dos produtos matriciais mostrados na Tabela 4.1, onde os pesos dos diagramas estão determinados por $W_1 = 1/N_T$ e $W_2 = -1/N_T^3$. Também são escritas as multiplicidades de cada diagrama. Perceba que para o cálculo dos diagramas necessitamos, além do tensor de condutância dos contatos, parâmetros da forma:

$$\gamma_i^{s_1 s'_1 s_2 s'_2} = \text{Tr} \left[r_i^{s_1} (r_i^{s'_1})^\dagger r_i^{s_2} (r_i^{s'_2})^\dagger \right], \quad (4.47)$$

que são complexos em geral, e não são todos independentes. A necessidade de introduzir estes parâmetros pode ser vista com mais clareza na eq. (4.41). Passemos agora a analisar o fator Fano em dois casos particulares, onde tanto os parâmetros (4.47) quanto o tensor de condutância podem ser calculados explicitamente

4.6.1 Contatos balísticos ideais

Um contato balístico ideal pode ser inteiramente caracterizado por dois números, denotados por $N^\uparrow$ e $N^\downarrow$, que representam o número de canais abertos para elétrons com spin

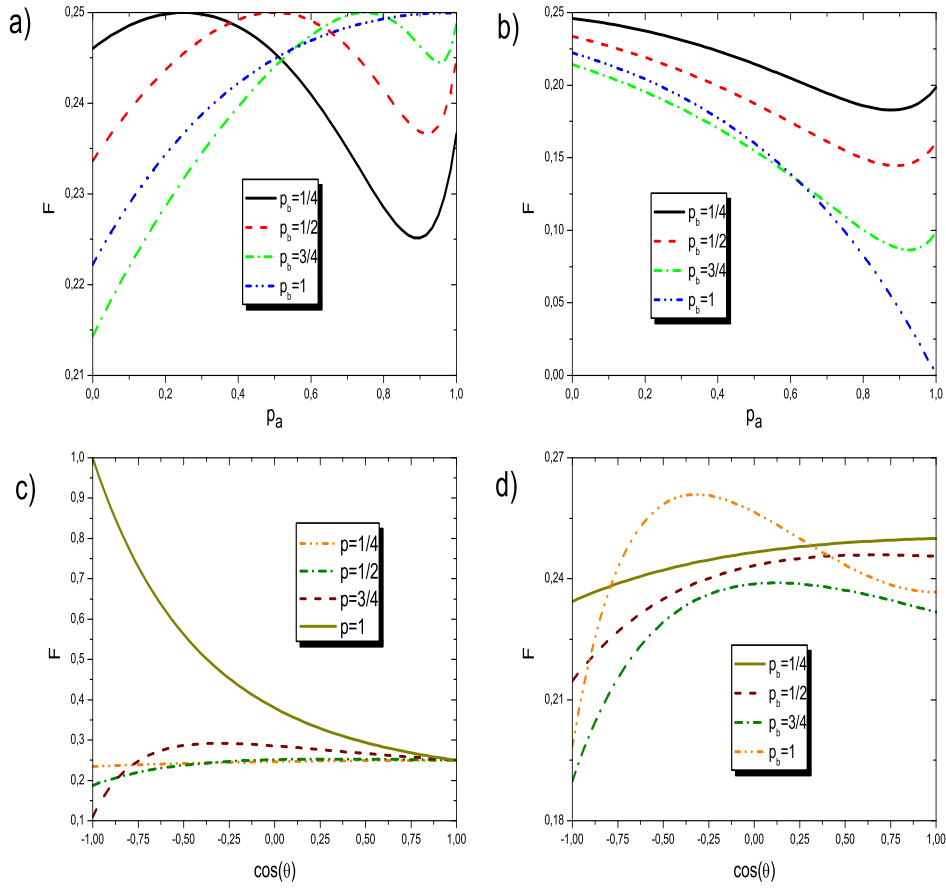


Figura 4.6 Fator Fano para contatos balísticos. a) Fixamos $\theta = 0$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . b) Fixamos $\theta = \pi$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . c) Escolhemos os contatos simétricos e variamos o ângulo θ entre as magnetizações. d) Escolhemos contatos com diferentes polarizações, fazemos $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos o ângulo θ entre as magnetizações.

1	$W_2 \mathcal{F}^R \cdot \mathcal{T}^1 \cdot (\mathcal{F}^R)^\top$
2	$W_1^4 \mathcal{F}^{LR} \cdot \mathcal{T}^2 \cdot (\mathcal{F}^{LR})^\top$
3	$2 W_1^3 \mathcal{F}^{LR} \cdot \mathcal{T}^3 \cdot (\mathcal{F}^L)^\top$
4	$2 W_1^3 \mathcal{F}^{LR} \cdot \mathcal{T}^4 \cdot (\mathcal{F}^R)^\top$
5	$W_1^2 \mathcal{F}^L \cdot \mathcal{T}^5 \cdot (\mathcal{F}^L)^\top$
6	$W_1^2 \mathcal{F}^R \cdot \mathcal{T}^6 \cdot (\mathcal{F}^R)^\top$

Tabela 4.1 Expressões algébricas associadas aos diagramas representados na fig. 4.5, incluindo suas multiplicidades e pesos.

orientados para “acima” e para “baixo” respectivamente. A matriz de reflexão pode ser modelada como [36]:

$$\hat{r} = \begin{pmatrix} 0_{N^\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_{N^\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0_{N^\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_{N^\uparrow} \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

A partir desse modelo e da expressão (2.7) para o tensor de condutância, obtemos que

$$\hat{G} = G_0 \begin{pmatrix} N^\uparrow & N^\uparrow \\ N^\uparrow & N^\downarrow \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} (1+p)/2 & (1+p)/2 \\ (1+p)/2 & (1-p)/2 \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

onde consideramos $N^\uparrow > N^\downarrow$, $g = G_0(N^\uparrow + N^\downarrow)$ e $p = (N^\uparrow - N^\downarrow)/(N^\uparrow + N^\downarrow)$. Pode ser mostrado também que os parâmetros (4.47) para $s_1 = s'_1 = s_2 = s'_2 = \downarrow$ são dados por [61]:

$$\gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = N^\uparrow, \quad (4.50)$$

e para qualquer outro conjunto de índices

$$\gamma^{s_1 s'_1 s_2 s'_2} = N^\downarrow. \quad (4.51)$$

Com esta informação já podemos calcular explicitamente o fator Fano. Todavia, as expressões finais são proibitivamente grandes mesmo no caso simétrico e serão apresentadas num apêndice. Aqui nos limitaremos apenas a escrever a dependência angular, que tem a forma:

$$F^{\text{bal}}(\theta) = \frac{\sum_{n=0}^8 E_n^{\text{bal}} \sin^{2n}(\frac{\theta}{2})}{\sum_{n=0}^8 H_n^{\text{bal}} \sin^{2n}(\frac{\theta}{2})}. \quad (4.52)$$

Na expressão anterior os coeficientes E_n^{bal} e H_n^{bal} dependem da polarização p_i e da condutância g_i de cada contato. Nos cálculos admitimos que $g_a = g_b = g$. As expressões explícitas para os coeficientes podem ser encontradas na tabela D.2 do apêndice D.

Na fig. 4.6a representamos o fator Fano para magnetizações paralelas, fixando o valor de p_b e variando p_a . Note que o fator Fano tem um máximo de valor $1/4$ quando as polarizações dos conectores são iguais. Este valor coincide, como deveríamos esperar, com o fator Fano de um ponto quântico caótico acoplado a reservatórios normais [50]. Qualquer diferença entre as polarizações suprime o fator Fano. Na medida em que variamos p_a desde p_b até 1, o valor de $F^{\text{bal}}(0)$ passa por um mínimo.

Fazemos uma análise similar para $F^{\text{bal}}(\pi)$ na fig. 4.6b, onde percebe-se também um comportamento não monotônico. Exceto no caso $p_b = 1$, as curvas passam por um mínimo antes de p_a atingir o valor 1. Quando $p_a = p_b = 1$, o fator Fano se anula. Isto pode ser entendido através do modelo de dois canais. Quando $p \sim 1$ temos que $N^\downarrow \ll N^\uparrow$, e portanto o processo de transferência de carga em cada canal é dominado pelos $N^\downarrow$ canais. Então o sistema todo se comporta como um simples contato ideal com $2N^\downarrow$ canais abertos (ver fig. 2.2b), o ruído de disparo desaparece e portanto o fator Fano se anula. Este resultado pode ser expresso matematicamente como: $\lim_{p \rightarrow 1} \lim_{\theta \rightarrow \pi} F^{\text{bal}}(\theta) = 0$. Curiosamente, algo diferente acontece se mudarmos a ordem dos limites fazendo tender primeiramente a polarização a 1 e depois o ângulo a π . Na fig. 4.6c, onde é plotado $F^{\text{bal}}(\theta)$ como função do cosseno do ângulo θ , para as polarizações iguais, podemos ver que quando $p = 1$ e $\cos(\theta) \rightarrow -1$ o valor de $F^{\text{bal}}(\theta)$ tende a 1. Portanto podemos escrever que $\lim_{\theta \rightarrow \pi} \lim_{p \rightarrow 1} F^{\text{bal}}(\theta) = 1$. Para entender este resultado, vejamos da eq. (2.18) que a corrente média é muito pequena quando substituímos $p = 1$ e o ângulo é próximo a π . Isto pode ser interpretado como se apenas canais de baixa transmissividade estão abertos. Neste regime o sistema todo se comporta como uma barreira de tunelamento, donde segue que o fator Fano é 1. A observação da não comutatividade dos limites na polarização e o ângulo para os valores 1 e π respectivamente foi feita na ref. [61]. No caso assimétrico este tipo de comportamento não acontece.

Um outro resultado importante, descrito na ref. [61] para contatos balísticos simétricos, consiste na transição entre o comportamento monotônico e não monotônico do fator Fano como função do cosseno do ângulo θ . Foi encontrado no caso simétrico que quando a polarização atinge o valor crítico $p^c = 1/3$, aparece um máximo para $\theta = 0$. Na medida em que a polarização é aumentada a partir deste valor crítico, o máximo se desloca desde $\cos(\theta) = 1$ até $\cos(\theta) = -1$. Este comportamento é preservado no caso assimétrico, de maneira que se achamos o valor das polarizações para os quais o máximo do fator Fano aparece na configuração paralela das magnetizações, podemos descrever a transição entre o comportamento monotônico e não monotônico do fator Fano. O lugar geométrico que descreve tal transição no plano das polarizações é apresentado na fig. 4.7 por uma linha sólida, enquanto que a linha tracejada representa o caso simétrico.

4.6.2 Junções de tunelamento

O bloco de reflexão da matriz de espalhamento de uma junção de tunelamento pode ser modelado supondo que

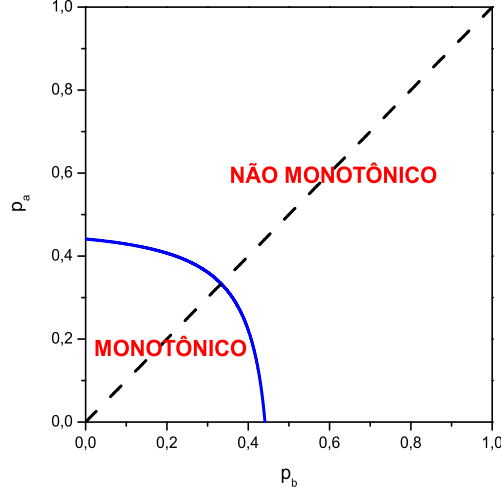


Figura 4.7 Transição entre o comportamento monotônico e não monotônico do fator Fano em relação a $\cos(\theta)$, representada pela linha sólida no plano das polarizações p_a e p_b . A linha tracejada representa o caso simétrico.

$$r^s = \mathbf{I} - \delta r^s, \quad (4.53)$$

com a condição de que $\delta r^s \ll 1$. Este modelo permite obter expressões para o tensor de condutância e os parâmetros (4.47). Substituindo (4.53) em (2.7), desenvolvendo em série de δr^s e desconsiderando os termos de menor ordem, obtém-se que [37]

$$\hat{G} = \frac{g}{2} \begin{pmatrix} (1+p) & 1 \\ 1 & (1-p) \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

onde $g = G^{\uparrow\uparrow} + G^{\downarrow\downarrow}$ e $p = (G^{\uparrow\uparrow} - G^{\downarrow\downarrow})/g$. Supomos conhecidos os elementos $G^{\uparrow\uparrow}$ e $G^{\downarrow\downarrow}$. O mesmo procedimento pode ser seguido para calcular $\gamma^{s_1 s'_1 s_2 s'_2}$. Pode-se mostrar que os parâmetros independentes são dados por [61]

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = N - g(1+p), \\ \gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = N - g(1-p), \\ \gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} = \gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = \gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow} = N - g, \\ \gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow} = N - g(2+p)/2, \\ \gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow} = N - g(2-p)/2. \end{array} \right. \quad (4.55)$$

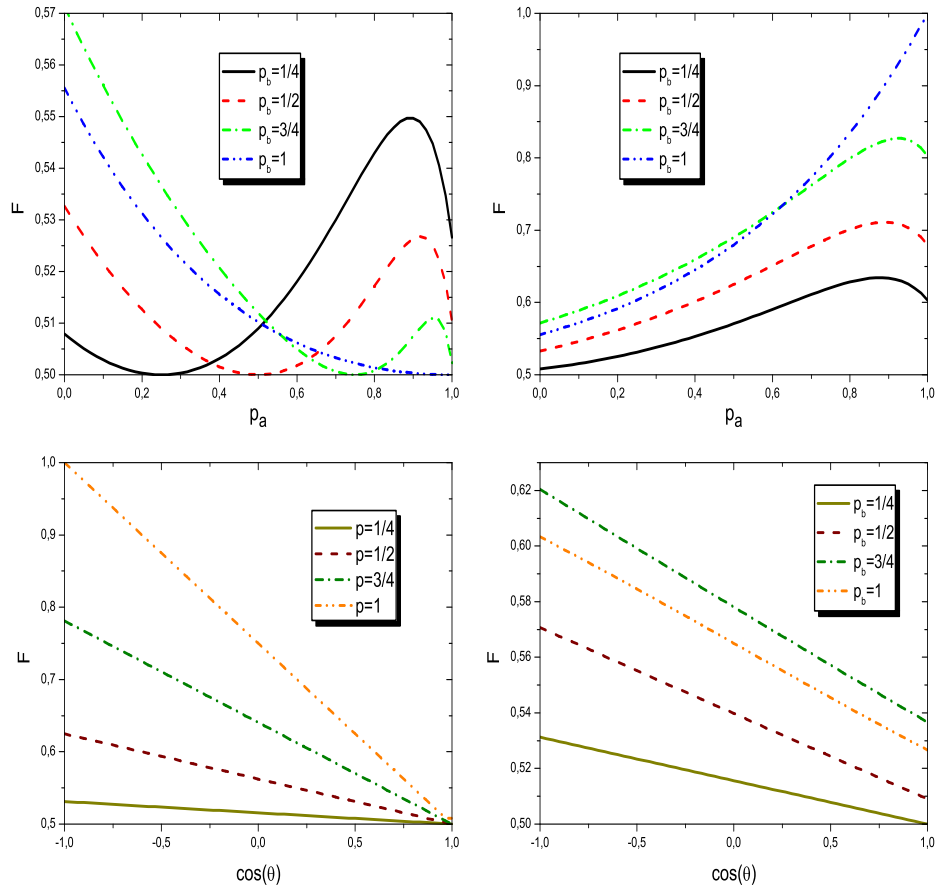


Figura 4.8 Fator Fano para junções de tunelamento. a) Admitimos que $\theta = 0$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . b) Fixamos $\theta = \pi$, $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos p_a . c) Escolhemos contatos simétricos e variamos o ângulo entre as magnetizações. d) Consideramos contatos com diferentes polarizações, fazemos $p_b = \frac{1}{4}$ e variamos o ângulo entre as magnetizações.

Similarmente ao caso de contatos balísticos, a expressão geral para o fator Fano é bastante complexa, mas sua dependência angular pode ser escrita compactamente como

$$F^{\text{tun}}(\theta) = \frac{\sum_{n=0}^5 E_n^{\text{tun}} \sin^{2n}(\frac{\theta}{2})}{\sum_{n=0}^4 H_n^{\text{tun}} \sin^{2n}(\frac{\theta}{2})}, \quad (4.56)$$

onde consideraremos $g_a = g_b = g$ e os coeficientes E_n^{tun} e H_n^{tun} são apresentados na tabela D.1 do apêndice D. Quando os contatos são iguais, reproduzimos o resultado obtido na ref. [61]

$$F^{\text{tun}}(\theta) = \frac{1}{2} \left(1 + p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right). \quad (4.57)$$

Antes de fazer uma análise do comportamento angular, olhemos a dependência do fator Fano nas configurações paralelas e antiparalelas nas fig. 4.8a e b, respectivamente. Quando $\theta = 0$ e as junções têm igual polarização, F^{tun} atinge um mínimo de valor $1/2$. Isto reproduz o resultado para um ponto acoplado a reservatórios normais através de junções de tunelamento. Depois de passar por um mínimo, o fator Fano alcança um máximo quando p_a é aumentado. Qualquer assimetria entre as polarizações tira o fator Fano do seu valor mínimo.

Na configuração antiparalela as curvas atravessam um máximo antes de chegar ao valor da polarização $p_a = 1$, exceto quando $p_b = 1$, quando o máximo existe para $p_a = p_b = 1$. Este último resultado pode ser explicado usando o modelo de dois canais, similarmente a como foi feito no caso de contatos balísticos simétricos com polarizações iguais a 1. No contexto de junções de tunelamento, assumir $p \sim 1$ é considerar que $G^{\uparrow\uparrow} \gg G^{\downarrow\downarrow}$. Desta forma a transferência de carga será dominada por $G^{\downarrow\downarrow}$ em cada canal, assim o sistema todo equivale neste regime a uma simples junção de tunelamento, para a qual o fator Fano é 1.

O fator Fano é plotado na fig. 4.8c e d, para junções simétricas e assimétricas respectivamente. Note que o comportamento na primeira situação é linear como função de $\cos(\theta)$, como se observa da expressão (4.57). O fator Fano é uma reta que une seus valores nas configurações colineares. Quando as polarizações são diferentes, o comportamento é muito parecido, apesar da complexa dependência angular mostrada na eq. (4.56). Existem apenas pequenos desvios não lineares, que são mais visíveis quando uma das polarizações é 1. Para caracterizar estes desvios, definimos $Y(\theta)$ como a função linear que une os valores do fator Fano nas configurações colineares, e a função dos desvios relativos D_R como

$$D_R = \frac{|F^{\text{tun}}(\theta) - Y(\theta)|}{Y(\theta)}. \quad (4.58)$$

Na fig. 4.7, mostramos os valores de D_R em unidades percentuais num gráfico tridimensional, onde fixamos $p_b = 1$ e variamos $\cos(\theta)$ e p_a . Percebe-se claramente que o desvio relativo nunca excede o valor 3%.

As expressões para $F^{\text{bal,tun}}(\theta = 0, \pi)$ podem também ser calculadas usando o modelo de dois canais.

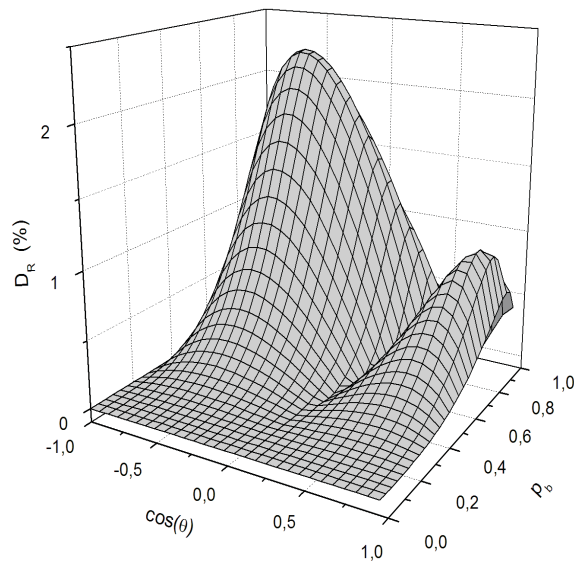


Figura 4.9 Representação tridimensional da função D_R em unidades percentuais. Consideramos $p_a = 1$, variamos p_b e o $\cos(\theta)$.

4.7 PARÂMETROS RELEVANTES

Comumente a matriz de espalhamento de uma nanoestrutura é extremamente complicada. É impossível controlar todos seus elementos no processo experimental de fabricação. No entanto, existe um conjunto de parâmetros denominado código chave, sobre o qual já falamos no capítulo 2, que caracteriza completamente as propriedades de transporte da nanoestrutura. Este conjunto é normalmente constituído dos autovalores de transmissão. Na maioria dos sistemas reais, o código chave é muito difícil de ser calculado. Ainda mais porque a tendência de “integração” de dispositivos miniaturizados anda de mão com o avanço tecnológico. Contudo, cada elemento da nanoestrutura tem em princípio seu próprio código chave, e pode ser caracterizado e controlado de forma independente. Surge então a seguinte pergunta: Será possível descrever completamente a nanoestrutura toda em termos do código chave de cada uma de suas partes resistivas (ou de seus conectores na linguagem da TQC)?

Esta pergunta já foi parcialmente respondida no capítulo 2, aonde vimos que na TQC para sistemas híbridos normal-ferromagnético, devia-se definir uma matriz de condutância [36] que não podia ser expressa apenas como uma função dos autovalores de transmissão. Para o cálculo de observáveis associados a outros fenômenos de coerência de fase a matriz de condutância torna-se insuficiente. Na ref. [61] esta limitação foi superada através da definição de uma matriz de ruído. Os elementos da matriz de condutância e da matriz de ruído para um dado conector podem ser escritos como

$$\begin{cases} G^{s_1 s'_1} = \text{Tr} [I_N - r^{s_1} (r^{s'_1})^\dagger], \\ S^{s_1 s'_1 s_2 s'_2} = \text{Tr} [I_N - r^{s_1} (r^{s'_1})^\dagger r^{s_2} (r^{s'_2})^\dagger], \end{cases} \quad (4.59)$$

onde Tr denota o traço parcial sobre as direções e os modos de propagação.

Todas as grandezas que se expressam através de uma estatística linear nos autovalores de transmissão, podem de forma genérica ser escritas como

$$Q = \sum_n q(\tau_n), \quad (4.60)$$

onde τ_n é o n -ésimo autovalor de transmissão. Dentro desta classe encontram-se todos os cumulantes da estatística de carga transmitida, para os quais as funções $q(\tau_n)$ são polinômios (ver capítulo 6). No contexto da técnica diagramática para médias sobre o grupo unitário, quantidades do tipo (4.60) têm médias determinadas por diagramas planares, que são diagramas não cruzados [52]. Esta topologia não cruzada permite inferir, no caso de uma cavidade multiterminal acoplada a reservatórios normais e ferromagnéticos, quais são os parâmetros necessários para calcular algebricamente os diagramas planares.

Vamos supor que a função $q(\tau_n)$ é bem comportada, de maneira que possa ser desenvolvida em série de Taylor da seguinte forma

$$Q = \sum_n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{q^{(k)}}{k!} (\tau_n)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{q^{(k)}}{k!} \hat{\text{Tr}} [(\hat{t}\hat{t}^\dagger)^k], \quad (4.61)$$

onde usamos a identidade $\sum_n (\tau_n)^k = \hat{\text{Tr}} [(\hat{t}\hat{t}^\dagger)^k]$. Esta equação nos mostra que o valor médio de Q está determinado pelo valor médio do traço das potências de $\hat{t}\hat{t}^\dagger$. Por sua vez, usando as matrizes projetoras podemos escrever

$$\hat{\text{Tr}} [(\hat{t}\hat{t}^\dagger)^k] = \hat{\text{Tr}} [(C_a \delta S C_b \delta S^\dagger)^k]. \quad (4.62)$$

Então, quantos parâmetros são necessários para determinar as infinitas potências anteriormente escritas? É sabido que para uma matriz de ordem $M \times M$, todos os invariantes sob transformações de similaridade, em particular rotações, estão determinadas pelo traço das M primeiras potências da matriz [44]. Este teorema fixa o número de parâmetros livres, dado que o traço de qualquer potência é um invariante. Por sua vez, vimos que qualquer observável do sistema deve estar determinado pelos parâmetros que definem $\bar{S}$, por estar a distribuição da matriz S dada pelo núcleo de Poisson. Diagramaticamente, a função (4.62) é representada como um grande laço, onde haverá $2k$ blocos no espaço de spin das matrizes A e B alternados, separados por conjuntos de elementos dos blocos de R e as matrizes U ou suas conjugadas, dependendo da direção percorrida de A até B ou de B até A . Quando executamos a média, em analogia com o cálculo do ruído, os diagramas planares terão um laço central, que pode ser T ou U , unido a um número de estruturas F^L e F^R que pode variar entre 2 e $2k$. Por causa da forma de (4.62) as estruturas F^L e F^R aparecerão de maneira alternada, portanto nos diagramas em que existe um

laço-T central, os blocos das matrizes R e $R^\dagger$ aparecerão alternadamente também. Além do mais, no máximo podem aparecer k blocos de R e k blocos de $R^\dagger$. Isto implica que a quantidade (4.62) pode ser calculada se conhecemos os parâmetros que determinam os traços da forma $\hat{\text{Tr}}[(RR^\dagger)^n]$, onde $1 \leq n \leq k$. Por sua vez, estes traços são determinados pelos parâmetros

$$\gamma^{s_1 s'_1 s_2 s'_2 \dots s_n s'_n} = \text{Tr} \left[r^{s_1} (r^{s'_1})^\dagger r^{s_2} (r^{s'_2})^\dagger \dots r^{s_n} (r^{s'_n})^\dagger \right], \quad (4.63)$$

com $1 \leq n \leq k$. Denominaremos as quantidades introduzidas na equação anterior como parâmetros γ de ordem n . Como a matriz $\hat{r}$ tem dimensão $2N \times 2N$, o teorema citado anteriormente implica que apenas os parâmetros γ de ordem menor ou igual a $2N$ serão necessários para determinar quantidades da forma (4.62).

Expressões explícitas dos parâmetros γ para contatos balísticos e junções de tunelamento podem ser calculadas, utilizando os modelos para os blocos de reflexão introduzidos na seção anterior. Usando a expressão (4.48) para contatos ideais, podemos mostrar que

$$\gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow\dots\downarrow} = \gamma^{\downarrow\downarrow} = \frac{g}{2}(1+p), \quad (4.64)$$

e para qualquer outra combinação de s_k, s'_k temos

$$\gamma^{s_1 s'_1 s_2 s'_2 \dots s_n s'_n} = \gamma^{\uparrow\uparrow} = \frac{g}{2}(1-p). \quad (4.65)$$

Para junções de tunelamento, substituímos (4.53) em (4.63), expandimos em séries de δr^s e $(\delta r^s)^\dagger$ e mantemos apenas os termos de maior ordem. Dessa forma chegamos a

$$\gamma^{s_1 s'_1 s_2 s'_2 \dots s_n s'_n} = \sum_{k=1}^n \gamma^{s_k s'_k} - (n-1)N \quad (4.66)$$

onde $\gamma^{s_k s'_k}$ são os elementos da matriz

$$\hat{\gamma} = \begin{pmatrix} N - \frac{g}{2}(1+p) & N - \frac{g}{2} \\ N - \frac{g}{2} & N - \frac{g}{2}(1-p) \end{pmatrix}. \quad (4.67)$$

Note que os parâmetros γ de um contato balístico e de uma junção de tunelamento portam apenas 2 e 3 parâmetros livres respectivamente.

Para o sistema estudado neste capítulo, que contém uma única cavidade caótica, mostramos que os observáveis de transporte com estatística linear nos autovalores de transmissão podem ser calculados conhecendo apenas os parâmetros γ que caracterizam cada conector. Isto é uma consequência de que a matriz de espalhamento do sistema está distribuída pelo núcleo de Poisson, e de que os diagramas necessários para calcular tais observáveis são planares. No entanto, para sistemas com mais de uma cavidade caótica, além dos parâmetros γ , outros parâmetros são necessários. Este fato foi mostrado no capítulo 2. Quando estudamos a cadeia de multicamadas vimos que para o cálculo da condutância era necessário conhecer um novo parâmetro, definido através da eq. (2.22).

4.8 SUMÁRIO

Usamos a parametrização de estube para modelar a matriz de espalhamento de um sistema multiterminal, consistindo de uma cavidade caótica acoplada a um número arbitrário de reservatórios ferromagnéticos com magnetizações não colineares e reservatórios normais. Mostramos como adaptar a simbologia usada no método diagramático para levar em conta o grau de liberdade de spin no cálculo dos observáveis. Estudamos o caso particular de um sistema com dois terminais ferromagnéticos. O nosso resultado para a condutância reproduz os resultados reportados na literatura, que foram obtidos através da teoria de circuitos. Também analisamos o fator Fano escolhendo os conectores como sendo contatos balísticos e junções de tunelamento. Observamos, no caso de contatos balísticos, uma transição entre os comportamentos monotônico e não monotônico do fator Fano em relação ao cosseno do ângulo entre as magnetizações dos reservatórios ferromagnéticos. Apresentamos um diagrama no plano das polarizações para descrever essa transição. Encontramos um conjunto de parâmetros, que define um novo código-chave para cada conector, suficientes para calcular qualquer observável com estatística linear nos autovalores de transmissão. Expressões analíticas deste conjunto foram obtidas nos casos particulares de contatos balísticos e junções de tunelamento. Os resultados deste capítulo foram submetidos para publicação na Physical Review B [82].

CAPÍTULO 5

BILHAR DE ANDREEV NA AUSÊNCIA DE SIMETRIA DE REVERSÃO TEMPORAL

5.1 INTRODUÇÃO

Sete anos depois da publicação da teoria **BCS** em 1957 [68], Alexander F. Andreev descobriu um importante mecanismo de reflexão [30] que tem lugar na interface de sistemas híbridos normal-supercondutor. Através desse mecanismo, elétrons e buracos do lado normal estão correlacionados com pares de Cooper do lado supercondutor. De maneira esquemática, a reflexão de Andreev é mostrada na fig. 1.4, onde um elétron proveniente do lado normal é refletido como um buraco com spin e velocidade opostos, criando-se dessa forma um par de Cooper no lado supercondutor. Também nos anos sessenta, descobriram-se os *efeitos de proximidade* [69], os quais se referem a novas características físicas que aparecem no lado normal por causa da proximidade de um supercondutor. Com o desenvolvimento da nanotecnologia, tem sido possível nas últimas décadas a construção de sistemas híbridos NS na escala nanométrica. Isto fez viável o estudo de varias propriedades de transporte quântico, como fenômenos de localização fraca (**LF**), flutuações universais da condutância e flutuações quânticas de carga transmitida. Notáveis avanços tanto teóricos [13, 14, 7, 70, 35, 71] quanto experimentais [72, 73, 74] foram feitos nesse sentido.

Com relação à LF, uma característica surpreendente foi encontrada na ref. [75], onde se mostrou que a correção da condutância de um fio quântico desordenado acoplado a um reservatório supercondutor, existe mesmo quando um campo magnético é aplicado ao sistema e a simetria de reversão temporal é quebrada. A LF foi também calculada para um ponto quântico caótico conectado a reservatórios normal e supercondutor através de contactos ideais, explorando os casos de presença e ausência das simetrias de reversão temporal e de elétron-buraco. Foi comprovado que a supressão da LF não requer apenas que a simetria de reversão temporal seja quebrada, mas também que a voltagem aplicada supere um limiar a partir do qual é quebrada a simetria elétron-buraco [52].

Neste capítulo estudaremos um ponto quântico caótico sobre o qual é aplicado um campo magnético que quebra a simetria de reversão temporal. O ponto está acoplado a dois reservatórios, um deles é normal e o outro supercondutor. Nosso principal interesse está em considerar a existência de barreiras em ambos os contactos, na expectativa de que uma nova fenomenologia possa emergir [76, 77, 78, 79]. Calcularemos a condutância com sua correção de LF e o fator Fano do sistema, usando como técnica o método diagramático para médias sobre o ensemble unitário. Todos os resultados analíticos que serão apresentados mostraram excelente acordo com simulações numéricas feitas usando o algoritmo de Hurwitz [80] para gerar o ensemble circular unitário.

Apresentaremos agora algumas convenções que serão usadas no restante do capítulo,

assim como certas aproximações que esclarecerão o regime de validade de nosso estudo. Vamos usar a letra a para nos referir ao conector do lado do supercondutor convencional, enquanto que a letra b indicará o conector do lado normal (ver fig. 5.1). Assumiremos que as condutâncias adimensionais dos contatos g_a e g_b são muito maiores do que a unidade, o que justificará as aproximações semiclássicas a serem feitas. Além do mais, vamos supor que a condutância de todo o dispositivo é dominada pelas dos contatos, condição que é válida desde que se cumpra $\hbar/\delta\tau_{\text{perm}} \gg \max(g_a, g_b)$, onde τ_{perm} é o tempo médio de permanência das quase-partículas no ponto e δ é o espaçamento médio entre os níveis de energia no ponto. Consideraremos que o campo magnético se anula fora da cavidade e que é aplicado paralelo à direção z , segundo a geometria mostrada na figura 5.1. Admitimos que o tempo de coerência elétron-buraco é muito maior do que o tempo de permanência dos elétrons dentro da cavidade. Analisaremos em detalhe apenas o regime no qual o potencial aplicado ao sistema é o suficientemente fraco como para preservar a simetria eletron-buraco.

5.2 EQUAÇÕES DE BOGOLIUBOV-DE GENNES

Num sistema mesoscópico híbrido NS é necessário levar em conta tanto as condições de contorno quanto as variações espaciais do parâmetro de ordem. Uma forma de fazer isto é usando as equações de Bogoliubov-De Gennes para descrever as dinâmicas dos elétrons e buracos. Estas equações são uma generalização das equações de Hartree-Fock na teoria de muitos corpos, e incluem os efeitos do *potencial de emparelhamento* do supercondutor. As mesmas podem ser escritas como

$$\begin{pmatrix} H & \Delta \\ \Delta^* & -H^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

onde $u(\vec{r})$ e $v(\vec{r})$ são as funções de onda do elétron e do buraco respectivamente, e Δ é o potencial de emparelhamento. O operador H é dado por $H = H_0 - E_F$, sendo E_F a energia de Fermi e H_0 o hamiltoniano de uma partícula, que é dado por

$$H_0 = -(\hbar^2/2m) \left(\nabla + ie\vec{A}(\vec{r})/\hbar c \right)^2 + U(\vec{r}), \quad (5.2)$$

onde $\vec{A}(\vec{r})$ é o potencial vetor do campo magnético e $U(\vec{r})$ é o potencial eletrostático. A energia $E > 0$ é medida relativa à energia de Fermi E_F .

O potencial de emparelhamento anula-se no lado normal da interface NS em distâncias de ordem interatômica, portanto $\Delta = 0$ no lado normal. No lado supercondutor, no entanto, a função $\Delta(x)$ adquire o valor esperado num sólido macroscópico a partir de certa distância da interface. Contudo, este efeito de proximidade pode ser desprezado sem afetar qualitativamente o cálculo dos observáveis [81]. Por tal motivo modelaremos o potencial de emparelhamento usando o modelo de *condições de fronteiras rígidas*, que é dado por

$$\Delta = \Delta_0 e^{i\phi} \theta(x), \quad (5.3)$$

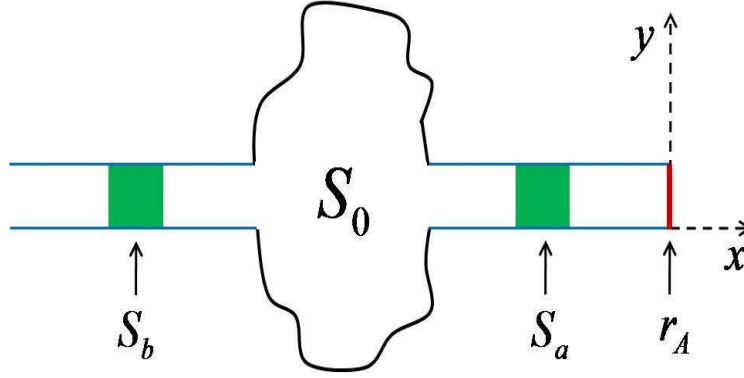


Figura 5.1 Diferentes componentes do sistema unidos por guias ideais. Da esquerda para a direita: conector b do lado normal, cavidade caótica, conector a do lado supercondutor e a interface NS. Em cada caso é indicada a matriz de espalhamento correspondente ao elemento.

onde $\Delta_0 e^{i\phi}$ é o potencial de emparelhamento no supercondutor macroscópico e $\theta(x)$ é a função degrau de Heaviside. Uma voltagem $V < 0$ é aplicada no reservatório normal enquanto que o reservatório supercondutor é aterrado, portanto o sistema é tirado do equilíbrio até atingir um regime estacionário. Demandaremos do valor de $|V|$, além de preservar a simetria elétron-buraco, satisfazer a condição $e|V| \ll \Delta_0$. A energia E das quasipartículas é da ordem de $e|V|$.

5.3 TEORIA DE ESPALHAMENTO

Vamos dividir o sistema em elementos finitos conectados por guias de ondas eletrônicas ideais (ver fig. 5.1). As autofunções da eq. (5.1) no r -ésimo guia normal têm a forma

$$\psi_{n,\sigma}^{r,\alpha} = \begin{pmatrix} \delta_{\sigma,e} \\ \delta_{\sigma,h} \end{pmatrix} \Phi_{n,\sigma}^r(y,z) e^{i\alpha k_n^{r,\sigma} x}, \quad (5.4)$$

onde α , n e σ representam a direção de propagação $+$ ou $-$, o índice dos canais de propagação e o de elétron-buraco, respectivamente. As funções de onda transversais são representadas por $\Phi_n^r(y,z)$ e $k_n^{r,\sigma}$ é o número de onda, que é dado por

$$k_n^{r,\sigma} = (2m/\hbar^2)^{1/2} (E_F - E_n^r + (-1)^{\delta_{\sigma,h}} E)^{1/2}, \quad (5.5)$$

onde E_n^r é a energia de corte do modo n no guia r . Note da expressão acima que no limite $E \rightarrow 0$ a velocidade de grupo é oposta para elétrons e buracos, enquanto que o momento é o mesmo.

5.3.1 Modelo para as matrizes de espalhamento

Agora podemos definir sem ambiguidade as matrizes de espalhamento de cada componente do sistema. Perceba que cada uma delas traz diferentes características ao modelo, como já vimos nos capítulos 3 e 4 em outros sistemas. Assumiremos que existem N_i canais abertos nos guias adjacentes ao i -ésimo conector ($i = a, b$), todos eles com a mesma

transparência Γ_i . Na cavidade normal, as dinâmicas dos elétrons e buracos são coerentes, mas não há processos de conversão ou recombinação, de maneira que a matriz de espalhamento no espaço de Nambu pode ser escrita como [7]:

$$S_0 = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U^* \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

onde U é uma matriz de dimensão $N_T \times N_T$ que pertence ao **ECU** e $N_T = N_a + N_b$. A simetria elétron-buraco encontra-se presente na expressão para S_0 , como se verifica pela relação [13]

$$S_0 = C S_0^* C, \quad (5.7)$$

onde

$$C = \begin{pmatrix} 0 & I_{N_T} \\ I_{N_T} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Aqui I_{N_T} é a matriz identidade com dimensão $N_T \times N_T$. A matriz de espalhamento da cavidade é a responsável pela mistura dos modos de uma maneira ergódica, mas não contribui para a condutância do sistema [7]. Um papel totalmente diferente têm as matrizes de espalhamento dos conectores, pois estes últimos determinam a condutância. Estas matrizes são modeladas da seguinte forma:

$$S_i = \begin{pmatrix} U_i & 0 \\ 0 & U_i^* \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

com

$$U_i = \begin{pmatrix} r_i & t'_i \\ t_i & r'_i \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

e

$$\begin{cases} r_i = r'_i = \sqrt{1 - \Gamma_i} I_{N_i}, \\ t_i = t'_i = i\sqrt{\Gamma_i} I_{N_i}. \end{cases} \quad (5.11)$$

Por outro lado, as quase-partículas dentro da cavidade estão correlacionadas aos pares de Cooper do lado supercondutor. Esta correlação é caracterizada pela matriz de reflexão de Andreev, a qual pode ser obtida a partir da condição de continuidade na interface NS da solução da eq. (5.1), assumindo $E < \Delta_0$ e $\Delta_0 \ll E_F$. A última desigualdade é conhecida como aproximação de Andreev [30]. A matriz de reflexão pode ser escrita então como

$$r_A = e^{-i \arccos(E/\Delta_0)} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{N_a}. \quad (5.12)$$

Para uma dedução desta fórmula veja a ref. [1]. Como explicado na introdução, vamos trabalhar num regime de transporte linear considerando apenas um dos reservatórios no

estado supercondutor. Podemos então sem perda de generalidade fazer $\phi = 0$ e $E \rightarrow 0$. Nesse caso temos

$$r_A = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{N_a}. \quad (5.13)$$

Uma vez definidas as matrizes de espalhamento dos diferentes elementos do sistema, procedemos a realizar a composição das mesmas. A forma como faremos isto será usando uma parametrização de estube, cuja essência foi apresentada no capítulo 3. Seu uso no contexto de sistemas híbridos normal-supercondutor não é inédito [16, 79]. Em nosso problema, ela nos permitirá aproveitar vários resultados existentes na literatura do método diagramático [52, 76, 82]. Começaremos então com a composição das matrizes de espalhamento do conector a e a matriz de reflexão de Andreev, a qual pode ser feita como

$$r_{Aa} = r_a + t'_a(1 - r_A r'_a)^{-1} r_A t_a. \quad (5.14)$$

A matriz que resulta é “ativa” no espaço de Nambu (elementos fora da diagonal diferentes de zero), e na direção de propagação comporta-se como uma matriz de reflexão. Usando as eqs. (5.11, 5.13) o resultado explícito é

$$r_{Aa} = \begin{pmatrix} \frac{2\sqrt{1-\Gamma_a}}{2-\Gamma_a} & \frac{-i\Gamma_a}{2-\Gamma_a} \\ \frac{-i\Gamma_a}{2-\Gamma_a} & \frac{2\sqrt{1-\Gamma_a}}{2-\Gamma_a} \end{pmatrix} \otimes I_{N_a}. \quad (5.15)$$

O próximo passo é construir a matriz de espalhamento do conector renormalizado com uma estrutura completa na direção de propagação. Para isto criamos blocos de transmissão com amplitudes nulas do seguinte modo

$$S_{Aa} = \begin{pmatrix} 0 & r_{Aa} \\ r_{Aa} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

5.3.2 Parametrização de estube

De agora em diante, vamos uniformizar a estrutura em blocos de todas as matrizes usando a seguinte hierarquia: espaço de Nambu $\rightarrow$ direção de propagação $\rightarrow$ canais de propagação. Desta forma podemos expressar a matriz de todo o sistema como

$$S = \bar{S} + T'(1 - S_0 R')^{-1} S_0 T, \quad (5.17)$$

onde

$$\bar{S} = R' = \left(\begin{array}{cc|cc} r_b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{1-\Gamma_a} I_{N_a}}{2-\Gamma_a} & \frac{-i\Gamma_a I_{N_a}}{2-\Gamma_a} & 0 \\ \hline 0 & \frac{-i\Gamma_a I_{N_a}}{2-\Gamma_a} & r_b^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2\sqrt{1-\Gamma_a} I_{N_a}}{2-\Gamma_a} \end{array} \right), \quad (5.18)$$

e

$$T = T' = \left(\begin{array}{cc|cc} t_b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & t_b^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right). \quad (5.19)$$

As linhas horizontais e verticais nas equações anteriores limitam os blocos no espaço de Nambu. Das eqs. (5.18,5.19) pode-se facilmente mostrar a unitariedade da matriz

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \bar{S} & T' \\ T & R \end{pmatrix}, \quad (5.20)$$

que se interpreta como a conservação da carga transferida. Isto não deve ser confundido com o fato de que no estado **BCS** o número de partículas não é conservado.

5.4 TERMO DOMINANTE DA CONDUTÂNCIA

No limite de temperatura nula, o termo dominante da condutância é dado por [7]:

$$G = 2G_0 \text{tr} [S_{eh}^{bb} (S_{eh}^{bb})^\dagger], \quad (5.21)$$

onde o bloco S_{eh}^{bb} contém as amplitudes de probabilidade de que um elétron vindo do reservatório normal, seja refletido como buraco para o mesmo lado normal depois de entrar na cavidade. Note a analogia da eq. (5.21) com a fórmula de Landauer-Büttiker para reservatórios normais. A principal diferença é que no caso NS a conversão elétron-buraco dá lugar ao processo de transferência de carga em unidades de $2e$. A dedução das fórmulas para condutância e ruído de disparo podem ser encontradas na ref. [83]. A matriz S_{eh}^{bb} pode ser extraída da matriz de espalhamento total S usando os projetores

$$C_e = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_{N_b} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (5.22)$$

e

$$C_h = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_{N_b} \end{array} \right). \quad (5.23)$$

Desta forma, a eq. (5.21) pode ser rescrita como

$$G = 2G_0 \text{tr} [C_e \delta S C_h \delta S^\dagger]. \quad (5.24)$$

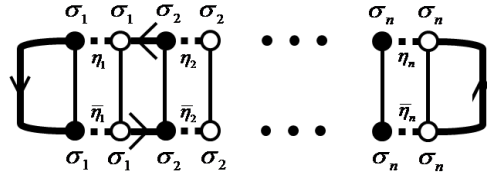


Figura 5.2 Diagrama típico do tipo escada envolvido no cálculo da condutância. Usamos a convenção de Einstein para as somas dos índices de elétron-buraco que pertencem a diferentes laços-T.

5.4.1 Caso unitário versus caso ortogonal

Antes de passar a executar os cálculos, façamos um parêntesis para explicar a diferença entre os casos de sistemas com simetria de reversão temporal (ortogonal) e sem ela (unitário), ambos na presença de simetria elétron-buraco. Na ausência de campo magnético, foi demonstrado por Beenakker [7] que o efeito das reflexões de Andreev pode ser incluído numa renormalização dos autovalores de transmissão do sistema acoplado ao supercondutor. Por exemplo, a condutância pode ser escrita como:

$$G = 2G_0 \text{tr} \left[(tt^\dagger(2 - tt^\dagger)^{-1})^2 \right], \quad (5.25)$$

onde t representa a matriz de transmissão da parte normal. Isto implica que na ausência de campo magnético, os observáveis que são uma estatística linear nos autovalores de transmissão na parte normal preservam essa qualidade no sistema híbrido, o que não acontece no caso unitário. Há uma outra característica que pode ser inferida *a priori* partindo da análise anterior. Como estamos trabalhando num regime linear, a resposta do sistema a uma pequena diferença de potencial aplicada não pode depender desta última. Quando existe simetria de reversão temporal, os autovalores de $tt^\dagger$ da parte normal dependem simetricamente dos parâmetros que caracterizam os dois contatos, pois o único que poderia distinguir os mesmos nesse caso é a diferença de potencial e a função resposta independe dela. Segundo a eq. (5.25), a mesma dependência simétrica ocorrerá para o caso NS. Na presença de um campo magnético não existe mais simetria em relação às transparências das barreiras e ao número de canais abertos em cada uma delas, como veremos em breve.

5.4.2 Adaptação dos diagramas

Voltemos agora à técnica diagramática. A topologia dos diagramas planares necessários para calcular condutância e ruído de disparo é a mesma apresentada nos capítulos anteriores, que é uma consequência de estarmos usando também aqui uma parametrização de estube e também pelo fato de que a simetria de reversão temporal está quebrada. A simbologia diagramática que usaremos será quase a mesma que introduzimos na fig. 3.5a. A cada ponto preto ou branco do diagrama corresponderá um índice de Nambu. A única diferença é que cada linha grossa pontilhada será marcada com um índice η_i ou a alterna-

tiva oposta $\bar{\eta}_i$. O índice η_i representa o símbolo de “asterisco” ou simplesmente o símbolo “em branco”, o qual significa que o bloco de Nambu de S_0 é U^* ou U respectivamente. Note da estrutura diagonal da eq. (5.6) que linhas grossas pontilhadas sempre unem pontos com o mesmo índice de Nambu. Para ganhar clareza, mostramos na fig. 5.2 um diagrama tipo escada que aparece no cálculo da condutância. Nessa figura a linha sólida dirigida da esquerda (direita) representa os blocos de Nambu da matriz $A = (T')^\dagger C_e T'$ ($B = TC_h T^\dagger$), enquanto que a linha sólida dirigida na parte inferior central (superior central) representam os blocos das matrizes R ($R^\dagger$). Observe no diagrama que todos os índices de Nambu que pertencem ao mesmo laço-U são iguais, isso acontece quando os diagramas são planares.

Definindo $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ e $\mathcal{L}$ através da eq. 3.29 obtemos facilmente a soma dos diagramas tipo escada. Encontramos dessa forma que

$$\frac{\langle G \rangle}{G_0} = \frac{G_b G_{Aa}}{G_b + G_{Aa}}, \quad (5.26)$$

sendo $G_b = N_b \Gamma_b$ e $G_{Aa} = 2N_a \Gamma_a^2 / (2 - \Gamma_a)^2$. Esta equação representa simplesmente a lei de Ohm para um circuito de duas resistências em série, onde o primeiro elemento tem a condutância do contato b e o segundo tem a condutância do contato a , renormalizada como na presença de simetria de reversão temporal (ver eq. (5.25)). Podemos apreciar a simplicidade do resultado e a assimetria com relação aos parâmetros que caracterizam os contactos, na presença do campo magnético. Isto difere muito do que acontece no caso de campo nulo [78].

Na fig. 5.3 mostramos o comportamento da condutância com respeito à variação da transparência das barreiras. Fixamos Γ_a (Γ_b) em 1.0, 0.6 e 0.2 na parte esquerda (direita) da figura, variando Γ_b (Γ_a). Os casos unitário e ortogonal para cada valor do parâmetro fixo são representados por linhas sólidas e tracejadas da mesma cor respectivamente. Os dados do caso ortogonal foram obtidos usando a teoria escalar de circuitos. Note que a principal diferença qualitativa é a monotonicidade. No caso unitário, a condutância é uma função monotônica de ambas as transparências, como pode ser facilmente provado a partir da eq. (5.26). Por outro lado, um máximo aparece para um valor intermediário da transparência no caso de campo nulo (ver na figura curva com $\Gamma_i = 0.2$). Tal máximo foi relacionado com a aparição de modos tipo Fabry Perot na cavidade para determinados valores das transparências [84, 78].

5.5 FATOR FANO

À temperatura nula o ruído de disparo é dado por [7]:

$$P = 4P_0 \text{tr} [S_{eh}^{bb} (S_{eh}^{bb})^\dagger (1 - S_{eh}^{bb} (S_{eh}^{bb})^\dagger)], \quad (5.27)$$

onde $P_0 = 2e|V|G_0$. Para o cálculo da média do traço do segundo termo no argumento da equação anterior, devemos usar a mesma topologia dos diagramas mostrados na fig. 4.5. A única modificação que deve ser feita é colocar o mesmo índice de Nambu para cada laço-U, como mostramos na fig. 5.2 no cálculo da condutância. Calculando dessa maneira o ruído de disparo, e usando a expressão (4.39), obtemos que

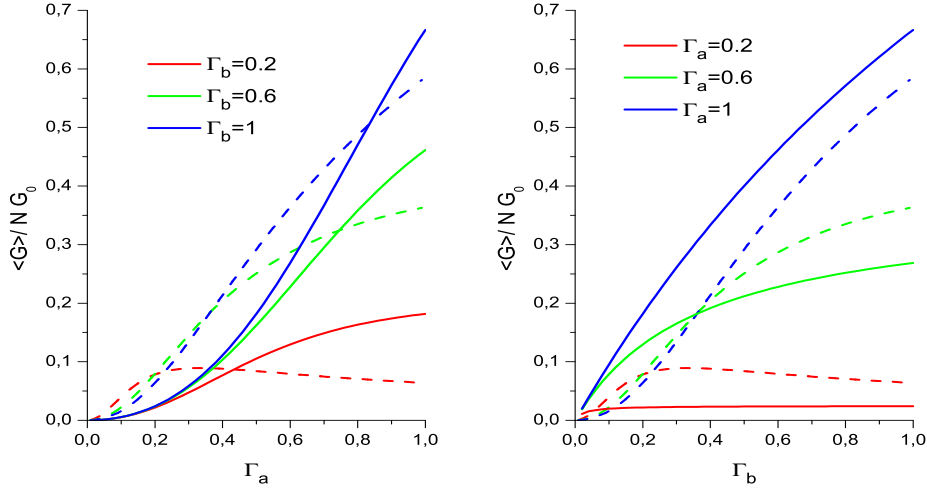


Figura 5.3 Valor médio da condutância em unidades de NG_0 do caso unitário (linhas sólidas) e o caso ortogonal (linhas tracejadas). Curvas com a mesma cor representam o mesmo valor do parâmetro fixo. Na esquerda (direita) Γ_b (Γ_a) é variada enquanto que Γ_a (Γ_b) é fixada nos valores 0.2, 0.6 and 1. Os dados do caso ortogonal foram obtidos por Gerson Cortés.

$$F = 2[2N_a\Gamma_a^2 + N_b(2 - \Gamma_a)^2\Gamma_b]^{-3} \times [N_a^3\Gamma_a^6(2 - \Gamma_b) + 2N_aN_b^2(2 - \Gamma_a)^2\Gamma_a^4\Gamma_b + N_aN_b^2(2 - \Gamma_a)^4\Gamma_a^2\Gamma_b^2 + 2N_b^3(2 - \Gamma_b)^4(1 - \Gamma_2)\Gamma_b^3]. \quad (5.28)$$

Similarmente à condutância, pode ser claramente percebida a assimetria em relação à transparência e ao número de canais dos contatos. Consideraremos de agora em diante $N_a = N_b = N$.

No painel direito (esquerdo) da fig. 5.4, plotamos o fator Fano na presença do campo magnético para vários valores fixos de Γ_a (Γ_b) quando Γ_b (Γ_a) é variado. Em ambas as figuras exploramos o comportamento de F partindo do valor fixo $\Gamma_i = 1$ (contato ideal) e diminuindo-o até atingir o limite de junção de tunelamento ($\Gamma_i \ll 1$). Notemos que existe um comportamento comum em ambos os painéis, *i.e.*, um mínimo do fator Fano aparece para algum valor Γ'_i do parâmetro fixo quando o parâmetro variado é igual a 1. Dessa forma, quando o parâmetro fixo toma valores desde Γ'_i até zero o extremo se disloca da direita para a esquerda. No gráfico direito da fig. 5.4 as curvas tornam-se não monotônicas quando $\Gamma'_a \approx 0.85$ e no gráfico esquerdo quando $\Gamma'_b \approx 0.63$.

É instrutivo analisar também o fator Fano quando um dos contatos é uma junção de tunelamento. Se $\Gamma_a \rightarrow 0$ o fator Fano tende a 2, comportando-se o ruído de disparo como Poissoniano. As flutuações temporais da corrente são cada vez mais dominadas pelo conector do reservatório supercondutor na medida em que Γ_a decresce, e a carga se transfere em unidades de $2e$ de uma maneira descorrelacionada. Analogamente, quando

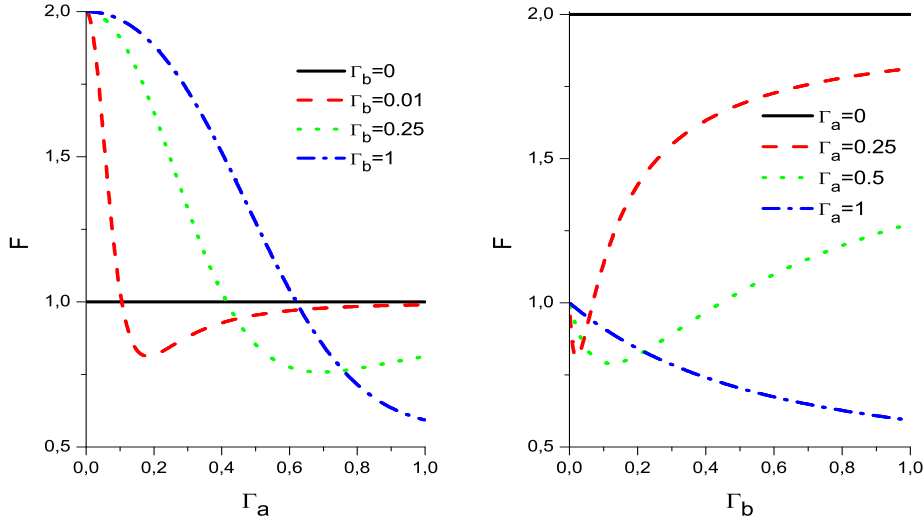


Figura 5.4 Fator Fano como função de Γ_a (Γ_b) é representado no painel esquerdo (direito). Γ_b é fixado em 0, 0.01, 0.25 e 1, enquanto que Γ_a em 0, 0.25, 0.5 e 1.0.

$\Gamma_b \rightarrow 0$ o fator Fano tende a 1, devido ao fato do conector do lado normal dominar a transferência de carga, a que acontece nesse lado em unidades de e [50, 83]. Ambos os painéis da fig. 5.4 ilustram esta análise.

5.6 CORREÇÃO DE LOCALIZAÇÃO FRACA DA CONDUTÂNCIA

No início dos anos oitenta, a localização fraca da condutância foi entendida em termos de trajetórias de Feynman interferentes [85], no contexto de metais difusivos. Acharmos instrutivo expor brevemente, sem muito rigor matemático, as causas que permitem que os efeitos de tais trajetórias sobrevivam à média sobre a desordem num sistema NS, mesmo na presença de um campo magnético. Começaremos explicando o fenômeno num metal normal difusivo.

5.6.1 Pares de trajetórias interferentes

O propagador de uma partícula é interpretado como a amplitude de probabilidade que tem a mesma de mover-se desde um ponto **1** do espaço até outro ponto **2**, num dado intervalo de tempo. Este propagador pode ser representado em termos de uma soma sobre todas as trajetórias possíveis entre os pontos, como indicado abaixo [86]:

$$A_{1 \rightarrow 2} = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} A_j e^{iS_j/\hbar}, \quad (5.29)$$

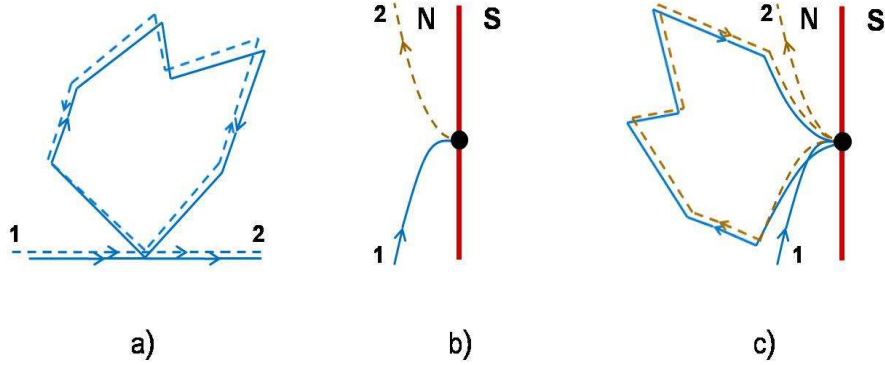


Figura 5.5 a) Duas trajetórias que interferem num metal normal difusivo, sendo o laço de uma a inversão temporal do da outra. b) e c) Duas trajetórias que interferem num sistema normal difusivo adjacente a um supercondutor. Linhas sólidas representam trajetórias de elétrons, as linhas tracejadas as dos buracos e o ponto preto a reflexão de Andreev.

onde A_j é um coeficiente, S_j a ação da j -ésima trajetória e $\mathcal{N}$ o número de trajetórias. É razoável relacionar a condutância do sistema ao módulo ao quadrado do propagador, o qual é dado por:

$$P_{1 \rightarrow 2} = |A_{1 \rightarrow 2}|^2 = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} A_j^2 + \sum_{j \neq k}^{\mathcal{N}} A_j A_k e^{i(S_j - S_k)/\hbar}. \quad (5.30)$$

Consideremos agora o efeito de realizar a média sobre um ensemble de amostras em virtude da existência de desordem no sistema (num ponto caótico a aleatoriedade provém das irregularidades na dinâmica clássica subjacente). Em que circunstâncias sobreviverá a segunda soma da eq. (5.30), que representa o termo de interferência, à média? Para responder a esta pergunta olhemos a fig. 5.5a, onde estão representadas duas trajetórias, sendo o laço de uma a inversão temporal do laço da outra. Quando o campo magnético é nulo, as ações do par são iguais e nenhum elemento de aleatoriedade é incorporado. Portanto, um termo de interferência imune à desordem da forma $2A_j A_k$ é incorporado à soma. Algo diferente acontece na presença de campo magnético, pois as duas ações ganham um termo $\pm e \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$, onde o sinal depende do sentido da trajetória. Portanto a diferença das ações na equação (5.30) não se anula e é dada por $S_j - S_k = 2e \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$, que depende do comprimento da trajetória, o qual é aleatório por causa da desordem. O termo de interferência portanto desaparece depois de realizar a média. No contexto do método diagramático, a média da primeira soma em (5.30) se relaciona com os diagramas tipo *difuson*, enquanto que a média da segunda soma é relacionada com os diagramas tipo *cooperon*. Para uma discussão detalhada veja a ref. [87].

Tentemos agora entender o caso NS, para isto olhemos a fig. 5.5. Na parte b) da figura está representada uma trajetória na qual um elétron (linha sólida) chega à interface NS e experimenta uma reflexão de Andreev (círculo preto), dando lugar a um buraco (linha tracejada). Já na parte c) representamos uma trajetória com três reflexões de Andreev

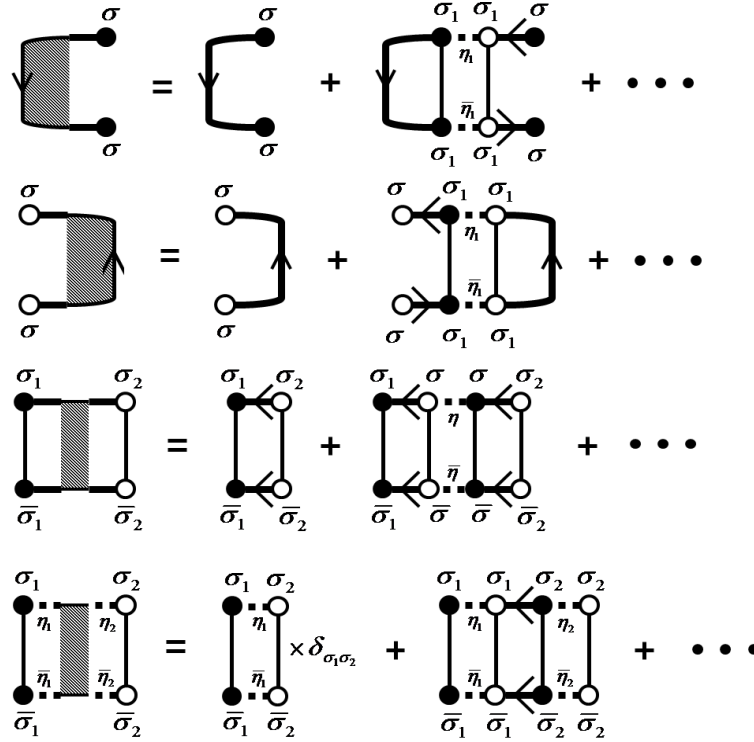


Figura 5.6 Definição de quatro séries diagramáticas necessárias para a construção dos diagramas com topologias diferentes.

no mesmo ponto da interface. Notemos que a ação da trajetória c) se diferencia em π da correspondente à b), mesmo na presença de um campo magnético. Isto é fácil de ver, já que na parte em que a quase-partícula propaga-se como elétron a ação ganha um termo $e \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$ e quando ela se propaga como buraco no mesmo sentido o termo fica $-e \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$, cancelando assim o primeiro. Além do mais, em cada reflexão de Andreev a quase-partícula ganha uma fase de $-\pi/2$, de maneira que a diferença de fase entre as duas é de π . Este par de trajetórias interferentes é o exemplo mais simples das que sobrevivem à média [7], e sua existência é uma consequência direta da coerência elétron-buraco. Semelhantemente ao caso normal, na técnica diagramática elas são relacionadas a diagramas maximamente cruzados ou tipo *cooperon* [13, 14].

5.6.2 Termo de localização fraca

Como indicado na introdução do capítulo, a correção de localização fraca já foi calculada para um fio difusivo e para um ponto caótico quântico ideal conectados a reservatórios NS. Mesmo com a inclusão de transparências arbitrárias nos contatos, os diagramas que obtemos não diferem muito topologicamente do caso ideal, como veremos mais adiante.

Para construir os diagramas precisamos definir primeiro as quatro séries diagramáticas apresentadas na fig. 5.6. Note que os laços-T envolvidos nessas quantidades são números

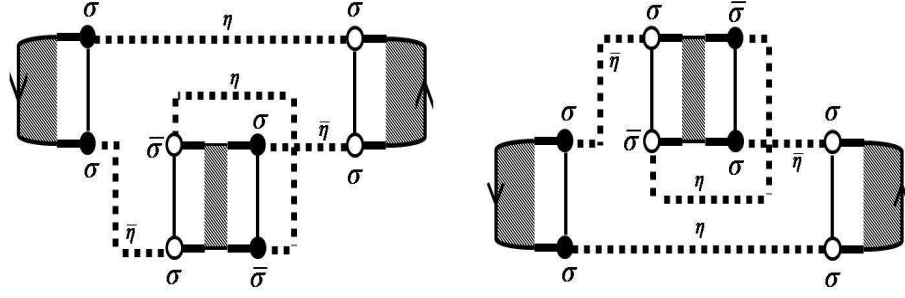


Figura 5.7 Os dois diagramas maximamente cruzados e topologicamente diferentes obtidos usando as três primeiras séries da fig. 5.6.

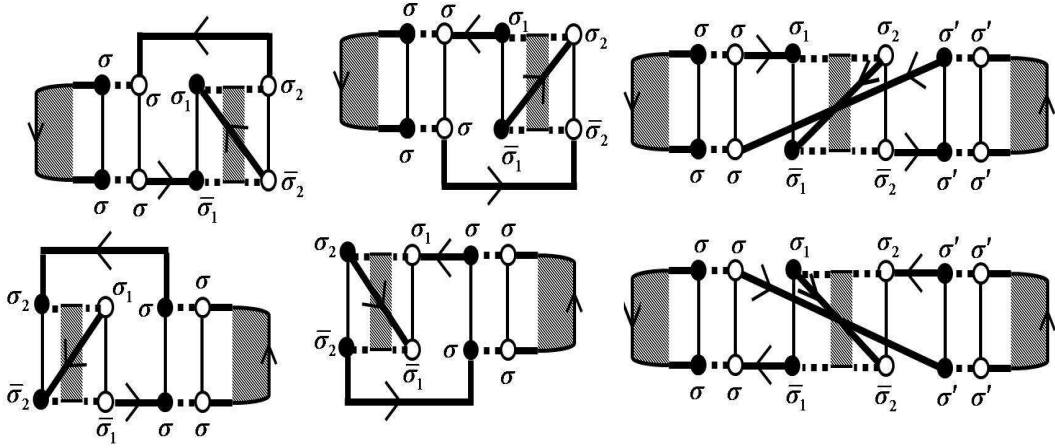


Figura 5.8 Os seis diagramas maximamente cruzados e topologicamente diferentes obtidos usando as duas primeiras e a última séries da fig. 5.6.

reais, apesar do fato de que R tem elementos que são complexos (ver eq. (5.18)). Precisamos colocar o símbolo $\delta_{\sigma_1\sigma_2}$ no primeiro elemento da última soma porque linhas grossas pontilhadas nunca podem unir pontos com índices de Nambu diferentes.

Para ver a forma detalhada através da qual os diagramas maximamente cruzados são obtidos sugerimos a ref. [52]. Limitaremos-nos aqui a explicar brevemente como eles aparecem. Se desenvolvermos a eq. (5.24) em série obtemos

$$\langle G \rangle = G_0 \sum_{k_1, k_2=0}^{\infty} \left\langle \text{Tr} \left[A(S_0 R)^{k_1} S_0 B S_0^\dagger (R^\dagger S_0^\dagger)^{k_2} \right] \right\rangle. \quad (5.31)$$

No cálculo do termo dominante da condutância consideramos apenas os diagramas tipo escada, que surgem quando $k_1 = k_2$. Mas observe que diferentemente dos casos analisados nos capítulos 3 e 4, a matriz S_0 pode conter blocos U e U^* . Uma consequência disto é que existirão termos onde $k_1 \neq k_2$ que não se anularão quando fizermos a média, o que abre a possibilidade de que possam existir diagramas cruzados mesmo com a simetria de

reversão temporal quebrada.

Usando as três primeiras séries da fig. 5.6 pode-se obter os dois primeiros diagramas, os quais mostramos na fig. 5.7. Perceba que como alguns elementos de R não são reais, a diferença entre R e $R^\dagger$ tem que ser levada em conta na hora de gerar todas as topologias possíveis. Os diagramas restantes são obtidos a partir das duas primeiras e da quarta séries da fig. 5.6. Eles estão representados na fig. 5.8, na qual omitimos os símbolos η para ganhar clareza e porque tal omissão não traz ambiguidade aos diagramas. Somando então estes oito diagramas obtemos que a correção da localização fraca é dada por

$$\begin{aligned} \delta G_{LF}/G_0 = & -4N_a [2N_a\Gamma_a^2 + N_b\Gamma_b(2 - \Gamma_a)^2]^{-3} \times [2N_a^2\Gamma_a^6(1 - \Gamma_b) + \\ & N_aN_b(2 - \Gamma_a)^2\Gamma_a^4\Gamma_b + N_b^2\Gamma_a^2\Gamma_b^2(2 - \Gamma_a)^2(\Gamma_a^2 + 4\Gamma_a - 4)]. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Quando $\Gamma_a = \Gamma_b = 1$, obtemos:

$$\delta G_{LF}/G_0 = -4N_aN_b(N_a + N_b) [2N_a + N_b]^{-3}, \quad (5.33)$$

reproduzindo o resultado obtido na ref. [52] para contactos ideais.

Para ter um melhor entendimento da nova fenomenologia, mostramos na fig. 5.9 o comportamento de δG_{LF} em unidades de G_0 com a variação de Γ_a e Γ_b , considerando $N_a = N_b = N$. Analisemos primeiro o caso limite quando um dos conectores é uma junção de tunelamento. Então, se fizermos $\Gamma_a \rightarrow 0$ a correção tende a zero (ver painel esquerdo), o que não é difícil de entender. Na presença de um campo magnético as trajetórias que interferem necessariamente contêm uma reflexão de Andreev [7]. Por outro lado, da eq. (5.15) é claramente observado que os elementos fora da diagonal, os quais são responsáveis pelas reflexões de Andreev, tendem a zero como Γ_a . Isto implica que as trajetórias interferentes são suprimidas neste limite e com elas a correção da localização. Oposto ao que acontece neste caso assim como para o termo dominante da condutância na eq. (5.26), quando a transparência do conector do lado normal $\Gamma_b \rightarrow 0$, a correção tende a -1 independentemente do valor de Γ_a (ver painel direito). Vale esclarecer que este resultado deve ser entendido levando em consideração o limite semiclássico no qual estamos trabalhando, *i.e.*, $N_i\Gamma_i \gg 1$.

Quando as transparências dos contatos são da mesma ordem, tem lugar um comportamento não trivial da correção. Devemos salientar a interessante mudança de sinal que experimenta a correção na medida em que se varia algumas das transparências. Quando Γ_a é variado no sistema, uma transição de antilocalização para localização está presente para qualquer valor de Γ_b (painel esquerdo). De outra maneira, quando Γ_b é variado a transição aparece para valores de Γ_a maiores que $\sqrt{3} - 1$ (ver painel direito). Este efeito sugere que as trajetórias interferentes não necessariamente “localizam” a quase-partícula, pois elas contêm no mínimo uma reflexão de Andreev, que também afeta a transmissão de carga criando ou aniquilando um par de Cooper no lado supercondutor. Um efeito similar foi encontrado para a correção da potência do ruído de disparo (quantidade totalmente diferente à estudada aqui) num ponto quântico caótico acoplado de maneira não ideal a reservatórios normais [76]. Nesse caso é indispensável uma diferença no número de canais abertos em cada conector para observar tal transição.

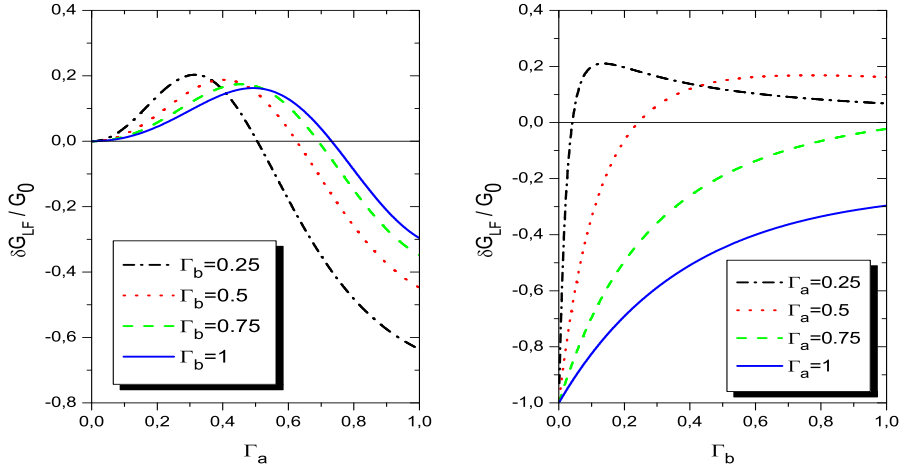


Figura 5.9 Localização fraca da condutância em unidades de G_0 variando Γ_a (Γ_b) no painel esquerdo (direito) e fixando Γ_b (Γ_a) em 0.25, 0.5, 0.75 e 1. As linhas sólidas pretas representam guias para os olhos.

5.7 ANALOGIA COM DOIS PONTOS ACOPLADOS EM SÉRIE

Admitamos agora que o campo magnético é nulo, o que restabelece a simetria de reversão temporal, e que a diferença de potencial aplicada é grande o suficiente para quebrar a simetria elétron-buraco. Na ausência de simetria elétron-buraco as matrizes de espalhamento da cavidade e dos conectores para elétrons e buracos são independentes [52], *i.e.* não precisam satisfazer a condição da equação (5.7). Desta forma a matriz de espalhamento da cavidade é

$$S_0 = \begin{pmatrix} U_{\text{ele}} & 0 \\ 0 & U_{\text{bur}} \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

e a dos conectores fica

$$S_i = \begin{pmatrix} U_i & 0 \\ 0 & U_i \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

onde U_{ele} e U_{bur} são matrizes que pertencem a diferentes ensembles circulares ortogonais (**ECO**). O resto das equações para o novo sistema são as mesmas que já vimos acima na ausência de simetria de reversão temporal e na presença de simetria elétron-buraco. Portanto, as matrizes de espalhamento dos elementos do sistema preservam sua estrutura de Nambu. Se “desdobrarmos” essa estrutura, qual será o sistema equivalente resultante? Pelo termo desdobrar entendemos um reordenamento dos elementos das matrizes de espalhamento, de tal forma que a relação entre as amplitudes das funções de onda eletrônica em cada guia na base (5.4) permaneça invariante. Isto pode ser feito em duas etapas: primeiramente fundimos o índice do guia com o de Nambu e tomamos esse novo índice

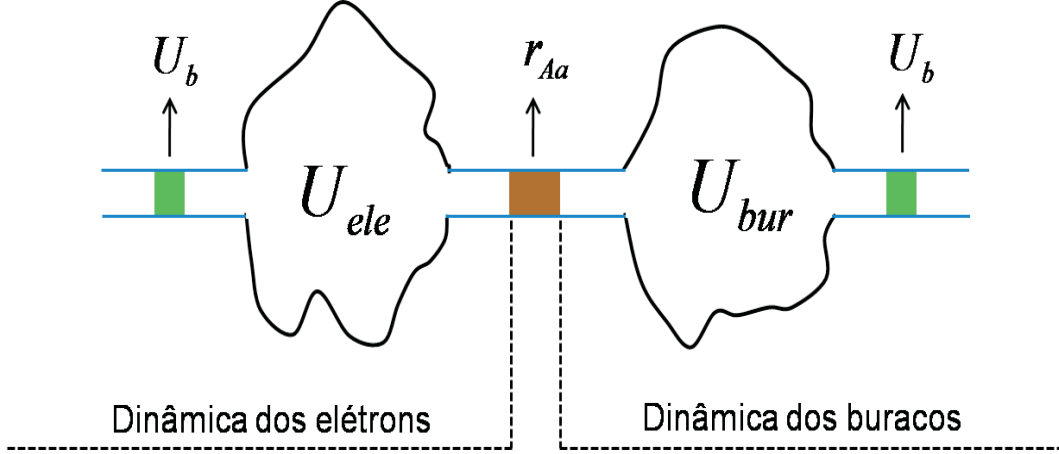


Figura 5.10 Sistema de dois pontos quânticos caóticos acoplados em série, equivalente à cavidade quântica caótica unida a reservatórios híbridos NS na ausência de simetria elétron-buraco.

para numerar os guias do novo sistema. Estaremos portanto separando a dinâmica dos elétrons e buracos em guias diferentes. Em segundo lugar, redefinimos nosso sistema de coordenadas de tal forma que a direção de propagação permaneça a mesma para elétrons e seja invertida para buracos. Por outra parte, das equações (5.35), (5.9) e (5.15), apenas a equação (5.15) tem elementos fora da diagonal na sua estrutura de Nambu, os quais dão origem às reflexões de Andreev. Com as considerações anteriores, a matriz r_{Aa} é completa no espaço da direção de propagação, sendo que os elementos fora da diagonal se reinterpretem como blocos de transmissão enquanto que os diagonais continuam com a mesma interpretação de blocos de reflexão. Visto desse jeito, a matriz r_{Aa} descreve a matriz de espalhamento de um conector “especial” que quando transmite um elétron (buraco) o “converte” em buraco (elétron).

Agora estamos em condições de mapear o sistema todo num sistema de dois pontos acoplados em série como se mostra na fig. 5.10. A principal conclusão que podemos tirar deste mapeamento é que a matriz de espalhamento de um sistema de dois pontos pode ser expressa através de uma parametrização de estube, desde que paguemos o preço de aumentar sua dimensão para rearrumar à informação referente ao espaço da direção de propagação.

Uma implicação da analogia exposta acima, é que a localização fraca de dois pontos em série acoplados a reservatórios normais deve coincidir com a de um ponto acoplado a reservatórios NS sem simetria elétron-buraco. Isto é parcialmente corroborado usando a eq. (3.41) para o número de pontos $n = 2$ e fazendo $\Gamma = 1$. A correção de localização fraca é dada por $\delta G = -8/27$, que coincide com o resultado apresentado na ref. [52] para um sistema NS na ausência de simetria elétron-buraco, exceto por o fator 2 a mais que aparece na fórmula da condutância (5.21) para sistemas NS. No regime semiclássico um mapa similar a este foi proposto na ref. [88].

5.8 SUMÁRIO

Estudamos várias propriedades de transporte para uma cavidade acoplada de maneira não ideal a dois reservatórios, sendo um deles feito de um metal normal e o outro de um supercondutor convencional. Consideramos que a simetria de reversão temporal é quebrada por um campo magnético aplicado na região da cavidade. Calculamos a condutância e a comparamos com o resultado para o caso ortogonal. Obtivemos o fator Fano e o descrevemos qualitativamente. Também calculamos a correção de localização fraca para a condutância, e descobrimos uma mudança de sinal na correção induzida pelas transparências das barreiras, o que indica uma transição entre localização e anti-localização da condutância mesmo quando são preservadas as simetrias fundamentais do sistema.

CAPÍTULO 6

ALÉM DO LIMITE SEMICLÁSSICO

6.1 INTRODUÇÃO

As técnicas de cálculo usadas nos capítulos anteriores são úteis no limite semiclássico (**LS**). O método diagramático em particular, foi usado através de uma expansão da parametrização de estube, visto que sabemos como fazer médias de polinômios de matrizes aleatórias pertencentes a ensembles circulares. Na execução da média agrupamos os termos de mesma ordem, tomando como referência o parâmetro $1/N$, onde N é o número de canais de propagação abertos no sistema. Como no LS cumpre-se a condição $N \gg 1$, esta separação é fácil de ser feita. Entretanto, no caso em que $N \sim 1$ é impossível estabelecer uma hierarquia dos termos dominantes da serie. O termo de “localização fraca” pode ser da mesma ordem ou maior do que o termo dominante no LS. Dizemos então que estamos num regime não perturbativo ou no limite quântico extremo (**LQE**). Contudo, é justo lembrar que no caso de contatos ideais é possível executar a média sobre o grupo unitário, a qual permite calcular expressões exatas de vários observáveis no LQE [89, 52].

A teoria de circuitos, abordada no capítulo 2, é semiclássica por construção. Basta lembrar que as funções de Green de Keldysh envolvidas na teoria não levam em conta escalas da ordem do comprimento de onda de Fermi dos elétrons, na qual acontecem os fenômenos de interferência. Estes últimos, como foi explicado acima e será evidenciado mais adiante, são de importância decisiva no regime não perturbativo. Além do mais, a atenuação dos efeitos de interferência acontecem devido à auto-média dos observáveis quando somada a contribuição de muitos canais (ver introdução). Entretanto, existem outras técnicas como o modelo sigma não linear supersimétrico [90, 91] e integrais de Selberg [92, 93, 94] que conseguem acessar o regime não perturbativo, embora a não idealidade dos contatos não tenha sido considerada no cálculo de distribuições.

Como vimos no capítulo 4 para um sistema NS, e foi mostrado na ref. [76] para um sistema NN, a presença de barreiras nos contatos pode enriquecer notavelmente a física do sistema. Essa foi a principal motivação neste capítulo, onde estudaremos distribuições de cumulantes de carga transmitida (**CCT**) num ponto caótico acoplado a reservatórios normais através de barreiras não ideais, concentrando-nos no LQE. Usaremos para isto simulações numéricas feitas no Mathematica versão 5.2, nas quais geramos o ensemble circular unitário e o ortogonal usando o algoritmo de Hurwitz [80]. Antes de chegar aos resultados, aprofundaremos um pouco na forma sistemática com que os CCT podem ser calculados.

6.2 ESTATÍSTICA DE CONTAGEM DE CARGA

As flutuações temporais de corrente por causa da discretização da carga dos portadores é uma propriedade intrínseca do transporte quântico. O fato de sua capacidade informativa ser tão importante quanto o próprio valor médio da corrente, levou a Rolf Landauer, um dos fundadores da física mesoscópica, a proferir o seguinte epíteto sobre o ruído de disparo: “*O ruído é o sinal*”. Esta grandeza em particular, que é o segundo CCT, tem encontrado varias aplicações dentro da física. Podem ser citados alguns exemplos, como seu uso na medição da carga dos portadores [72, 97], na detecção de emaranhamento [98] e de canais de transmissão abertos [99], entre outros.

Com o objetivo de criar uma teoria consistente, que descrevesse completamente o processo estocástico subjacente no fluxo de corrente num condutor mesoscópico, Levitov e Lesovik introduziram o conceito de *estatística de contagem de carga*. No seu primeiro trabalho [100], um operador de carga transmitida num tempo T_0 foi definido como

$$\hat{Q} = \int_0^{T_0} dt \hat{I}(t), \quad (6.1)$$

com o propósito de calcular as funções de correlação desse operador para descrever as flutuações da carga transmitida. Contudo, resultados de duvidosa validade foram obtidos seguindo este caminho. Por exemplo, obteve-se que a carga transferida não estava quantificada em unidades da carga elemental. Mais tarde percebeu-se que da definição (6.1) poderiam proceder, de maneira não trivial, alguns problemas. Um deles é a violação de causalidade, nas expressões para os momentos de carga transferida

$$\langle \hat{Q}^m \rangle = \int_0^{T_0} dt_1 \dots dt_m \langle \hat{I}(t_1) \hat{I}(t_2) \dots \hat{I}(t_m) \rangle. \quad (6.2)$$

Em mecânica quântica usa-se frequentemente o operador de ordenamento temporal $\mathcal{T}$ para preservar a causalidade. Por exemplo, o operador de evolução temporal pode expressar-se através da serie de Dyson como [101]

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^k \int_{t_0}^t dt_k \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_k) \dots H(t_1), \quad (6.3)$$

onde $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema no tempo t , sendo que a integração no k -ésimo termo é feita no hiper-volume delimitado por $t_0 \leq t_1 \dots \leq t_k \leq t$. Devido a ser mais conveniente integrar sobre um hipercubo de aresta t , introduz-se o operador de ordenamento temporal, com o qual pode-se mostrar que

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_{t_0}^t dt_k \dots \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{T}[H(t_k) \dots H(t_1)]. \quad (6.4)$$

Entretanto, na eq. (6.2) integra-se desde o inicio no hipercubo de tamanho T_0 sem o auxílio de nenhum operador de ordenamento temporal. Uma outra razão foi o fato da definição (6.1) conter informação sobre o estado quântico do sistema num intervalo de

tempo T_0 , enquanto que na mecânica quântica as medições são descritas por projeções instantâneas da função de onda do sistema num dos auto-estados do observável.

Essas dificuldades exigem uma construção mais sutil que permita o cálculo dos cumulantes de carga transmitida de uma maneira correta. O problema foi resolvido fazendo uma extensão do sistema através da inclusão explícita de um dispositivo de medição [103]. O dispositivo escolhido foi um sistema com spin $1/2$ acoplado à corrente do circuito, de maneira que o ângulo de precessão do spin é proporcional à carga transmitida. O estudo da evolução temporal do medidor permite então determinar a probabilidade de que n cargas sejam transmitidas num intervalo de tempo T_0 .

Hoje em dia a estatística de contagem de carga tem sido aplicada a sistemas híbridos normal-supercondutor [71], normal-ferromagnético [105], pontos quânticos caóticos com contatos ideais [94], entre outros. Também técnicas experimentais que permitem a medições de CCT de alto ordem, a até a distribuição de carga completa, têm sido desenvolvidas [95, 96]. Vale salientar que o conceito de estatística de contagem vai muito além do esquema de medição usado em [103], conhecido como galvanômetro de spin, e não necessariamente está restrito a uma variável discreta como a carga [104], mesmo que o termo “contagem” tenha sido mantido por razões históricas.

6.2.1 Exemplo simples: uma junção de tunelamento com um canal de propagação aberto

A distribuição de probabilidade de uma variável aleatória pode ser especificada pela sua função geratriz. No caso do processo de transmissão de carga num sistema mesoscópico, é mais conveniente calcular a função geratriz do que a própria distribuição P_n . A mesma se define como

$$\Lambda(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} P_n e^{i\lambda n}, \quad (6.5)$$

onde n identifica o número de cargas transmitidas durante o tempo de observação e λ é um parâmetro auxiliar denominado *campo de contagem*. Uma vez conhecida a função geratriz, a distribuição pode ser obtida pela fórmula dos coeficientes da série de Fourier

$$P_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \Lambda(\lambda) e^{-in\lambda}. \quad (6.6)$$

Consideremos uma junção de tunelamento que conecta dois reservatórios normais. A junção é caracterizada por uma transparência $\Gamma \ll 1$ e admitiremos que apenas existe um canal aberto. Nos reservatórios é aplicada uma diferença de potencial V , de tal forma que os elétrons chegam à junção com uma frequência constante $2eV/h$, o fator 2 leva em conta o spin. As flutuações de temperatura serão desprezadas. Dividamos o intervalo de tempo T_0 no qual acontece a medição em pequenos intervalos Δt . A probabilidade de um elétron ser transferido no intervalo Δt é $2\Gamma eV\Delta t/h$, a qual é muito pequena e portanto, processos de transferência simultânea de dois ou mais elétrons são desprezíveis. A função geratriz da distribuição para o intervalo Δt é dada por

$$\Lambda_{\Delta t}(\lambda) = (1 - 2\Gamma eV \Delta t/h) + e^{i\lambda} (2\Gamma eV \Delta t/h). \quad (6.7)$$

Como os eventos de transmissão estão temporalmente afastados um do outro por causa da baixa probabilidade de transferência, eles são descorrelacionados. Dessa forma a função geratriz total será o produto das funções geratrizes em cada pequeno intervalo Δt . Fazendo $\Delta t \rightarrow 0$ obtêm-se então

$$\Lambda_{T_0}(\lambda) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Lambda_{\Delta t}(\lambda))^{T_0/\Delta t} = e^{M_0 \Gamma (e^{i\lambda} - 1)}, \quad (6.8)$$

onde $M_0 = 2T_0 eV/h$. Achando os coeficientes da série de Fourier encontra-se que a distribuição de probabilidade é Poissoniana, ou seja

$$P_n = \frac{(M_0 \Gamma)^n}{n!} e^{-M_0 \Gamma T_0}. \quad (6.9)$$

6.2.2 Fórmula de Levitov-Lesovik

Para sistemas mais complexos, onde existem vários canais abertos e levam-se em conta as flutuações de temperatura, a transmissão de carga é descrita pela fórmula de Levitov e Lesovik. A mesma é uma *função geratriz dos cumulantes de carga* que denotaremos com a letra Φ , e está relacionada à função geratriz da distribuição por

$$\Phi(\lambda, \vec{\tau}) = \ln \Lambda(\lambda, \vec{\tau}), \quad (6.10)$$

onde fizemos a abreviação $\vec{\tau} \equiv \{\tau_i\}$, referindo-nos aos autovalores de transmissão dos N canais de propagação do sistema. O m -ésimo CCT pode ser calculado a partir da função geratriz Φ como

$$q_m = \frac{d^k}{d(i\lambda)^k} \Phi(\lambda) |_{\lambda=0}. \quad (6.11)$$

A expressão para Φ está determinada pela fórmula de Levitov e Lesovik, que é dada por [102]

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda, \vec{\tau}) = & 2T_0 \sum_{i=1}^N \int_0^{eV} \frac{dE}{h} \ln \{1 + \tau_i (e^{i\lambda} - 1) f_L(E) [1 - f_R(E)] + \\ & \tau_i (e^{-i\lambda} - 1) f_R(E) [1 - f_L(E)]\}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

onde $f_{L,R}$ são as distribuições de Fermi-Dirac: $f_L(E) = 1/(1 + \exp[(E - eV)/k_B T])$ para o reservatório esquerdo e $f_R(E) = 1/(1 + \exp[E/k_B T])$ para o direito. À temperatura nula, a equação anterior se reduz a

$$\Phi(\lambda, \vec{\tau}) = M_0 \sum_{i=1}^N \ln \{1 + \tau_i (e^{i\lambda} - 1)\}. \quad (6.13)$$

Das equações (6.11) e (6.13) podemos perceber que cada cumulante pode ser escrito como

$$q_m = M_0 \sum_{i=1}^N f_m(\tau_i), \quad (6.14)$$

onde as funções f_m são polinômios de grau m . Note-se que para todo $m > 1$, cumpre-se que

$$f_m(0) = f_m(1) = 0. \quad (6.15)$$

Para os quatro primeiros CCT as f_m são dadas por

$$\begin{cases} f_1(\tau) &= \tau, \\ f_2(\tau) &= \tau(1 - \tau), \\ f_3(\tau) &= \tau(1 - \tau)(1 - 2\tau), \\ f_4(\tau) &= \tau(1 - \tau)(1 - 6\tau + 6\tau^2). \end{cases} \quad (6.16)$$

6.3 DISTRIBUIÇÕES DE CUMULANTES

Uma consequência do fato do comprimento de coerência de fase ser maior do que as dimensões da amostra é a possibilidade da observação dos efeitos causados pela interferência espacial das funções de onda dos elétrons. Um exemplo clássico é a observação de flutuações universais da condutância, as quais acontecem devido ao fato de que de uma amostra para outra a distância relativa entre as impurezas (no caso de um sistema com desordem) ou a geometria da cavidade (quando o sistema é balístico caótico) varia, dando lugar a variações nas diferenças de fase relativas das funções de onda dos elétrons. Para observações experimentais não é viável construir um ensemble de amostras, então se muda o comprimento de onda dos elétrons através da variação da concentração dos portadores na mesma amostra, controlando-se com uma tensão negativa aplicada em portas metálicas. Também pode varia-se a fase relativa dos elétrons com a aplicação de um campo magnético. Os dois métodos são estatisticamente equivalentes à construção de um ensemble de amostras.

Um exemplo de medição é mostrada na fig. 6.1a, que representa as flutuações da condutância de um fio condutor quase-unidimensional a uma temperatura de 38 mK , induzidas através de um campo magnético que varia desde -15 T até 15 T . Na figura 6.1b está representado o histograma construído a partir dessas medições e uma curva aproximadamente gaussiana que ajusta o histograma. O valor médio da condutância é representado por $\langle g \rangle$, enquanto que $\langle gg \rangle$ denota a variância da mesma.

Uma distribuição gaussiana é completamente caracterizada pelo seu valor médio e a sua variância, os restantes cumulantes são nulos. Nas figuras 6.1c e d, são mostradas distribuições para as quais o terceiro e o quarto cumulante, denotados por $\langle ggg \rangle$ e $\langle gggg \rangle$ respectivamente, são distintos de zero. O terceiro cumulante nos informa acerca da simetria da distribuição, enquanto que o quarto cumulante nos diz quão achatado ou aguçado é o topo da distribuição. Os sinais de mais e de menos na figura referem-se a valores positivos e negativos dos cumulantes.

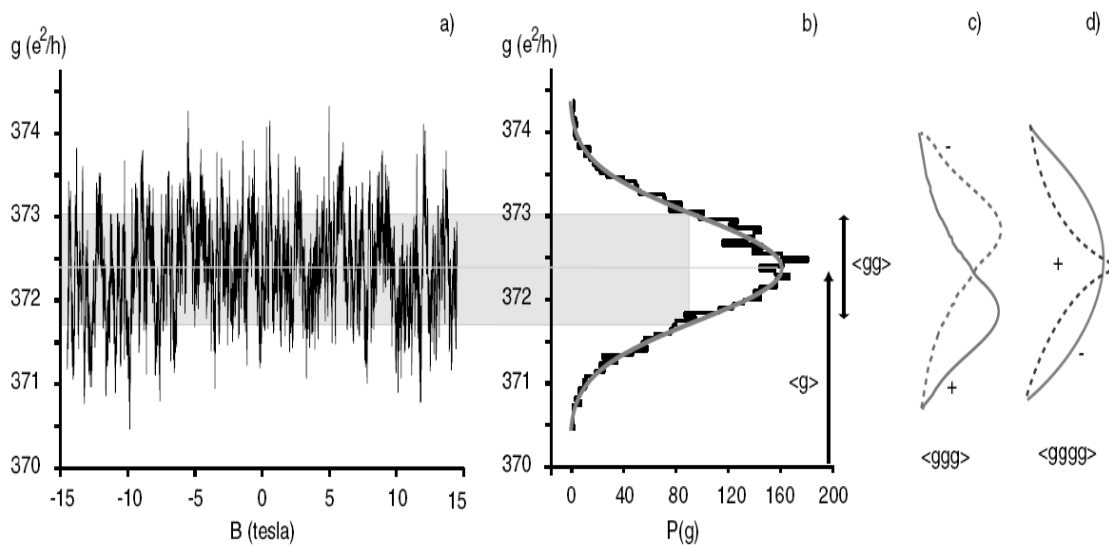


Figura 6.1 a) Flutuações universais de condutância para um fio condutor. As medições foram feitas a uma temperatura de 38 mK . b) Histograma construído a partir das flutuações. Uma curva aproximadamente gaussiana ajusta o histograma. $\langle g \rangle$ e $\langle gg \rangle$ representam o valor médio e a variância da condutância respectivamente. c) Representação de duas distribuições para as quais o terceiro cumulantes é não nulo. d) Gráfico de duas distribuições cujos quartos cumulantes são diferentes de zero. Os sinais de mais e de menos nos dois últimos gráficos representam o sinal do terceiro e do quarto cumulante, respectivamente. A figura foi extraída da ref. [106]

As distribuições de CCT no regime quântico extremo representam uma rica fonte de informação sobre as flutuações quânticas num sistema mesoscópico. Nelas combinam-se as flutuações temporais de corrente causadas pela discretização da carga dos portadores e descritas por cada cumulante, com as flutuações de amostra para amostra devido à coerência espacial que dá lugar à distribuição de cada CCT. Enquanto que para poucos canais abertos as distribuições são largas e irregulares, quando N cresce começam a ser gaussianas pois os efeitos de interferência deixam de ser dominantes, como explicado na introdução. Estas irregularidades no LQE já foram previstas teoricamente para o caso de contatos ideais [89, 92], e observadas experimentalmente em pontos quânticos [107]. A tendência a um comportamento gaussiano no LS foi mostrada analiticamente para a condutância quando os contatos são ideais, embora exista uma divergência referente ao comportamento das caudas [108, 109].

6.3.1 Simulações numéricas

Neste capítulo calcularemos numericamente vários CCT para uma cavidade caótica acoplada a reservatórios normais através de contatos não ideais. As matrizes de espalhamento dos contatos serão modeladas como

$$S_i = \begin{pmatrix} r_i & t'_i \\ t_i & r'_i \end{pmatrix}, \quad (6.17)$$

onde $i \in \{1, 2\}$ e r_i , r'_i , t_i e t'_i são matrizes $N \times N$. Assumiremos que os blocos das matrizes de espalhamento são dados por

$$\begin{cases} r_i = r'_i = \sqrt{1 - \Gamma} I_N, \\ t_i = t'_i = i\sqrt{\Gamma} I_N, \end{cases} \quad (6.18)$$

sendo I_N a matriz identidade de ordem N . Admitiremos portanto que ambos os contatos são idênticos.

As flutuações de amostra para amostra são levadas em conta considerando que a matriz de espalhamento do ponto S_0 pertence ao **ECU** ou ao **ECO**. Os dois casos serão estudados nas simulações. Para calcular qualquer cumulante de carga transmitida, basta tirar o bloco de transmissão da matriz de espalhamento total do sistema que está dada pela parametrização de estube (3.13), e aplicar a fórmula de Levitov e Lesovik. De agora em diante admitiremos que $M_0 = 1$ na eq. (6.14), por simplicidade.

O procedimento seguido nas simulações é o seguinte:

1. Geramos a matriz de espalhamento da cavidade, que pertence a um ensemble circular, através do algoritmo de Hurwitz ⁶.

⁶O algoritmo de Hurwitz gera uma matriz unitária U usando uma decomposição num produto de matrizes cujos determinantes têm valores absolutos iguais a 1. A forma de gerar os elementos matriciais destas matrizes é estabelecida pelo algoritmo. Os elementos matriciais aleatórios são gerados de forma tal que se garante que a medida $U^\dagger dU$ é uniforme, e dessa maneira U pertence ao ECU. Para gerar uma matriz S que pertence ao ECO basta usar a parametrização $S = U^\top U$, onde U pertence ao ECU.

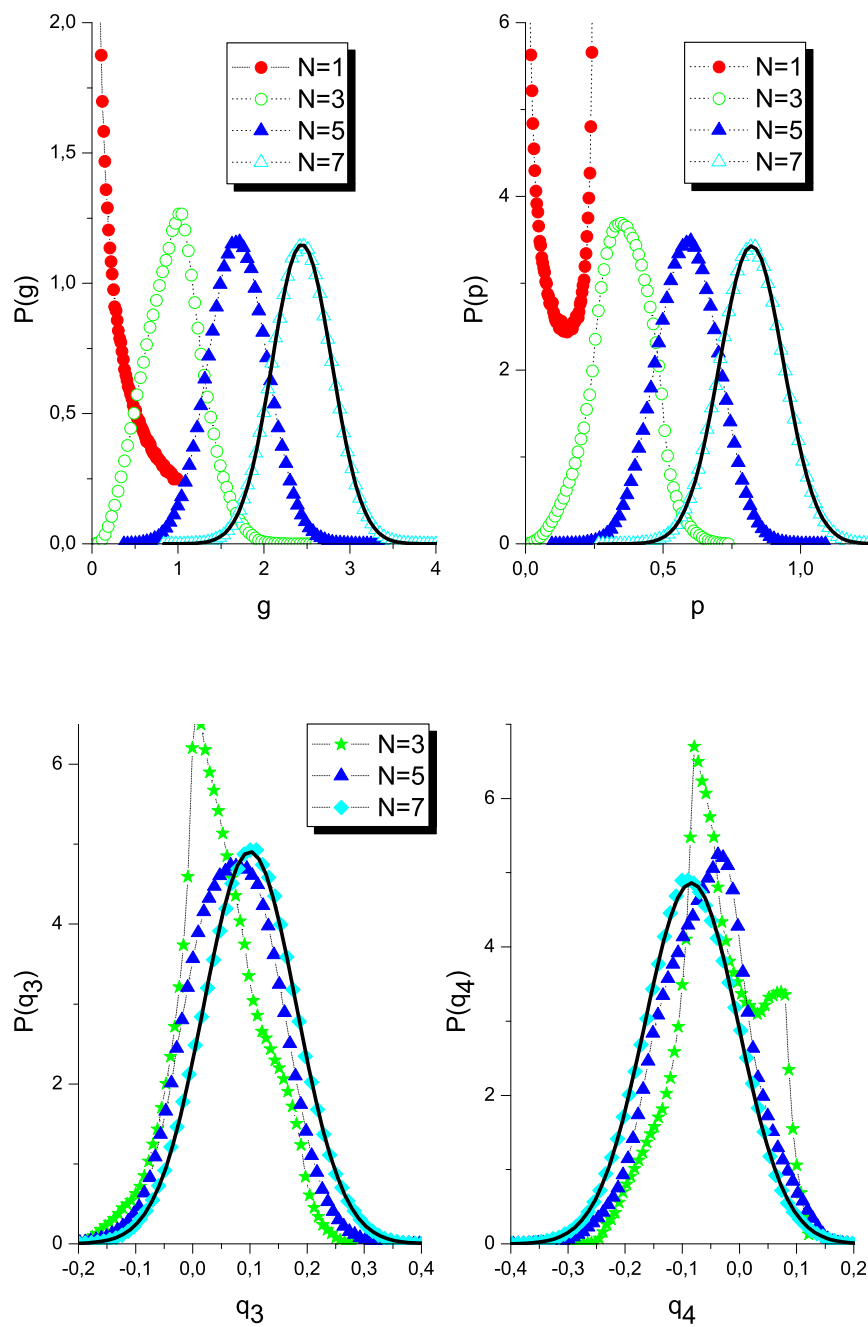


Figura 6.2 Distribuições de condutância g , potência do ruído de disparo p , o terceiro CCT q_3 e o quarto q_4 , para o caso ortogonal, considerando $\Gamma = 0.75$. As linhas sólidas pretas em cada painel representam um ajuste gaussiano feito para cada cumulante quando $N = 7$, enquanto que as linhas pontilhadas representam guias para os olhos. O número de amostras usado na simulação foi 10^6 .

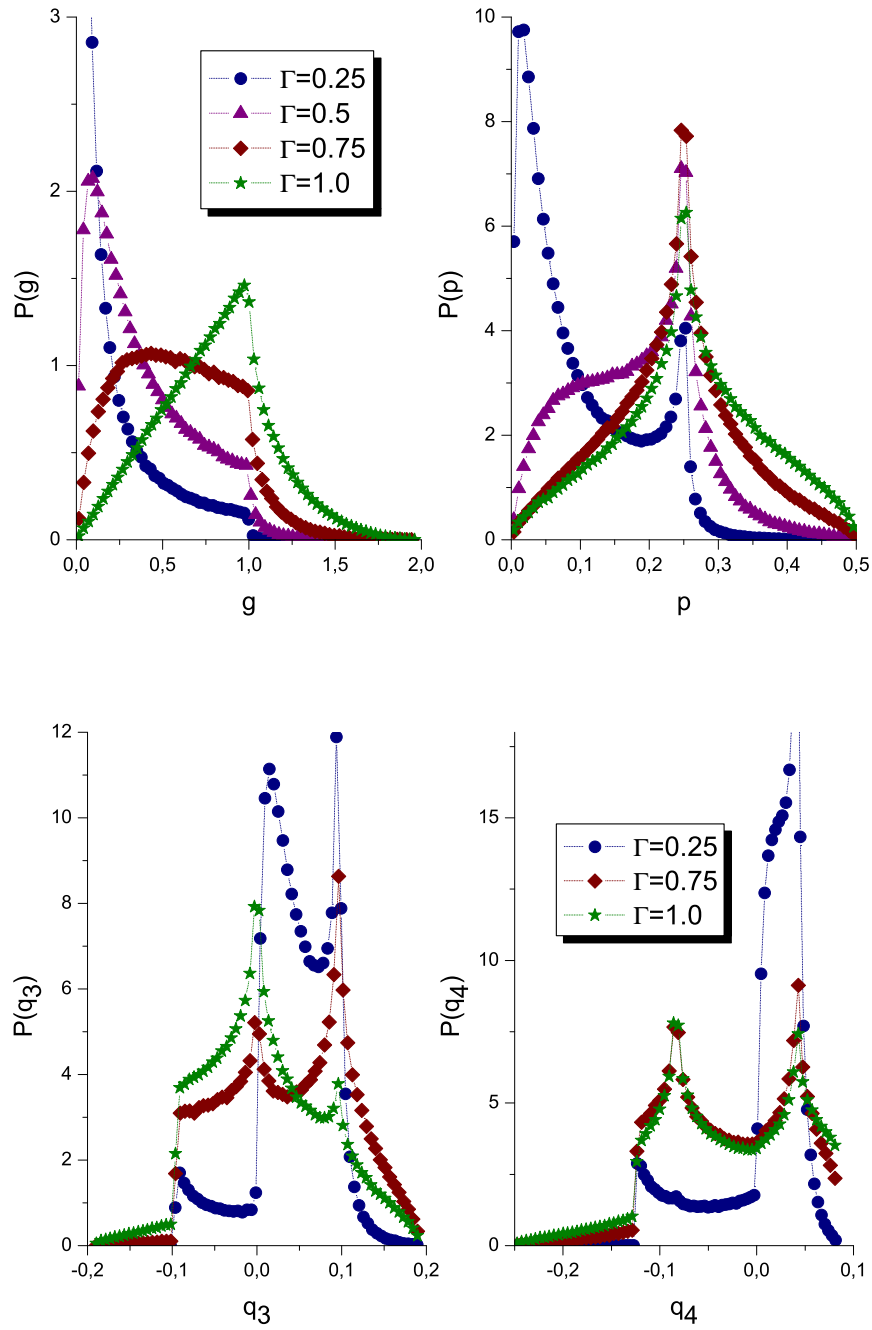


Figura 6.3 Distribuições de condutância g , potência do ruído de disparo p , o terceiro CCT q_3 e o quarto q_4 , para o caso ortogonal. O número de canais abertos em cada guia é dois e foram usados ensembles de 10^6 matrizes. As linhas pontilhadas representam guias para os olhos.

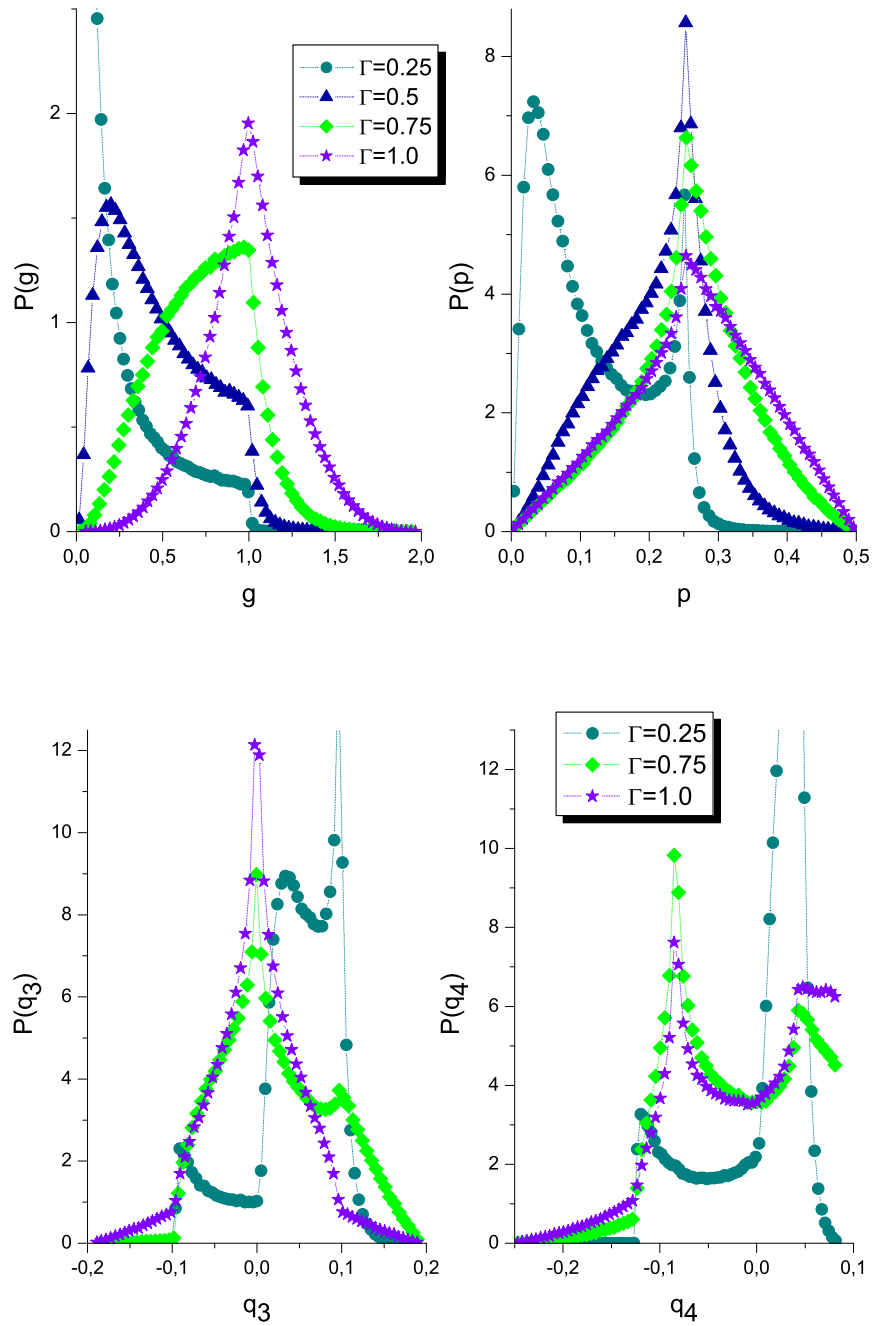


Figura 6.4 Distribuições de condutância g , potência do ruído de disparo p , o terceiro CCT q_3 e o quarto q_4 , para o caso unitário. O número de canais abertos em cada guia é dois e foram usados ensembles de 10^6 matrizes. As linhas pontilhadas representam guias para os olhos.

2. Fazemos a composição da matriz de espalhamento da cavidade com as matrizes de espalhamento dos conectores usando a parametrização de estube.
3. Extraímos o bloco de transmissão da matriz de espalhamento total.
4. Calculamos o cumulante usando a fórmula: $q_m = \text{Tr}[f_m(tt^\dagger)]$.
5. Voltamos ao passo 1 se ainda não atingimos o número de amostras desejado.
6. Usando os valores do cumulante obtidos para cada amostra construímos um histograma, obtendo dessa forma a distribuição.

A fig. 6.2 mostra as irregularidades e a tendência ao comportamento gaussiano à medida que aumenta o número de canais abertos, para as distribuições dos quatro primeiros cumulantes, onde escolhemos a transparência das barreiras igual a 0.75. Note como com sete canais abertos as distribuições já são praticamente gaussianas, independentemente do cumulante, como indica o ajuste gaussiano representado por linhas pretas sólidas em cada painel, feito apenas para as curvas nas que $N = 7$. O ajuste foi feito no Origin versão 7.0. Nas restantes curvas as linhas pontilhadas representam guias para os olhos. Nesse gráfico, assim como o resto das simulações que serão apresentadas, consideramos ensembles de 10^6 matrizes.

Nas figuras 6.3 e 6.4 representamos as distribuições dos quatro primeiros cumulantes para os casos ortogonal e unitário, respectivamente. O número de canais abertos em cada guia é dois. Uma característica extremamente notável nos gráficos é a forte dependência das distribuições com relação à transparência das barreiras. É impossível deixar de notar a forma diferente com que as distribuições dependem dos parâmetros Γ e N . Enquanto o aumento do número de canais abertos faz a distribuição tender a uma gaussiana, a variação da transparência preserva, de maneira geral, as irregularidades da mesma. Tomando o caso ideal como ponto de partida, a diminuição de Γ só aumenta o confinamento dos elétrons dentro da cavidade, o que de maneira alguma suprime os efeitos de interferência. Matematicamente, a diferença acima mencionada está relacionada ao fato de que a distribuição da matriz de espalhamento do sistema todo é dada pelo núcleo de Poisson. Na estrutura matemática da distribuição, Γ e N estão representados de formas totalmente diferentes (ver eq. (3.17)).

Uma outra característica visível nas distribuições no LQE é a presença de não analiticidades. A existência destas já tinha sido notada na literatura [89, 92, 110, 111, 112, 113]. O mais curioso é que suas posições na distribuição não dependem da transparência das barreiras nem do tipo de ensemble, como se vê por exemplo, nas não-analiticidades das distribuições de condutância mostradas nas figs. 6.3 e 6.4 quando $g = 1$. A seguir, explicaremos e calcularemos de maneira exata a posição destas não analiticidades.

6.3.2 Não analiticidade das distribuições

Como foi assinalado na subseção anterior, a presença de pontos não analíticos é claramente visível nas distribuições. Na ref. [92] foi dada uma interpretação geométrica para estas não analiticidades no caso das distribuições da condutância e do ruído de disparo, sendo

que o sistema estudado foi um ponto com contatos ideais. Aqui nós generalizamos essa idéia para distribuições de CCT de ordem arbitrária, e mostramos que para cumulantes de ordem maior do que dois uma análise mais cuidadosa das causas das não analiticidades deve ser feita. Estes resultados foram publicados na ref. [77].

O nosso ponto de partida será a fórmula geral para a distribuição do m -ésimo CCT, q_m , que é dada por

$$P_m(q_m) = \int_C d\vec{\tau} \rho(\vec{\tau}) \delta \left(q_m - \sum_{i=1}^N f_m(\tau_i) \right), \quad (6.19)$$

onde C denota o hipercubo N -dimensional de lado 1, $\rho(\vec{\tau})$ é a probabilidade conjunta de autovalores de transmissão. Os dois fatores no integrando da eq. (6.19) carregam diferentes tipos de informação física. A distribuição conjunta de autovalores de transmissão contém toda a informação física relevante do sistema, incluindo as transparências das barreiras e toda a dinâmica caótica subjacente. Por outro lado, a função δ não expressa nenhuma característica física do sistema, exceto o número de canais abertos N . Geometricamente, a equação (6.14) descreve uma hipersuperfície em $\mathbb{R}^{N+1}$ se tomamos q_m como uma variável adimensional, ou uma hipersuperfície em $\mathbb{R}^N$ se fixamos o valor de q_m . Referiremo-nos a estes dois objetos geométricos como $HS_{N+1}^{(m)}$ e $HS_N^{(m)}$ respectivamente

⁷ Ao contrário de $HS_{N+1}^{(m)}$ que está constituída por só um ramo, $HS_N^{(m)}$ pode ter vários ramos que podem estar truncados pelo hipercubo N -dimensional $0 \leq \tau_i \leq 1$. Para os dois primeiros CCT, $HS_N^{(1)}$ e $HS_N^{(2)}$ são representados por famílias de hiperplanos e hiperesferas respectivamente, como pode ser observado para o caso $N = 2$ na fig. 6.5a e 6.5b. Entretanto, para $m > 2$ existe uma complexa diversidade de formas geométricas quando q_m é variado. Na parte inferior da fig. 6.5 mostramos $HS_2^{(3)}$ e $HS_2^{(4)}$ determinados por alguns valores fixos de q_3 e q_4 respectivamente. Note-se que em algumas regiões as curvas são truncadas pelo quadrado de lado um. No caso da condutância (painel a), as retas deslocam-se desde o extremo inferior esquerdo até o extremo superior direito, na medida em que se aumenta a condutância. No painel b, valores fixos do ruído de disparo definem circunferências concêntricas, que vão diminuindo seu radio até colapsar num ponto para o valor $p = 1/2$. No caso de q_3 , $HS_2^{(3)}$ começa como um ponto num mínimo de $HS_{2+1}^{(3)}$, localizado na interseção dos laços na parte superior direita da fig. 6.5c. Com o incremento de q_3 atinge-se uma configuração que contém dois pontos de sela de $HS_{2+1}^{(3)}$ e então as curvas colapsam para um ponto no máximo de $HS_{2+1}^{(3)}$, localizado na parte inferior esquerda do quadrado, depois de passar por uma série de anéis de tamanho cada vez menor. Similarmente, para o quarto CCT, $HS_2^{(4)}$ parte como um ponto num mínimo de $HS_{2+1}^{(4)}$ no centro do quadrado, alcança uma configuração contendo quatro pontos de sela de $HS_{2+1}^{(4)}$ e finalmente evolui ate quatro pontos de máximos de $HS_{2+1}^{(4)}$, os quais estão localizados próximos dos cantos do quadrado.

Já vimos que as posições das não analiticidades não dependem das transparências das barreiras nem do tipo do ensemble. Motivados por este fato definimos uma função de

⁷O índice $N + 1$ usado na notação $HS_{N+1}^{(m)}$ não é um número. O 1 indica a dimensão a mais que aparece quando na eq. (6.14) toma-se a q_m como uma variável.

distribuição “geométrica”, para distinguir entre as possíveis causas das não analiticidades. A mesma tem a forma

$$\begin{aligned} P_m^G(q_m) &\equiv \left| \frac{dV_G}{dq_m} \right| \\ &= \left| \frac{d}{dq_m} \int_C d\vec{\tau} \, \theta \left(q_m - \sum_{i=1}^N f_m(\tau_i) \right) \right|, \end{aligned} \quad (6.20)$$

onde V_G é o volume limitado pela hipersuperfície $HS_N^{(m)}$. No caso em que $HS_N^{(m)}$ esteja truncada pelo hipercubo, o volume V_G também estará limitado pelas fronteiras do hipercubo.

Começemos a nossa análise com o primeiro CCT. Quando g é incrementado a hipersuperfície $HS_N^{(1)}$ translada-se em $\mathbb{R}^{N+1}$. Cada vez que ela passa por um vértice do hipercubo $0 \leq \tau_i \leq 1$, muda a forma em que $HS_N^{(1)}$ é truncada, o qual a sua vez gera uma descontinuidade em $P_1^G(g) = |dV_G(g)/dg|$ (veja fig. 6.5a). Nos vértices os autovalores de transmissão são zeros ou um, portanto a distribuição de condutância $P_1(g)$, apresenta descontinuidades (as vezes fracas) em $g = \kappa$, com $0 < \kappa \leq N$ em total acordo com a ref. [92].

Consideremos agora os CCT com $m > 1$. Os vértices do hipercubo podem causar não analiticidades apenas nos valores $q_m = 0$ pois quando $m > 1$ temos a propriedade dada pela eq. (6.15). Além dos vértices do hipercubo, observamos dois tipos de situações nas quais a segunda derivada de V_G não existe. O primeiro tipo ocorre quando $HS_N^{(m)}$ passa através de um extremo ou um ponto de sela. Este tipo de singularidade é análogo às *singularidades de Van Hove* na densidade de estados eletrônicos num sólido cristalino [114], e não foi levada em conta na ref. [92]. O segundo tipo corresponde à situação na qual $HS_N^{(m)}$ toca algum extremo do hipercubo diferente de vértices (ver fig. 6.5b, c, d).

No primeiro caso, os pontos não analíticos são encontrados exigindo que o campo vetorial do gradiente da hipersuperfície $HS_N^{(m)}$ se anule, o que implica que $f'_m(\tau_i) = 0$. Denotemos $\mathcal{Z} = \{\tau_i^*\}_{i=1}^l$, como o conjunto dos l zeros da primeira derivada de $f_m(\tau)$, que estão no intervalo $[0, 1]$. Então os pontos não analíticos gerados por este tipo de singularidade podem ser calculados substituindo os valores τ_i^* através de todas as combinações possíveis na eq. (6.14). Cada combinação pode ser descrita por um conjunto de números inteiros positivos $\{\kappa_i\}_{i=1}^l$, de maneira tal que cada número κ_i representa o número de vezes que o valor τ_i^* é substituído nas N funções f_m da eq. (6.14), nessa combinação. Portanto temos que

$$\sum_{i=1}^l \kappa_i = N. \quad (6.21)$$

No segundo tipo de singularidade, que acontece quando $HS_N^{(m)}$ é truncada pelo hipercubo, o gradiente é perpendicular aos vetores que geram as fronteiras do hipercubo (excluindo os vértices), *i.e.* lados, faces, cubos, etc. Vamos supor que o truncamento

acontece num elemento da fronteira que tem dimensão n , onde $1 \leq n \leq (N - 1)$, e denotemos por $\{\vec{e}_{\tau_i}\}_{i=1}^n$ o subconjunto de vetores que gera esse elemento. Este subconjunto pertence à base canônica de $\mathbb{R}^N$. Quando $HS_N^{(m)}$ toca o elemento da fronteira, se cumpre que $\nabla_{\vec{\tau}} q_m \cdot \vec{e}_{\tau_i} = 0$, o que implica que $f'_m(\tau_i) = 0$. Como foi feito anteriormente, podemos calcular os pontos singulares substituindo os zeros de $f'_m(\tau_i)$ em (6.14). No entanto, note que acima do lugar geométrico definido pelo elemento da fronteira em questão, apenas n autovalores podem ser diferentes de 0 e 1. Lembrando a propriedade (6.15), chegamos a que todas as combinações possíveis nas que podemos substituir os τ_i^* em (6.14) podem ser caracterizadas pelo conjunto de números $\{\kappa_i\}_{i=1}^l$, se exigimos que

$$\sum_{i=1}^l \kappa_i = n. \quad (6.22)$$

Se unimos as condições (6.21) e (6.22) ao fato de que os vértices podem causar não analiticidades apenas em $q_m = 0$, obtemos que os pontos onde as singularidades podem acontecer devem satisfazer a relação

$$q_m^* = \sum_{i=1}^l \kappa_i f_m(\tau_i^*), \quad (6.23)$$

onde

$$0 \leq \sum_{i=1}^l \kappa_i \leq N. \quad (6.24)$$

No caso simples em que $N = 1$, a eq. (6.14) define um conjunto contínuo de pontos dados por $q_m = f_m(\tau)$. A eq. (6.20) pode então ser expressa como

$$P_m^G(q_m) = \sum_{j=1}^m \frac{1}{\left| \frac{df_m}{d\tau}(\tau_j^*) \right|} \int_0^1 d\tau \delta(\tau - \tau_j^*), \quad (6.25)$$

onde τ_j^* são raízes da equação polinomial $q_m = f_m(\tau)$. Quando variamos q_m , algumas raízes podem entrar ou sair do intervalo $[0, 1]$, gerando assim não analiticidades em P_m^G .

Com o objetivo de ilustrar o resultado obtido nas equações (6.23) e (6.24), calculemos os valores especiais de q_m^* para o segundo, terceiro e quarto CCT quando $N > 1$. No caso do ruído de disparo temos $\mathcal{Z} = \{1/2\}$ e $f_2(1/2) = 1/4$. Então é fácil ver que $q_2^* = \kappa/4$ onde $0 \leq \kappa \leq N$, em concordância com nossas simulações e com a ref. [92].

Para o terceiro CCT $\mathcal{Z} = \{1/2 \pm \sqrt{3}/6\}$, $f_3(1/2 \pm \sqrt{3}/6) = \mp\sqrt{3}/18$ e dessa forma temos que $q_3^* = (\kappa_1 - \kappa_2)\sqrt{3}/18$, onde $0 \leq \kappa_1 + \kappa_2 \leq N$. Quando $N = 2$ obtemos que as singularidades podem acontecer para q_m^* igual a 0 e ± 0.96 , como é observado nas distribuições do terceiro CCT nas figuras 6.3 e 6.4.

Analogamente para o quarto CCT encontramos que $\mathcal{Z} = \{1/2, 1/2 \pm 1/\sqrt{6}\}$, $f_4(1/2) = -1/8$, $f_4(1/2 \pm 1/\sqrt{6}) = 1/24$ e consequentemente $q_4^* = (-3\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3)/24$ com $0 \leq \kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 \leq N$. Para o caso de dois canais abertos encontramos que os valores de q_m^* são ± 0.083 , -0.125 , e 0.041 . Em todos estes valores aparecem não analiticidades para o quarto CCT, como pode ser conferido nas figuras 6.3 e 6.4.

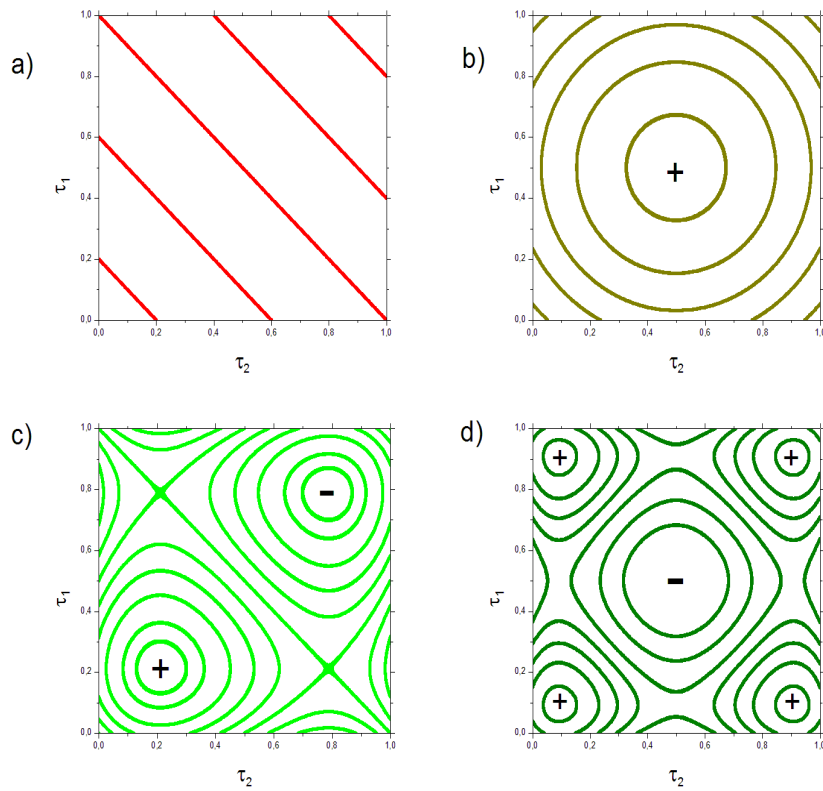


Figura 6.5 Família de curvas $HS_2^{(m)}$ determinadas por alguns valores dos primeiros quatro CCT. Os sinais + e - representam máximos e mínimos das respectivas superfícies $HS_{2+1}^{(m)}$. a) Condução. b) Ruído de disparo. c) Terceiro cumulante. d) Quarto cumulante.

O critério estabelecido acima permite o cálculo das posições dos pontos das não-analiticidades de P_m que foram encontradas em nossas simulações para os quatro primeiros cumulantes. Deve ser destacado o fato de que tal resultado é basicamente geométrico, sendo o número de canais abertos a única grandeza física necessária para a aplicação do mesmo. Contudo, a existência desses pontos especiais dados pela eq. (6.23) não necessariamente implicam no aparecimento de não-analiticidades fortes em $P_m(q_m)$, pois a função de distribuição conjunta, $\rho(\vec{\tau})$, pode suavizar as mesmas, e além do mais, a descontinuidade em $P_m^G(q_m)$ podem ser fracas devido a características especiais do CCT e ao número de canais abertos. Isto é particularmente evidente no limite semiclássico, onde a auto-média tem lugar, como discutido anteriormente.

Finalmente, gostaríamos de comentar que embora que a medição experimental de os quatro primeiros CCT seja hoje feita, vários fatores inevitáveis atualmente no experimento dificultariam a observação das não analiticidades. Um deles é a decoerência, a qual mesmo a temperaturas baixíssimas tem um efeito similar à auto-média. Outro elemento são as interações Coulombianas, as quais estão inevitavelmente presentes nos experimentos atuais, e contribuem de maneira importante na medição dos CCT [106].

6.4 SUMÁRIO

Estudamos as distribuições dos quatro primeiros cumulantes de carga transmitida numa cavidade caótica acoplada a reservatórios normais através de contatos não ideais, com poucos canais de transmissão abertos. O cálculo das distribuições foi feito usando simulações numéricas, implementadas no Mathematica versão 5.2. Nas simulações usamos o algoritmo de Hurwitz para gerar matrizes aleatórias que pertencem a um determinado ensemble circular. Analisamos o ensemble unitário e o ortogonal. Observamos a presença de não analiticidades nas distribuições, explicamos as causas das mesmas e como calcular sua posição exata dentro da distribuição.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta tese estudamos várias propriedades de transporte de diversos tipos de sistemas. A novidade no capítulo 2 foi o estudo de uma cadeia de multi-camadas normais e ferromagnéticas alternadas, usando a teoria quântica de circuitos para sistemas híbridos NF. Estudamos algumas características desse sistema tomando a configuração das magnetizações como sendo helicoidal. Mostramos que quando o tamanho da cadeia cresce, os efeitos de tamanho finito desaparecem e a magnetoresistência tende a uma lei universal que depende apenas do tensor de condutância de cada camada magnética. Também analisamos as propriedades da cadeia como um conector efetivo, e vimos que o efeito de variar o número de voltas na configuração das magnetizações é modificar o tensor de condutância efetivo. Acreditamos no entanto, que o nosso estudo precisa ser refinado, levando em conta a acumulação de spin nas camadas ferromagnéticas, como foi feito na ref. [41] para uma válvula de spin. Também é necessário considerar a renormalização dos tensores de condutância como feito na ref. [40].

Uma qualidade unificadora presente quase na totalidade da tese foi o uso de um modelo de estube. Vimos como o grau de liberdade de spin, o grau de liberdade de elétron-buraco ou uma estrutura topológica complexa podem ser incorporados na matriz de espalhamento do sistema usando a parametrização de estube. No capítulo 3, fizemos um mapa entre um circuito quântico com topologia arbitrária e um modelo de estube. Isto nos permitiu fazer a composição das matrizes de espalhamentos de todos os elementos do sistema de uma maneira diferente da forma tradicional, e construir assim a matriz de espalhamento total. O preço a pagar por tal construção foi um aumento na dimensão da matriz de espalhamento do sistema. Contudo, o fato dela ser expressa através da parametrização de estube possibilita o cálculo de um dado observável, através do método diagramático para fazer médias sobre ensembles circulares, fazendo apenas uma importação dos diagramas obtidos para o mesmo observável num sistema com uma única cavidade caótica. A praticidade desta regra foi evidenciada calculando a correção de localização fraca da condutância para uma cadeia linear de cavidades acopladas através de contatos com transparências iguais mas arbitrárias, e para quatro cavidades acopladas com a topologia do quadrado. Em nosso modelo, foram as cavidades caóticas as que fizeram o papel de estube, cujo efeito nos guias é misturar os modos de propagação. No entanto, o estube também tem sido usado para introduzir os efeitos de um campo magnético, da interação spin-órbita e dos fenômenos de descoerência [50, 51]. Um estube adicional pode ser facilmente incluído na nossa parametrização, pois na direção de propagação ele é caracterizado por uma matriz de reflexão. Basta completar a estrutura na direção de propagação introduzindo blocos de transmissão nulos, como foi feito no capítulo 5 para a interface NS, e o estube adicional está pronto para ser considerado como um terminal a mais.

No capítulo 4 estudamos uma cavidade caótica unida a um número determinado de reservatórios normais e ferromagnéticos com magnetizações não colineares. Explicamos como incluir o grau de liberdade de spin na parametrização da matriz de espalhamento. Definimos também um conjunto reduzido de parâmetros para cada contato, suficientes para calcular qualquer observável com estatística linear nos autovalores de transmissão. Como exemplo, analisamos a cavidade acoplada a dois reservatórios ferromagnéticos, e calculamos a condutância e o fator Fano. Estudamos o fator Fano para contatos assimétricos, nos casos particulares de contatos balísticos e barreiras de tunelamento. Diferentemente do que acontece com a condutância [43], não encontramos grandes diferenças qualitativas entre o caso simétrico estudado na ref. [61] e o caso assimétrico. Em princípio, os efeitos da interação spin-órbita e o de um campo magnético aplicado podem ser incluídos como explicado acima para sistemas normais. Seria interessante estudar a dependência do ruído de disparo com relação a um campo magnético, como foi feito na ref. [115] para a condutância. O formalismo poderia encontrar aplicações em sistemas com componentes semicondutores, onde os efeitos de interferência são mais significativos.

O grau de liberdade de elétron-buraco foi introduzido na parametrização de estube no capítulo 5, onde estudamos uma cavidade caótica acoplada a um reservatório normal e a outro supercondutor, na ausência de simetria de reversão temporal. Calculamos a condutância do sistema e a comparamos com o caso ortogonal. Caracterizamos o fator Fano, e explicamos seu comportamento em alguns casos limites. Comprovamos que a inclusão de barreiras nos contatos traz uma nova fenomenologia. Isto é particularmente visível para a correção de localização fraca da condutância, onde observamos uma transição entre localização e antilocalização induzida completamente pelas transparências das barreiras. Seria interessante encontrar uma explicação em termos de trajetórias semiclássicas para este efeito.

No capítulo 6 implementamos simulações numéricas para estudar as distribuições dos quatro primeiros cumulantes de carga transmitida numa cavidade caótica acoplada de maneira não ideal a dois reservatórios normais, no limite quântico extremo. Para isto implementamos o algoritmo de Hurwitz [80], que gera matrizes que pertencem ao ensemble circular, e utilizamos novamente a parametrização de estube para modelar a matriz de espalhamento total. Observamos que as distribuições apresentam não analiticidades, explicamos as causas das mesmas e encontramos uma forma de prever as posições dentro da distribuição onde elas podem aparecer. Em particular, foi descoberto um novo tipo de não analiticidade análoga às de Van Hove para a densidade eletrônica de um sólido cristalino.

Esperamos no futuro poder estudar dispositivos onde sejam combinados o grau de liberdade de spin, o grau de liberdade de elétron-buraco e novos tipos de topologia do sistema.

APÊNDICE A

PROPRIEDADES DAS MATRIZES DE PROJEÇÃO

A identidade básica a partir da qual deduzem-se as propriedades dos projetores é [5]

$$(\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) (\vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) = \vec{a} \cdot \vec{b} \hat{1} + i (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \hat{\vec{\sigma}}. \quad (\text{A.1})$$

Sejam $\hat{u}^s = \frac{1}{2}(\hat{1} + s\vec{m} \cdot \hat{\vec{\sigma}})$ e $\hat{A} = \frac{1}{2}(a_0\hat{1} + \vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}})$ as matrizes de projeção na direção $\vec{m}$ e uma matriz arbitrária definida no espaço de spin, respectivamente. As componentes paralelas e perpendiculares do vetor $\vec{a}$ na direção $\vec{m}$ estão dadas, respectivamente, por $\vec{a}^{\parallel} = (\vec{a} \cdot \vec{m}) \vec{m}$ e $\vec{a}^{\perp} = \vec{a} - \vec{a}^{\parallel}$. Definimos $\hat{A}^{\parallel} = \frac{1}{2}(a_0\hat{1} + \vec{a}^{\parallel} \cdot \hat{\vec{\sigma}})$ e $\hat{A}^{\perp} = \frac{1}{2}\vec{a}^{\perp} \cdot \hat{\vec{\sigma}}$. Então valem as relações:

$$\hat{u}^s \hat{u}^{s'} = \delta_{s,s'} \hat{u}^s, \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \hat{u}^s \hat{A} \hat{u}^{s'} = & \frac{\delta_{s,s'}}{4} [a_0 + s \vec{a} \cdot \vec{m}] \hat{1} + \frac{1}{8} [\vec{a} + s (2 a_0 \delta_{s,s'} + s' \vec{a} \cdot \vec{m}) \vec{m} + \\ & 2 i s (1 - \delta_{s,s'}) \vec{m} \times \vec{a} - s s' \vec{m} \times \vec{a} \times \vec{m}] \cdot \hat{\vec{\sigma}}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\sum_s \hat{u}^s \hat{A} \hat{u}^s = \hat{A}^{\parallel}, \quad (\text{A.4})$$

$$\sum_s \hat{u}^s \hat{A} \hat{u}^{\bar{s}} = \hat{A}^{\perp}. \quad (\text{A.5})$$

APÊNDICE B

EXPRESSÕES ALGÉBRICAS PARA OS ELEMENTOS DE $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ E $\mathcal{L}$

As expressões para os vetores $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ são dadas por

$$\mathcal{A} = (G_a^{\uparrow\uparrow}, 0, 0, G_a^{\downarrow\downarrow}), \quad (\text{B.1})$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{B}_1 = G_b^{\uparrow\uparrow} \cos^2 \frac{\theta}{2} + G_b^{\downarrow\downarrow} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \\ \mathcal{B}_2 = \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} (G_b^{\uparrow\uparrow} - G_b^{\downarrow\downarrow}), \\ \mathcal{B}_3 = \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} (G_b^{\uparrow\uparrow} - G_b^{\downarrow\downarrow}), \\ \mathcal{B}_4 = G_b^{\uparrow\uparrow} \sin^2 \frac{\theta}{2} + G_b^{\downarrow\downarrow} \cos^2 \frac{\theta}{2}, \end{array} \right. \quad (\text{B.2})$$

onde $G_i^{s_1, s_2}$ é o tensor de condutância (2.7) e $i \in \{a, b\}$. Nem todos os elementos da matriz $\mathcal{L}$ são independentes. Por causa das propriedades do traço, e das Eqs. (4.28) e (4.27), valem as seguintes relações

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{L}_{12} = \mathcal{L}_{21} = \mathcal{L}_{13}^* = \mathcal{L}_{31}^*, \\ \mathcal{L}_{14} = \mathcal{L}_{41} = \mathcal{L}_{23} = \mathcal{L}_{32}, \\ \mathcal{L}_{24} = \mathcal{L}_{42} = \mathcal{L}_{34}^* = \mathcal{L}_{43}^*, \\ \mathcal{L}_{22} = \mathcal{L}_{33}^*. \end{array} \right. \quad (\text{B.3})$$

Os termos independentes são dados por

$$\left\{ \begin{array}{l}
\mathcal{L}_{11} = N_a - G_a^{\uparrow\uparrow} + \cos^4 \frac{\theta}{2} (N_b - G_b^{\uparrow\uparrow}) + \sin^4 \frac{\theta}{2} (N_b - G_b^{\downarrow\downarrow}) + \\
\quad 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} (N_b - \text{Re}(G_b^{\uparrow\downarrow})), \\
\\
\mathcal{L}_{22} = N_a - G_a^{\uparrow\downarrow} + \cos^4 \frac{\theta}{2} (N_b - G_b^{\uparrow\downarrow}) + \sin^4 \frac{\theta}{2} (N_b - (G_b^{\uparrow\downarrow})^*) + \\
\quad 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} (2N_b - G_b^{\uparrow\uparrow} - G_b^{\downarrow\downarrow}), \\
\\
\mathcal{L}_{44} = N_a - G_a^{\downarrow\downarrow} + \cos^4 \frac{\theta}{2} (N_b - G_b^{\downarrow\downarrow}) + \sin^4 \frac{\theta}{2} (N_b - G_b^{\uparrow\uparrow}) + \\
\quad 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} (N_b - \text{Re}(G_b^{\uparrow\downarrow})), \\
\\
\mathcal{L}_{12} = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} (G_b^{\uparrow\downarrow} - G_b^{\uparrow\uparrow}) - \sin^2 \frac{\theta}{2} ((G_b^{\uparrow\downarrow})^* - G_b^{\downarrow\downarrow}) \right), \\
\\
\mathcal{L}_{24} = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} (G_b^{\downarrow\downarrow} - G_b^{\uparrow\downarrow}) + \sin^2 \frac{\theta}{2} ((G_b^{\uparrow\downarrow})^* - G_b^{\uparrow\uparrow}) \right), \\
\\
\mathcal{L}_{14} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \left(2 \text{Re}(G_b^{\uparrow\downarrow}) - G_b^{\uparrow\uparrow} - G_b^{\downarrow\downarrow} \right).
\end{array} \right. \tag{B.4}$$

APÊNDICE C

METODOLOGIA PARA REDUZIR O NÚMERO DE ELEMENTOS DE $\mathcal{T}^2$ A SEREM CALCULADOS

O primeiro passo é identificar as simetrias que obedecem os elementos da matriz que necessitamos calcular. Considere a matriz

$$L_{s_1, s_2} \equiv R_{\sigma_1, \sigma_2} R_{\sigma_3, \sigma_4}^\dagger. \quad (\text{C.1})$$

Seja g a operação de inversão de spin, que troca σ por $\bar{\sigma}$. Valem as seguintes propriedades:

1. $\text{Tr} [L_{s_1, s_2} L_{s_3, s_4}] = \text{Tr} [L_{s_3, s_4} L_{s_1, s_2}]$.
2. $R_{1,2} = R_{2,1}$.
3. $g(R_{1,1}) = R_{2,2}$; $g(R_{2,3}) = R_{1,1}$; $g(R_{1,2}) = -R_{1,2}$.
4. $g(L_{s_1, s_2} L_{s_3, s_4}) = g(L_{s_1, s_2}) g(L_{s_3, s_4})$.
5. $g(L_{1,4}) = L_{1,4}$.
6. $g(L_{2,2}) = L_{2,2}^\dagger$.
7. $\text{Tr} [L_{s_1, s_2}^\dagger L_{s_3, s_4}^\dagger] = \text{Tr} [L_{s_3, s_4} L_{s_1, s_2}]^*$.
8. $\text{Tr} [L_{s_1, s_2} L_{s_3, s_4}^\dagger] = \text{Tr} [L_{s_3, s_4}^\dagger L_{s_1, s_2}]^*$.
9. $\text{Tr} [L_{1,1} L_{1,2}] = \text{Tr} [L_{1,1} L_{1,2}^\dagger]^*$.
10. $\text{Tr} [L_{1,1} L_{2,2}] = \text{Tr} [L_{1,1} L_{2,2}^\dagger]^*$.
11. $\text{Tr} [g(L_{1,1}) L_{2,2}^\dagger] = \text{Tr} [L_{1,1} L_{2,2}]^*$.
12. $\text{Tr} [L_{1,4} L_{1,3}^\dagger] = \text{Tr} [L_{1,4} L_{1,3}]^*$.

Usando agora as propriedades 2 e 3, podemos escrever a matriz L em termo de 9 elementos, como mostrado a seguir:

$$L = \begin{pmatrix} L_{1,1} & L_{1,2} & L_{1,2}^\dagger & L_{1,4} \\ L_{1,2} & L_{2,2} & L_{1,4} & -g(L_{1,2}^\dagger) \\ L_{1,2}^\dagger & L_{1,4} & L_{2,2}^\dagger & -g(L_{1,2}) \\ L_{1,4} & -g(L_{1,2}^\dagger) & -g(L_{1,2}) & g(L_{1,1}) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

onde consideramos aos elementos da forma $g(L_{s_1, s_2})$ e $L_{s_1, s_2}^\dagger$ como independentes também. Por sua vez, a matriz $\mathcal{T}^2$ está determinada pelo traço dos elementos de $L \otimes L$. Apenas considerando as simetrias mostradas na eq. (C.2) vemos que o número de elementos de $\mathcal{T}^2$ a serem calculados é reduzido de 256 para 81. Podemos ainda diminuir mais este valor usando a tabela C.1 de simetrias, na qual os números indicam a propriedade que pode ser usada para obter o elemento resultando do produto dos elementos da linha e a coluna que se cruzam nessa posição, a partir de algum outro elemento livre. Vemos que restam apenas 29 elementos livres, os quais por sua vez, podem ser reduzidos a 11 elementos genéricos. Estes últimos não são escritos aqui por brevidade.

	$L_{1,1}$	$L_{1,2}$	$L_{2,2}$	$L_{1,4}$	$L_{1,2}^\dagger$	$L_{2,2}^\dagger$	$g(L_{1,1})$	$-g(L_{1,2})$	$-g(L_{1,2}^\dagger)$
$L_{1,1}$							9	10	
$L_{1,2}$	1								
$L_{2,2}$	1	1							
$L_{1,4}$	1	1	1		12		4,5	4,5	4,5
$L_{1,2}^\dagger$	1	1	1	1	7	7			
$L_{2,2}^\dagger$	1	1	1	1	1	7	11		
$g(L_{1,1})$	1	1	1	1	1	1	4	4	4
$-g(L_{1,2})$	1	1	1	1	1	1	1	4	4
$-g(L_{1,2}^\dagger)$	1	1	1	1	1	1	1	1	4

Tabela C.1 Tabela de simetrias para a matriz $\mathcal{T}^2$.

APÊNDICE D

EXPRESSÕES EXPLÍCITAS DOS COEFICIENTES DAS FÓRMULAS DO FATOR FANO

Os coeficientes E_n^{tun} e H_n^{tun} da fórmula (4.56) para o fator Fano no caso de junções de tunelamento, são organizados na tabela D.1. Analogamente, os coeficientes E_n^{bal} e H_n^{bal} da expressão (4.56) são apresentados na tabela D.2.

$E_0^{\text{tun}} = -16 + p_b^6 + 3p_b^4p_a^2 + 3p_a^4p_b^2 + 8p_b^3p_a^3 + 24p_bp_a - 16p_b^3p_a - 16p_bp_a^3 - 12p_b^2p_a^2 - 2p_a^4 + 12p_a^2 + 12p_b^2 - 2p_b^4 + p_a^6$
$E_1^{\text{tun}} = -2p_bp_a(24 - 16p_b^2 + 12p_bp_a^3 + 12p_b^3p_a - 16p_a^2 - 16p_bp_a - 2p_b^3p_a^3 + p_ap_b^5 + p_bp_a^5)$
$E_2^{\text{tun}} = -2p_b^2p_a^2(-12p_a^2 - 12p_b^2 + 4p_b^3p_a^3 + 2p_a^4p_b^2 - 22p_b^2p_a^2 + 24p_bp_a - p_a^4 + 16 - p_b^4 + 2p_b^4p_a^2)$
$E_3^{\text{tun}} = 8p_b^3p_a^3(4 + 4p_b^2p_a^2 + p_bp_a^3 - 12p_bp_a + p_b^3p_a)$
$E_4^{\text{tun}} = -4p_b^4p_a^4(p_a^2 + p_b^2 + 10p_bp_a - 12)$
$E_5^{\text{tun}} = 16p_a^5p_b^5$
$H_0^{\text{tun}} = (-2 + p_a^2 + p_b^2)(p_a + p_b + 2)^2(p_a + p_b - 2)^2$
$H_1^{\text{tun}} = -2p_bp_a(p_a + p_b + 2)(p_a + p_b - 2)(p_bp_a^3 + 4p_a^2 + 2p_b^2p_a^2 + p_b^3p_a - 4p_bp_a - 8 + 4p_b^2)$
$H_2^{\text{tun}} = 2p_b^2p_a^2(-48p_bp_a + 12p_b^3p_a + 22p_b^2p_a^2 + 12p_bp_a^3 + p_b^4 + p_a^4)$
$H_3^{\text{tun}} = -16p_b^3p_a^3(4p_bp_a - 4 + p_b^2 + p_a^2)$
$H_4^{\text{tun}} = 32p_b^4p_a^4$

Tabela D.1 Expressões algébricas para os coeficientes da fórmula geral do fator Fano no caso de junções de tunelamento.

$E_0^{\text{bal}} = 2(p_a - 2 + p_b)(p_a^5 p_b + p_a^4 p_b^2 - 2p_a^4 - 2p_b p_a^3 - 4p_b^2 p_a^2 + p_a^2 p_b^4 + 5p_a^2 - 2p_b^3 p_a + p_b^5 p_a + 2p_b p_a - 2p_b^4 - 4 + 5p_b^2)(p_a + p_b + 2)^4$
$E_1^{\text{bal}} = 4p_b p_a (48 + 24p_a + 24p_b - 20p_a^5 p_b - 27p_a^4 p_b^2 + 64p_b p_a^3 + 84p_b^2 p_a^2 - 27p_a^2 p_b^4 + 64p_b^3 p_a - 20p_b^5 p_a - 72p_b p_a + 30p_a^4 - 68p_a^2 + 30p_b^4 - 68p_b^2 + 9p_b^4 p_a - 18p_a^3 - 18p_b^3 - 16p_a^3 p_b^3 - 2p_b^2 p_a^3 - 2p_b^3 p_a^2 + 9p_a^4 p_b - 22p_b^2 p_a - 22p_b p_a^2 + p_a^5 + p_b^5 - p_b^6 - p_a^6 + 4p_a^4 p_b^3 + 4p_b^4 p_a^3 + 3p_a^5 p_b^2 + 3p_a^2 p_b^5 + p_a^6 p_b + p_b^6 p_a)(p_a + p_b + 2)^3$
$E_2^{\text{bal}} = -4p_b p_a (64 + 80p_a + 80p_b - 102p_a^5 p_b - 193p_a^4 p_b^2 + 372p_b p_a^3 + 372p_b^2 p_a^2 - 193p_a^2 p_b^4 + 372p_b^3 p_a - 102p_b^5 p_a - 416p_b p_a + 42p_a^4 - 104p_a^2 + 42p_b^4 - 104p_b^2 + 294p_b^4 p_a - 92p_a^3 - 92p_b^3 - 196p_a^3 p_b^3 + 396p_b^2 p_a^3 + 396p_b^3 p_a^2 + 294p_a^4 p_b - 388p_b^2 p_a - 388p_b p_a^2 + 30p_a^5 + 30p_b^5 + p_b^6 + p_a^6 - 104p_a^4 p_b^3 - 104p_b^4 p_a^3 + 28p_a^6 p_b^2 + 35p_a^5 p_b^3 + 28p_a^2 p_b^6 + p_a^7 p_b - 178p_a^5 p_b^2 - 178p_a^2 p_b^5 + 16p_a^4 p_b^4 + 35p_a^3 p_b^5 - 38p_a^6 p_b - 38p_b^6 p_a + p_b^7 p_a)(p_a + p_b + 2)^2$
$E_3^{\text{bal}} = 16p_b p_a (p_a + p_b + 2)(6p_a^5 p_b - 50p_a^4 p_b^2 + 148p_b p_a^3 + 272p_b^2 p_a^2 - 50p_a^2 p_b^4 + 148p_b^3 p_a + 6p_b^5 p_a - 208p_b p_a + 12p_a^4 - 16p_a^2 + 12p_b^4 - 16p_b^2 + 236p_b^4 p_a - 8p_a^3 - 8p_b^3 + 132p_a^3 p_b^3 + 562p_b^2 p_a^3 + 562p_b^3 p_a^2 + 236p_a^4 p_b - 240p_b^2 p_a - 240p_b p_a^2 + 10p_a^5 + 10p_b^5 + 2p_b^6 + 2p_a^6 - 4p_a^5 p_b^4 - 258p_a^4 p_b^3 - 258p_b^4 p_a^3 - 52p_a^6 p_b^2 + 11p_b^7 p_a^2 + 49p_a^3 p_b^6 - 4p_a^4 p_b^5 - 111p_a^5 p_b^3 + 49p_a^6 p_b^2 - 52p_a^2 p_b^6 - 5p_a^7 p_b - 319p_a^5 p_b^2 - 319p_a^2 p_b^5 + 11p_a^7 p_b^2 - 64p_a^4 p_b^4 - 111p_a^3 p_b^5 - 39p_a^6 p_b - 39p_b^6 p_a - 5p_b^7 p_a)$
$E_4^{\text{bal}} = -16p_b p_a (49p_a^5 p_b + 123p_a^4 p_b^2 + 92p_b p_a^3 + 704p_b^2 p_a^2 + 123p_a^2 p_b^4 + 92p_b^3 p_a + 49p_b^5 p_a - 96p_b p_a + 12p_a^4 + 12p_b^4 + 196p_b^4 p_a + 8p_a^3 + 8p_b^3 + 1014p_a^3 p_b^3 + 1278p_b^2 p_a^3 + 1278p_b^3 p_a^2 + 196p_a^4 p_b - 128p_b^2 p_a - 128p_b p_a^2 + 6p_a^5 + 6p_b^5 + p_b^6 + p_a^6 + 5p_b^2 p_a^8 + 47p_b^4 p_a^6 - 418p_a^5 p_b^4 + 81p_a^7 p_b^3 + 81p_b^7 p_a^3 - 624p_a^4 p_b^3 - 624p_b^4 p_a^3 - 372p_a^6 p_b^2 - 18p_b^7 p_a^2 + 5p_b^8 p_a^2 + 12p_a^3 p_b^6 - 186p_b^5 p_a^5 - 418p_a^4 p_b^5 - 833p_a^5 p_b^3 + 12p_a^6 p_b^3 - 372p_a^2 p_b^6 - 11p_a^7 p_b - 794p_a^5 p_b^2 - 794p_a^2 p_b^5 - 18p_a^7 p_b^2 - 848p_a^4 p_b^4 - 833p_a^3 p_b^5 + 47p_b^6 p_a^4 - 30p_a^6 p_b - 30p_b^6 p_a - 11p_b^7 p_a)$
$E_5^{\text{bal}} = 64p_a^3 p_b^3 (88 + 120p_a + 120p_b + 13p_a^5 p_b + 14p_a^4 p_b^2 - 128p_b p_a^3 - 270p_b^2 p_a^2 + 14p_a^2 p_b^4 - 128p_b^3 p_a + 13p_b^5 p_a + 68p_b p_a - 37p_a^4 - 14p_a^2 - 37p_b^4 - 14p_b^2 + 19p_b^4 p_a - 96p_a^3 - 96p_b^3 - 94p_a^3 p_b^3 - 154p_b^2 p_a^3 - 154p_b^3 p_a^2 + 19p_a^4 p_b - 144p_b^2 p_a - 144p_b p_a^2 - p_a^5 - p_b^5)$
$E_6^{\text{bal}} = -64p_a^3 p_b^3 (16 - 7p_b^4 + 24p_b + 3p_a^5 p_b + 24p_a - 18p_a^3 - 234p_b^2 p_a^2 + 12p_a^4 p_b^2 - 18p_b^3 + 3p_b^5 p_a + 12p_a^2 p_b^4 + 14p_b^4 p_a - 20p_b p_a - 56p_b^3 p_a - 82p_a^3 p_b^3 - 126p_b^2 p_a^3 - 7p_a^4 - 126p_b^3 p_a^2 + 14p_a^4 p_b - 102p_b^2 p_a - 56p_b p_a^3 - 102p_b p_a^2)$
$E_7^{\text{bal}} = 258p_b^4 p_a^4 (p_a + 1)(p_b + 1)(p_b^2 - 8p_b p_a - 6p_b + p_a^2 - 6 - 6p_a)$
$E_8^{\text{bal}} = 258p_a^4 p_b^4 (p_b + 1)^2 (p_a + 1)^2$
$H_0^{\text{bal}} = (p_a + p_b + 2)^6 (p_a^2 + p_b^2 - 2)(p_a - 2 + p_b)^3$
$H_1^{\text{bal}} = -4p_b p_a (7p_b^2 - p_b - 14 + p_b^2 p_a - p_a + p_b p_a^2 + 7p_a^2)(p_a - 2 + p_b)^2 (p_a + p_b + 2)^5$
$H_2^{\text{bal}} = 4p_b p_a (p_a - 2 + p_b)(p_a^4 p_b + 4p_a^4 + 27p_b^2 p_a^3 - p_a^3 + 80p_b p_a^3 - 31p_b p_a^2 + 8p_b^2 p_a^2 - 24p_a^2 + 27p_b^3 p_a^2 + 4p_a + 80p_b^3 p_a + p_b^4 p_a - 31p_b^2 p_a - 160p_b p_a - 24p_b^2 + 4p_b^4 + 32 - p_b^3 + 4p_b)(p_a + p_b + 2)^4$
$H_3^{\text{bal}} = -16p_b^2 p_a^2 (p_a + p_b + 2)^3 (21p_a^4 + 9p_a^4 p_b + 75p_b^2 p_a^3 - 9p_a^3 + 122p_b p_a^3 - 111p_b p_a^2 + 42p_b^2 p_a^2 - 126p_a^2 + 75p_b^3 p_a^2 + 36p_a + 122p_b^3 p_a + 9p_b^4 p_a - 111p_b^2 p_a - 244p_b p_a - 126p_b^2 + 21p_b^4 + 168 - 9p_b^3 + 36p_b)$
$H_4^{\text{bal}} = 16p_b^2 p_a^2 (96 + 72p_a + 72p_b + 3p_a^5 p_b + 108p_a^4 p_b^2 + 192p_b p_a^3 - 82p_b^2 p_a^2 + 108p_a^2 p_b^4 + 192p_b^3 p_a + 3p_b^5 p_a - 600p_b p_a + 9p_a^4 - 60p_a^2 + 9p_b^4 - 60p_b^2 + 168p_b^4 p_a - 42p_a^3 - 42p_b^3 + 338p_a^3 p_b^3 + 506p_b^2 p_a^3 + 506p_b^3 p_a^2 + 168p_a^4 p_b - 582p_b^2 p_a - 582p_b p_a^2 + 6p_a^5 + 6p_b^5)(p_a + p_b + 2)^2$
$H_5^{\text{bal}} = -64p_a^3 p_b^3 (-84 - 72p_a - 72p_b + 15p_b p_a^3 + 131p_b p_a^2 + 21p_b^3 + 110p_b^2 p_a^2 + 131p_b^2 p_a + 27p_a^2 + 21p_a^3 + 50p_b p_a + 27p_b^2 + 15p_b^3 p_a)(p_a + p_b + 2)^2$
$H_6^{\text{bal}} = 64p_a^3 p_b^3 (-16 - 14p_a - 14p_b + 3p_b^3 p_a + 82p_b p_a^2 + 4p_b^3 + 78p_b^2 p_a^2 + 82p_b^2 p_a + 5p_a^2 + 4p_a^3 + 66p_b p_a + 5p_b^2 + 3p_b^3 p_a)(p_a + p_b + 2)^2$
$H_7^{\text{bal}} = -1792p_a^4 p_b^4 (p_b + 1)(p_a + 1)(p_a + p_b + 2)^2$
$H_8^{\text{bal}} = 256p_a^4 p_b^4 (p_b + 1)(p_a + 1)(p_a + p_b + 2)^2$

Tabela D.2 Expressões algébricas para os coeficientes da fórmula geral do fator Fano no caso de contatos balísticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Yu. V. Nazarov and Ya. M. Blanter em *Quantum Transport*, (Cambridge University Press, 2009).
- [2] N. Chernov and R. Markarian, *Mathematical Surveys and Monographs* **127**, Am. Math. Soc., (2006).
- [3] Z. Rudnick, What is Quantum Chaos?, *Not. Am. Math. Soc.* **55** 32 (2008).
- [4] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. A* **413** 183 (1987).
- [5] J. J. Sakurai in *Introduction to Quantum Mechanics*, (Addison-Wesley Publishing Company, 1994).
- [6] I. L. Aleiner and A. I. Larkin, *Phys. Rev. B* **54** 14423 (1996).
- [7] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69** 731 (1997).
- [8] J. N. Kupferschmidt and P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **78** 125313 (2008).
- [9] M. J. Berry, J. A. Katine, R. M. Westervelt, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **50** 17721 (1994).
- [10] Esta figura foi tirada do site: www.phy.cam.ac.uk.
- [11] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer, Berlin, 1991).
- [12] O. Bohigas, M. J. Giannoni and C. Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52** 1 (1984).
- [13] A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. Lett.* **76** 3420 (1996).
- [14] A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. B* **55** 1142 (1997).
- [15] C. W. J. Beenakker, *cond-mat/0406018v3* (2004).
- [16] B. Béri, *cond-mat/0902.2164* (2009).
- [17] L. P. Kouwenhoven, D.G. Austing and S. Tarucha, *Rep. Prog. Phys.* **64** 701 (2001).
- [18] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60** 848 (1988).
- [19] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Terceira Edição, (Pergamon Press, England, 1977).

- [20] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Terceira Edição, (John Wiley & Sons, Inc., 1999).
- [21] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **32** 306 (1988).
- [22] N. Majlis, *The Quantum Theory of Magnetism*, (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000).
- [23] A. Brataas, G. E. W. Bauer, P. J. Kelly, Phys. Rep. **427** 157 (2006).
- [24] G. E. W. Bauer, Y. Tserkovnyak, D. Huertas-Hernando and A. Brataas, Phys. Rev. B **67** 094421 (2003).
- [25] J. C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159** L1 (1995).
- [26] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. **61** 2472 (1988). G. Binach, P. Grunberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, Phys. Rev. B **39** 4828 (1989).
- [27] Este dado foi tirado do site: www.superconductors.org.
- [28] P. Cadden-Zimansky, *Nonlocal Coherence in Normal Metal-Superconductor Nanostructures*, Tese de Doutorado, Northwestern University (2008).
- [29] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity*, Segunda Edição, (Dover Publications, Inc., 1996).
- [30] A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1823 (1964).
- [31] Y. Bugoslavsky, Y. Miyoshi, S. K. Clowes, W. R. Branford, M. Lake, I. Brown, A. D. Caplin, and L. F. Cohen, Phys. Rev. B **71** 104523 (2005). G. T. Woods, R. J. Soulen, Jr., I. Mazin, B. Nadgorny, M. S. Osofsky, J. Sanders, H. Srikanth, W. F. Egelhoff, and R. Datla, Phys. Rev. B **70** 054416 (2004).
- [32] B. D. Josephson, Phys. Lett. **1** 251 (1962).
- [33] R. C. Jakovlevic, J. Lambe, A. H. Silver, and J. E. Mercereau, Phys. Rev. Lett. **12** 159 (1964).
- [34] Mais informação pode ser encontrada no site oficial da Universidade de Tecnologia de Delft: www.tudelft.nl.
- [35] Yu. Nazarov, Superlattices and Microstructures **25** 1221 (1999).
- [36] A. Brataas, Yu. V. Nazarov, G. E. W. Bauer, Phys. Rev. Lett. **84** 2481 (2000).
- [37] A. Brataas, Yu. V. Nazarov, G. E. W. Bauer, Eur. Phys. J. B **22** 99 (2001).
- [38] Daniel Huertas-Hernando, Yu. V. Nazarov, and W. Belzig, cond-mat/0204116 (2002).

- [39] X. Waintal, E. B. Myers, P. W. Brouwer, D. C. Ralph, Phys. Rev. B **62** 12 317 (2000).
- [40] G. E. W. Bauer, Y. Tserkovnyak, D. Huertas-Hernando and A. Brataas, Phys. Rev. B **67** 094421 (2003).
- [41] D. Huertas-Hernando, G. E. W. Bauer, and Yu. V. Nazarov, J. Magn. Magn. Mater. **240** 174-176 (2002).
- [42] K. Xia, P.J. Kelly, G. E. W. Bauer, A. Brataas and I. Turek, Phys. Rev. B **65** 220401 (2002).
- [43] J. Manschot, A. Brataas, G. E. W. Bauer, Phys. Rev. B **69** 092407 (2004).
- [44] M. L. Mehta, *Random Matrices*, (Academic, New York, 1991).
- [45] P. A. Mello and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*, (Oxford University Press, New York, 2004).
- [46] J. J. M. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller, M. R. Zirnbauer, Phys. Rep. **129** 367 (1985).
- [47] P. W. Brouwer, Phys. Rev. B **51** 16 878 (1995).
- [48] G. Campagnano and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. B **74** 125307 (2006).
- [49] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, A. M. S. Macêdo, artigo em preparação.
- [50] M. J. M. de Jong, C.W. J. Beenakker, cond-mat/9611140 (1996).
- [51] M. L. Polianski and P. M. Brouwer, J. Phys. A: Math. Gen. **36** 3215 (2003).
- [52] P. M. Brouwer, C.W. J. Beenakker, J. Math. Phys. **37** 4904 (1996).
- [53] Peter Russer, "Electromagnetics, microwave circuit and antenna design for communications engineering", segunda edição, Artech House 2006.
- [54] Este resultado foi tirado do site: www.mathworld.wolfram.com.
- [55] N. Argaman, Phys. Rev. B **53** 7035 (1996).
- [56] F. A. G. Almeida, Tese de doutorado (em preparação).
- [57] G. A. Prinz, Science **282** 1660 (1998).
- [58] J. C. Slonczewski, Phys. Rev. B **39** 6995 (1989).
- [59] P. Dauguet, P. Gandit, J. Chaussy, S. F. Lee, A. Fert and P. Holody, Phys. Rev. B **54** 1083 (1996).

- [60] G. E. W. Bauer, A. Brataas, Y. Tserkovnyak, B. van Wees, Appl. Phys. Lett. **82** 3928 (2003).
- [61] Y. Tserkovnyak, A. Brataas, Phys. Rev. B **64** 214 402 (2001).
- [62] B. Abdollahipour, M. Zareyan, Phys. Rev. B **73** 214 442 (2006).
- [63] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Zutic, Acta Physica Slovaca **57** 565 (2007) [arXiv:0711.1461v1].
- [64] D. Neumaier, K. Wagner, S. Geissler, U. Wurstbauer, J. Sadowski, W. Wegscheider, and D. Weiss, Phys. Rev. Lett. **99** 116803 (2007); D. Neumaier, K. Wagner, U. Wurstbauer, M. Reinwald, W. Wegscheider, and D. Weiss, New J. Phys. **10** 055016 (2008).
- [65] L. P. Rokhinson, Y. Lyanda-Geller, Z. Ge, S. Shen, X. Liu, M. Dobrowolska, and J. K. Furdyna, Phys. Rev. B **76** 161201(R) (2007).
- [66] P. Forrester, *Log-gases and Random Matrices*, (não publicado).
- [67] C.W. J. Beenakker and C. Schönemberger, Phys. Today **56** 37-42 (2003).
- [68] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **106** 162-164 (1957); J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108** 1175 (1957).
- [69] W. L. McMillan, Phys. Rev. Lett. **175**, 537 (1968).
- [70] W. Belzig, F. K. Wilhelm, C. Bruder, G. Schön and A. Zaikin, *Superlattices and Microstructures* **25**, 1251 (1999).
- [71] W. Belzig and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. Lett. **87**, 067006 (2001).
- [72] F. Lefloch, C. Hoffmann, M. Sanquer and D. Quirion, Phys. Rev. Lett. **90**, 067002 (2003).
- [73] T. S. Jespersen, M. L. Polianski, C. B. Sorensen, K. Flensberg and J. Nygard, cond-mat/0901.4202.
- [74] K.M.H. Lenssen, L.A. Westerling, C.J.P.M. Harmans, J.E. Mooij, M.R. Leys, W. van der Vleuten and J.H. Wolter, Surface Science **305**, 476-479 (1994).
- [75] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **52**, R3868 (1995).
- [76] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, A. M. S. Macêdo, Phys. Rev. B **78** 235305 (2008).
- [77] F. A. G. Almeida, S. Rodríguez-Pérez and A. M. S. Macêdo, Phys. Rev. B **80** 125320 (2009).

- [78] G. C. Duarte-Filho and A. M. S. Macêdo, aceito para publicação na Phys. Rev. B (2009).
- [79] V. A. Gopar, J. A. Méndez-Bermúdez and A. H. Aly, Phys. Rev. B **79**, 245412 (2009).
- [80] A. Hurwitz, Nachr. Ges. Wiss. Gött. Math.-Phys. Kl. **71** (1887).
- [81] C. J. Lambert and R. Raimondi, J. Phys.: Condensed Matter **10** (1998), 901.
- [82] S. Rodríguez-Pérez, A. L. R. Barbosa and A. M. S. Macêdo, (submetido à Phys. Rev. B).
- [83] Ya. Blanter and M. Büttiker, Phys. Rep. **336** 1-166 (2000).
- [84] A. M. S. Macêdo and A. M. C. Souza, Phys. Rev. E **71** 066218 (2008).
- [85] G. Bergmann, Phys. Rep. **107** 1 (1984); D. E. Khmel'nitskii, Physica B **126** 235 (1984).
- [86] Y. Imry, *Introduction to mesoscopic physics*, Oxford University Press (1997).
- [87] E. Akkermans and G. Montambaux, *Mesoscopic physics of electrons and photons*, Cambridge University Press (2007).
- [88] P. Samuelsson and M. Büttiker, cond-mat/0207585v1 (2002).
- [89] H. U. Baranger and P. A. Mello, Phys. Rev. Lett. **73** 142 (1994).
- [90] K. B. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [91] G. C. Duarte-Filho, A. F. Macedo-Junior, A. M. S. Macêdo, Phys. Rev. B **76** 75 342 (2007).
- [92] H. J. Sommers, W. Wiecek, and D. V. Savin, Acta Phys. Pol. A **112** 691 (2007).
- [93] D. V. Savin, H. J. Sommers, and W. Wiecek, Phys. Rev. B **77** 125332 (2008).
- [94] M. Novaes, Phys. Rev. B **75** 073304 (2007); M. Novaes, Phys. Rev. B **78** 035337 (2008).
- [95] S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simovic, R. Schleser, T. Ihn, P. Studerus, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **96** 076605 (2006).
- [96] S. Gustavsson, R. Leturcq, T. Ihn, K. Ensslin, M. Reinwald, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **75** 075314 (2007).
- [97] L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin, and B. Etienne, Phys. Rev. Lett. **79** 2526 (1997).

- [98] G. Burkard, D. Loss and E. V. Sukhorukov, Phys. Rev. B **61** R16303 (2000).
- [99] A. H. Steinbach, J. M. Martinis, and M. H. Devoret, Phys. Rev. Lett. **76** 3806 (1996);
R. J. Schoelkopf, P. J. Burke, A. A. Kozhevnikov, D. E. Prober, and M. J. Rooks,
Phys. Rev. Lett. **78** 3370 (1997).
- [100] L. S. Levitov and G. B. Lesovik, JETP Lett. **55** 555 (1992).
- [101] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and
Financial Markets* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2004).
- [102] L. S. Levitov and G. B. Lesovik, JETP Lett. **58** 230 (1993).
- [103] L. S. Levitov, H. W. Lee, and G. B. Lesovik, J. Math. Phys. **37** 4845 (1996).
- [104] Yu. Nazarov and M. Kindermann, cond-mat 0107133.
- [105] A. Di Lorenzo and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. Lett. **93** 046601 (2004).
- [106] P. Mohanty and R. A. Webb, Phys. Rev. Lett. **88** 146601 (2002).
- [107] A. G. Huibers, S. R. Patel, C. M. Marcus, P. W. Brouwer, C. I. Duruöz, and J. S.
Harris, Phys. Rev. Lett. **81** 1917 (1998).
- [108] P. Vivo, S. N. Majumdar and O. Bohigas, Phys. Rev. Lett. **101** 216809 (2008).
- [109] A. Al. Osipov and E. Kanzieper, Phys. Rev. Lett. **101** 176804 (2008).
- [110] K. A. Muttalib, P. Wölfe, A. García-Martín, and V. A. Gopar, Europhys. Lett. **61**
95 (2003).
- [111] K. A. Muttalib and P. Wölfe, Phys. Rev. Lett. **83** 3013 (1999).
- [112] P. Markos, Phys. Rev. Lett. **83** 588 (1999).
- [113] A. García-Martín and J. J. Sáenz, Phys. Rev. Lett. **87** 116603 (2001).
- [114] L. Van Hove, Phys. Rev. **89** 1189 (1953).
- [115] D. Huertas-Hernando, Yu. V. Nazarov, A. Brataas, and G. E. W. Bauer, Phys.
Rev. B **62** 5700 (2000).