

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Ruído no Transporte Eletrônico em Sistemas Mesoscópicos

Dissertação de Mestrado
por

Clóvis Corrêa Júnior

Orientador: Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún
Co-Orientador: Prof. Dr. Bernardo Laks

Campinas - SP, 2009

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pelo aluno Clóvis Corrêa Júnior e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 16 de Abril de 2009.


Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **CLÓVIS CORRÊA JÚNIOR** – RA 057571 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 20 / 02 / 2009.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún
Presidente da Comissão Julgadora
DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Roberto Eugenio Lagos Monaco – UNESP-RIO CLARO -SP

Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz – DFMC/IFGW/UNICAMP

*“O valor das coisas não está no tempo em que elas duram,
mas na intensidade com que acontecem.
Por isso existem momentos inesquecíveis, coisas inexplicáveis
e pessoas incomparáveis.”*
Fernando Pessoa

Agradecimentos

Agradeço ao Professor Guillermo Cabrera pela orientação, apoio, ensinamentos e grande paciência durante o desenvolvimento desta dissertação. Extraordinária pessoa. Ao Professor Bernardo Laks por ter me aceitado co-orientar e pelo incentivo e entusiasmo.

Aos Professores Roberto Lagos e Peter Schulz, por terem aceitado participar da minha Banca e pelas construtivas e valiosas sugestões apontadas.

Ao Professor Alberto S. Arruda, que me orientou na graduação, pelo incentivo e por ter me indicado o Professor Cabrera para prosseguir meus estudos. A todos os meus professores da graduação na UFMT, em especial ao Alejandro, a Iraida, ao Maurício, ao Sérgio e ao Hulk, pelos incentivos.

Aos meus colegas da graduação, Alexandre, Marceliano, Evandro e George pelas agradáveis conversas sobre Física, pela amizade e brincadeiras.

Aos meus pais Clóvis e Nilza Maria, pelo amor, imenso apoio e incentivos. As minhas irmãs Laura e Gisele e irmão Marcelo pelo companheirismo e apoio.

Ao Elvis, Ezequiel e Leonardo pelo apoio e momentos de descontração. Ao pessoal da PB2, pela ótima convivência e pelos churrascos: Daniel, Bruno, Caio, Giovanni, Rodrigo e o Júnior.

A Maria Ignez e ao Armando por me orientar quanto a parte administrativa.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação de mestrado são descritas as características fundamentais dos condutores mesoscópicos, e as origens e propriedades das várias fontes de ruído em condutores. Primeiramente, descrevemos o ruído com distintos métodos e enfatizamos as propriedades de cada tipo de ruído. Em seguida, apresentamos a abordagem da matriz de espalhamento para condutores com coerência de fase, a qual permite-nos tratar as propriedades de transporte de forma unificada. Estudamos um modelo proposto para descrever as propriedades de transporte de nanofios e nanocontatos dos metais magnéticos de transição. É assumido que os orbitais de condução são do tipo s , o que permite a existência de dois canais de condução devido ao spin. Da mesma forma, consideramos os orbitais d como fontes de momentos de dipolos magnéticos locais. O modelo é aplicado ao caso de nanocontatos constituídos de dois átomos, os quais estão acoplados a dois eletrodos magnéticos. Usando um pequeno campo externo, é possível controlar os estados de polarização dos eletrodos: paralelamente e anti-paralelamente. Nesse nanocontato, são estudados as propriedades do coeficiente de transmissão, da condutância, do ruído shot quântico, do fator de Fano e da magnetoresistência.

Abstract

This dissertation describes the fundamental characteristics of mesoscopic conductors, and the origins and properties of the sources of noise in conductors. Firstly, we describe the noise through different methods and emphasize the properties of each kind of noise. In the following, we present the scattering approach for coherent phase conductors, which allows us to get the transport properties from a unified picture. It is studied a particular model to describe the transport properties of magnetic transition metal nanowires and nanocontacts. It is assumed that conduction orbitals are *s*-like, with the occurrence of only two conduction channels due to spin. In turn, *d*-like orbitals are sources of local magnetic moments. The model is applied to a simple nanocontact built of two atoms, which are coupled to two magnetic electrodes. Using small external fields, one can handle the polarization state of the electrodes: in parallel or antiparallel alignment. From that nanocontact, we investigate the properties of the transmission coefficient, the conductance, the quantum shot noise, the Fano factor and the magnetoresistance.

Para meus pais Clóvis e Nilza Maria.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de Símbolos	x
Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xiv
1 Introdução	1
2 Fundamentos	4
2.1 Transporte clássico	6
2.2 Transporte quântico balístico	8
2.2.1 A fórmula de Landauer	9
3 Ruído	14
3.1 Conceitos básicos de processos estocásticos	14
3.2 Fundamentos de ruído	17
3.2.1 Movimento Browniano	18
3.2.2 Ruído térmico	19
3.2.3 Teorema da flutuação-dissipação	21
3.2.4 Ruído $1/f$	23
3.2.5 Ruído shot	24
3.3 Abordagem da matriz de espalhamento	26
3.3.1 Formalismo	27
3.3.2 Condutância	30
3.3.3 Densidade espectral das flutuações da corrente	32
3.3.4 Ruído	33
3.3.5 Classificação do ruído	38

4 Nanocontatos	40
4.1 Motivações	40
4.2 Modelo teórico	44
4.3 Aplicação: contato constituído de dois átomos	49
5 Resultados e Discussão	56
6 Conclusão	65
A Polarização dos eletrodos	67
B Coeficientes	69
Referências Bibliográficas	70

Lista de Símbolos

l	- Livre caminho médio elástico
l_{in}	- Livre caminho médio inelástico
L	- Comprimento da sistema
L_φ	- Comprimento de coerência de fase
h, \hbar	- Constante de Planck e $\hbar \equiv h/2\pi$
$G_0 = 2e^2/h$	- Quantum de condutância
$2e^2/h = (12,9k\Omega)^{-1} = 77,5\mu S$	- Valor de G_0
$e^2/h = (25,8k\Omega)^{-1} = 38,7\mu S$	- Valor de $G_0/2$
k_F	- Vetor de onda de Fermi
v_F	- Velocidade de Fermi
E_F	- Energia de Fermi
k_B	- Constante de Boltzmann
T	- Temperatura
\mathcal{T}	- Coeficiente de transmissão
S	- Matriz de espalhamento
\mathcal{S}	- Densidade espectral do ruído
MR	- Magnetoresistência
P	- Configuração paralela dos eletrodos($\rightarrow\rightarrow$)
AP	- Configuração anti-paralela dos eletrodos($\rightarrow\leftarrow$)
STM	- Microscópio de varredura de efeito túnel
$2DEG$	- Gás de elétrons bi-dimensional
$MCBJ$	- Quebra mecanicamente controlada de junções
$FQHE$	- Efeito Hall quântico fracionário

Lista de Figuras

1.1	Escalas macroscópicas, mesoscópicas e microscópicas.	3
2.1	(a) Medidas da corrente e da voltagem de um resistor de $23,5k\Omega$. Uma regressão linear mostra uma condutância de $G \approx 41,316\mu S$ (resistência de $R \approx 24,204k\Omega$). (b) Medidas da corrente em função do tempo para uma voltagem de $5mV$ na mesma amostra [6].	7
2.2	Ilustração dos regimes de transporte difusivo e balístico.	8
2.3	Ilustração da geometria de Landauer: (a) I é a corrente incidente, T o coeficiente da transmissão e R é o coeficiente de reflexão. (b) μ_1 e μ_2 são os potenciais eletroquímicos dos reservatórios e μ_A e μ_B são os potenciais do condutor ideal dos dois lados da região de espalhamento.	10
2.4	Esquema de um contato quântico pontual de comprimento L , conectado a dois grandes reservatórios de elétrons. Os primeiros canais transversos permitem propagação de elétrons. Devido a baixa dimensionalidade, os canais $E_n(0)$ são bem separados na região do contato. Em contraste, há uma grande densidade de canais na região dos reservatórios.	12
2.5	Condutância em função da voltagem de gate em um contato quântico a $0,6K$ (GaAs/AlGaAs). A condutância mostra plateaus múltiplos inteiros de $2e^2/h$. Ver [3].	13
3.1	Média temporal e média sobre um ensemble de uma quantidade aleatória.	16
3.2	Circuito resistor-indutor.	19
3.3	Ilustrações: (a) Um tubo de raios catódicos. Devido a discretização da carga dos portadores, a corrente não flui continuamente e dessa forma apresenta ruído shot. (b) Seqüência de pulsos aleatórios medido no ânodo.	25
3.4	Ilustração do condutor balístico acoplado a dois reservatórios de elétrons, no caso de um único canal transversal aberto para condução	28

3.5	(E) Ilustração da condutância em unidades de $e^2/\pi\hbar$ (curva 1) e do ruído shot quântico em unidades de $e^3 V /6\pi\hbar$ (curva 2) para um contato quântico pontual com $E_n = 4E_l$ em função da voltagem de gate, $\xi = (E_F - V_0)/E_l$ é uma energia adimensional. Notar os picos de ruído justamente entre os plateaus de condução e a ausência de ruído nos regimes de plateaus. (D) Medidas da condutância e do ruído em contatos quânticos pontuais formados em heteroestruturas semicondutoras GaAs/AlGaAs a $T=1,5K$ em função da voltagem de gate V_G para diversos valores de voltagem de bias, $ V_{DS} = 0, 5; 1; 1, 5; 2; 3mV$. No detalhe, a dependência do primeiro pico (nas mesma escalas que a figura maior) em função da voltagem de bias $V_{DS} = 0, 5; 1, 5; 3mV$, a linha pontilhada é a predição teórica com a Eq.(3.86). Notar que nesse gráfico experimental existe outros tipos de ruído coexistindo com o ruído shot quântico puro e o primeiro pico é a região onde o ruído shot quântico é dominante. Ver [11, 46]	36
3.6	Medidas e ajuste teórico para um contato quântico pontual do ruído shot quântico em função da corrente, dado pela Eq.(3.90) nos casos: (E) sem campo magnético aplicado e $T=57mK$. A transmissão é 0,37 e a concordância é impressionante. (D) com campo magnético aplicado no regime FQHE com o fator de preenchimento $\nu = 1/3$ para dois coeficientes de transmissão diferentes. A linha sólida é a Eq.(3.90) com uma carga dos portadores $Q = e/3$. A linha pontilhada é um ajuste utilizando a relação para o ruído shot clássico com $Q = e$. Mais uma vez observamos a excelente concordância da Eq.(3.90) com o experimento. Ver [22].	37
3.7	Classificação do ruído em função da frequência. Ver [6].	39
4.1	Ilustração de um STM. O STM investiga a densidade de estados de um material através de uma corrente de tunelamento, a qual flui da ponta metálica do microscópio para a superfície. A corrente de tunelamento depende sensivelmente (exponencial) da distância da ponta à superfície; uma resolução de 0,1nm é possível. A resolução lateral é limitada pela espessura da ponta, a ponta de um bom STM é feito de apenas um único átomo, dando resolução lateral de 0,1nm.	41
4.2	Ilustração da técnica de MCBJ.	42
4.3	Medidas da condutância de um nanofio de Co em ultra-alto vácuo pela técnica de MCBJ, a temperatura ambiente e sem campo magnético externo aplicado, onde: (a) curvas do transporte eletrônico mostrando os plateaus de condutância; (b) histograma exibindo o comportamento estatístico da condutância de uma seqüência de nanofios gerados. É importante notar que os plateaus em (a) coincidem com o primeiro pico de e^2/h em (b). Dados devido a Rodrigues <i>et. al.</i> [43].	43
4.4	Ilustração do aparato experimental.	43
4.5	Ilustração do nanofio magnético entre dois reservatórios R_L e R_R da mesma espécie.	45
4.6	Ilustração do nanocontato constituído de dois átomos.	49
4.7	Ilustração dos canais de condução no nanocontato.	50
5.1	Coefficientes de transmissão \mathcal{T}_-^P (E) e \mathcal{T}_-^{AP} (D) com o canal E_- aberto para condução em função de η	57
5.2	Coefficiente de transmissão \mathcal{T}_+^P (E) e \mathcal{T}_+^{AP} (D) com o canal E_+ aberto para condução em função de η	57

5.3	Condutância monocanal G_-^P (E) e G_-^{AP} (D) com o canal E_- aberto para condução em função de η	58
5.4	Condutância total G_{Total}^P (E) e G_{Total}^{AP} (D) com os canais E_- e E_+ abertos para condução em função de η	59
5.5	Ruído shot, \mathcal{S}_-^P , para configuração P com o canal E_- aberto para condução.	60
5.6	Ruído shot, \mathcal{S}_-^{AP} , para configuração AP com o canal E_- aberto para condução.	60
5.7	Ruído shot, \mathcal{S}_{Total}^P , para configuração P com os dois canais E_- e E_+ abertos para condução.	61
5.8	Ruído shot, \mathcal{S}_{Total}^{AP} , para configuração AP com os canais E_- e E_+ abertos para condução.	61
5.9	Fator de Fano, \mathcal{F}_-^P (E) e \mathcal{F}_-^{AP} (D), com o canal E_- aberto para condução em função de η e λ	62
5.10	Fator de Fano, \mathcal{F}_{Total}^P (E) e \mathcal{F}_{Total}^{AP} (D), com os canais E_- e E_+ abertos para condução em função de η e λ	62
5.11	MR para o canal E_- , $MR_-(\%)$, aberto.	64
5.12	MR total, com os canais E_- e E_+ abertos, $MR_{Total}(\%)$	64
B.1	Coeficientes: (E) $\cos \theta_P$ e $\cos \theta_{AP}$, (D) $\sin \theta_P$ e $\sin \theta_{AP}$	69

Lista de Tabelas

2.1	Alguns parâmetros para 2DEG em heteroestruturas semicondutoras [3].	5
2.2	Classificação da dimensão do condutor mesoscópico.	6
2.3	Classificação dos regimes de transporte do condutor mesoscópico.	6

Capítulo 1

Introdução

A Física da Matéria Condensada é uma das áreas da Física mais rica e diversa, como comenta Eduardo Fradkin em um clássico da área¹, em tradução livre: Se definirmos a física da matéria condensada como sendo tudo aquilo que é publicado na seção de Matéria Condensada dos jornais de física, concluiremos que ela vai desde problemas típicos de ciências dos materiais até disciplinas que são tão fundamentais quanto física de partículas elementares e cosmologia.

Dentro desse grande universo que é a física da matéria condensada, existe uma sub-área chamada Física Mesoscópica². A física mesoscópica se ocupa com o estudo das propriedades dos materiais na escala de tamanho entre o mundo Microscópico e o Macroscópico. O que se entende por microscópico é a escala de tamanho da ordem de poucos diâmetros atômicos ou do comprimento de onda de de Broglie (i.e. átomos e moléculas), estes da ordem de poucas dezenas de Angstroms (10^{-10}m), notando que o prefixo micro é apenas uma convenção histórica e não se refere a milésima da milésima parte do metro necessariamente. O macroscópico indicando comprimentos na escala cotidiana ou grande número de partículas (número de Avogadro $\approx 10^{23}$ partículas) que constituem o sistema, ver Figura 1.1.

Na escala mesoscópica surgem novos e característicos fenômenos dessa escala, que apresentam poucas partículas para se aplicar os métodos da Mecânica Estatística e muitas partículas na perspectiva de uma possível descrição completamente baseada na Mecânica Quântica. Um dos mais marcantes, do ponto de vista de condutores mesoscópicos, trata-se do transporte com coerência de fase dos elétrons (comprimento de coerência de fase L_φ) por uma distância comparada ou maior ao comprimento do sistema (L) ou do livre caminho médio inelástico (l_{in}) desse sistema. É bem sabido que um elétron ao se mover dentro de um condutor sofre diversos tipos de espalhamentos (com a rede, com impurezas, com outros elétrons e etc.).

Quando o comprimento do condutor é muito maior que o livre caminho médio (ou algum outro comprimento característico do sistema, como, o comprimento de espalhamento inelástico l_{in} ou o comprimento de espalhamento elétron-elétron l_{e-e}), dizemos que em termos de transporte esse condutor esta no regime difusivo ($L \gg L_\varphi$). Nesse regime, os elétrons sofrem vários eventos de espalhamento que o fazem perder a coerência de fase da função de onda que os descreve entre a entrada e a saída do condutor, dessa forma os elétrons não preservam nenhuma “memória” dos

¹E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Addison-Wesley Publ. Co., 1991.

²Do gr. *mésos* = “meio”. Termo bastante apropriado, primeiramente cunhado por N. G. van Kampen em 1981 [1].

seus estados iniciais ao saírem do condutor. Com isso, não pode-se estabelecer uma conexão direta entre os estados eletrônicos de entrada e saída do condutor.

Entretanto, ao reduzirmos o tamanho do sistema de tal forma a este ser comparado ou menor que o livre caminho médio, graças aos avanços das diversas técnicas de microscopia e litografia esse limite é uma realidade atualmente, o comprimento de coerência de fase do elétron torna-se comparado com o tamanho do condutor, e assim diz-se que o transporte é balístico ($L_\varphi > L$). Rolf Landauer, no final da década de 1950 [1, 2, 4], foi talvez o primeiro a defender que em condutores reduzidos ocorria um transporte eletrônico onde a fase da função de onda desses elétrons não era alterada por processos de colisões elásticas, ou seja, durante um evento de colisão elástica o vetor de onda e a energia do elétron antes e depois da colisão eram preservados em magnitude. Com isso, os elétrons podem atravessar todo o condutor mesoscópico sem perda de energia, o que permite ao elétron “lembrar” o seu estado de entrada ao sair do condutor, e assim pode-se estabelecer uma ligação entre os estados de entrada e os estados de saída dos elétrons. No transporte balístico, o processo de transporte deve ser visto como um processo de transmissão, é importante notar a ligação de conceitos. Fenômenos de transporte estão ligados ao conceito de fluxo de partículas, já os processos de transmissão estão intimamente relacionados ao conceito de propagação de ondas. Daí surge o caráter ondulatório do elétron, que não pode-se mais desprezar no estudo das propriedades de transporte de sistemas mesoscópicos. Ao contrário do que é feito em teorias clássicas do transporte eletrônico, como a teoria de Drude e a equação de Boltzmann [2, 3, 5]. Portanto, tem-se uma clara analogia entre transporte em condutores do estado sólido e propagação de ondas eletromagnéticas em guias de onda da Eletrodinâmica Clássica, e dessa forma pode-se falar em uma “óptica de elétrons” em sistemas mesoscópicos.

Outra característica marcante dos sistemas mesoscópicos é o fato da condutância, que pela baixa dimensionalidade do sistema ser igual a condutividade, poder ser expressa em termos de múltiplos inteiros de um valor mínimo universal, isto é, a condutância é quantizada em múltiplos do quantum de condutância $G_0 = 2e^2/h$. É possível ter uma noção intuitiva de como surge a quantização da condutância, visto que o caráter ondulatório dos elétrons os fazem se comportar, ao atravessar um condutor balístico, como a radiação eletromagnética ao se propagar em guias de onda. É bem conhecido que o confinamento lateral imposto pelos guias de onda faz surgir modos de propagação discretos para a radiação, dessa forma é intuitivo que surjam “modos” (canais) de propagação para os elétrons em um condutor com coerência de fase, o que representaria a quantização da condutância. Quanto maior são as dimensões laterais dos guias de onda, há mais modos permitido de transmissão. Já no caso de condutores mesoscópicos, quanto maior é a espessura do condutor mais canais são abertos, e assim a condutância aumenta.

A quantização da condutância mostra a nova física da escala mesoscópica, o transporte em condutores com coerência de fase não obedece a lei de Ohm. A condutância apresenta regimes de *plateaus* de condutância que dependem unicamente do quantum de condutância e da probabilidade de transmissão de cada canal, e não há uma dependência linear como é obtido pela lei de Ohm.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma. No Capítulo 2 é descrito as propriedades fundamentais dos sistemas mesoscópicos, as escalas de comprimentos que definem esses sistemas, o transporte clássico, a distinção entre condutores macroscópicos e mesoscópicos, o transporte com coerência de fase, a fórmula de Landauer e sua verificação experimental. No Capítulo 3, descrevemos as origens e as propriedades do ruído em suas múltiplas formas e ocorrência, damos ênfase as propriedades do ruído *shot* quântico. No Capítulo 4 é estudado um modelo para

nanofios e nanocontatos magnéticos acoplados a reservatórios polarizados magneticamente, e no caso de nanocontatos, são obtidas expressões perturbativamente analíticas para os coeficientes de transmissão, a condutância, o ruído shot quântico, o fator de Fano, para a polarização paralela e anti-paralela dos reservatórios, e a magnetoresistência nos casos monocanal e bicanais de condução abertos. No Capítulo 5 é apresentado os resultados e as discussões para um exemplo prático de um nanocontato constituído de dois átomos. Por fim, no Capítulo 6 apresentamos as conclusões deste trabalho.

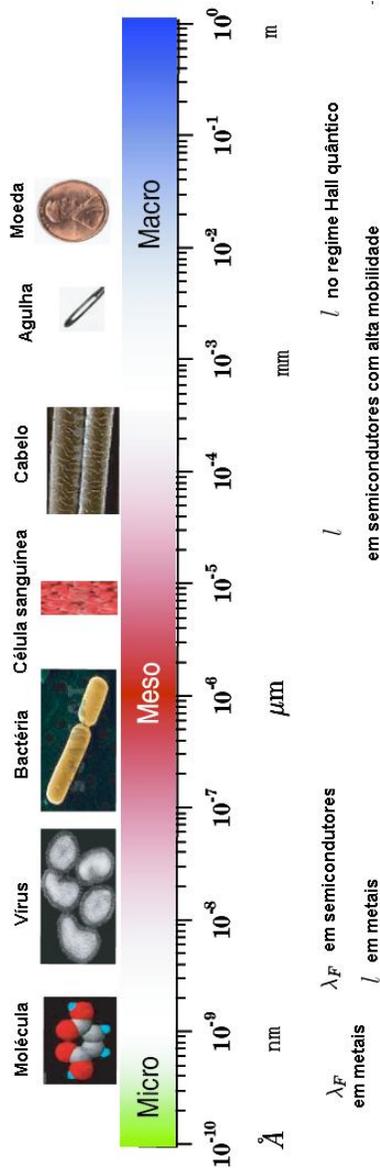


Figura 1.1: Escalas macroscópicas, mesoscópicas e microscópicas.

Capítulo 2

Fundamentos

Com o advento e avanço das várias técnicas de microscopia, do alto grau de pureza e controle das amostras utilizadas em dispositivos microeletrônicos e da crescente demanda pela construção de dispositivos cada vez menores, aproximadamente a partir da década de 1980, surgiu uma área de pesquisa chamada Física Mesoscópica. Ela lida com fenômenos que estão entre o mundo macroscópico e o microscópico, e possibilita uma dialética entre a física fundamental e as aplicações tecnológicas. Questões básicas da Mecânica Quântica e do limite semi-clássico tem sido respondidas, ao mesmo tempo em que novos fenômenos próprios dessa região são descobertos e confirmados experimentalmente.

Fenômenos intrínsecos da física mesoscópica são a aparição da característica ondulatória dos elétrons na descrição das propriedades de transporte, o transporte com coerência de fase eletrônico por distâncias comparadas ao comprimento do sistema, o processo de condução ser visto como um processo de transmissão, a quantização da condutância em múltiplos inteiros de um valor universal, o ruído shot sub-Poissoniano e nulo para canais totalmente transparentes, o comportamento não Ohmico, a flutuação universal da condutância vista no regime difusivo, os processos de localização fraca, as oscilações da condutância no efeito Aharonov-Bohm, as contribuições dos estados localizados e estados estendidos para condutividade e o surgimento de estados da borda no efeito Hall quântico inteiro, dentre outros fenômenos concernentes a supercondutores mesoscópicos.

Essencialmente ao se tratar de transporte em nanoestruturas é necessário fazer um balanço das escalas de comprimentos importantes para caracterizar o fenômeno, é instrutivo conceituar esses comprimentos que permearão todas as nossas discussões:

O **comprimento do sistema** L paralelo a direção da corrente, e a área W (com W_1, W_2 , e $W_1 \perp W_2$) transversa a direção da corrente, com $L > W_2 > W_1$ sem perda de generalidade.

O **livre caminho médio** elástico $l = v_F \tau$ é a distância que um elétron percorre livremente entre duas colisões elásticas em um condutor, onde v_F é a velocidade do elétron no nível de Fermi e $\tau = m^* \mu_m / e$ é o tempo de relaxação, μ_m é a mobilidade eletrônica. E o **livre caminho médio inelástico** $l_{in} = v_F \tau_\varphi$ é a distância percorrida por um elétron entre duas colisões inelásticas em um condutor, onde τ_φ é chamado de tempo de colisão inelástico ou tempo de quebra de fase. Por colisões elásticas em um condutor temos, por exemplo, colisões entre os elétrons de condução e impurezas que não sofrem recuo ou colisões do elétron com a borda do condutor não dissipativo. Ao mesmo ponto em que colisões inelásticas são aquelas entre os elétrons de condução e outros

Parâmetro	GaAs	Si	Unidade
Densidade	4,0	4,0	10^{11}cm^{-2}
Mobilidade	10^5	10^4	$\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
Tempo de relaxação	3,8	1,1	10^{-12}s
Vetor de onda de Fermi	1,6	1,6	10^6cm^{-1}
Velocidade de Fermi	2,76	0,97	10^7cm s^{-1}
L.c.m. elástico	1,05	0,107	10^{-4}cm
L.c.m. inelástico	5,0	0,5	10^{-4}cm
Tempo de quebra de fase	1,8	0,57	10^{-11}s
Constante de difusão	1,45	0,52	$10^3\text{cm}^2\text{s}^{-1}$
Comp. coerência de fase	1,62	0,54	10^{-4}cm

Tabela 2.1: Alguns parâmetros para 2DEG em heteroestruturas semicondutoras [3].

elétrons, com fonons e outras excitações eletrônicas, e com impurezas que sofrem recuo. Quando falarmos em livre caminho médio, estará implícito que é aquele devido a colisões elásticas, caso contrário será explicitado.

O **comprimento de coerência de fase** $L_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}$ é a distância percorrida por um elétron até ele perder sua coerência de fase da função de onda que o descreve, onde $D = v_F^2\tau/d$ é a constante de difusão, d é a dimensão. Fundamentalmente é esse comprimento que caracteriza os processos de transporte em condutores mesoscópicos. É importante enfatizar que ao se mover dentro de um condutor um elétron poderá sofrer espalhamentos elástico, entretanto tais espalhamentos não influenciarão na fase da função de onda eletrônica, visto que há preservação da conservação do momento e da energia do elétron, como foi enfatizado pioneiramente por Landauer [1–4]. A fase da função de onda eletrônica somente é destruída por processos de espalhamentos inelásticos, isto é, elétron-elétron, elétron-fonon e etc.

Há outros comprimentos que citaremos e cujos conceitos já são bem claros, como o comprimento de onda de de Broglie λ_{dB} e o comprimento de onda de Fermi $\lambda_F = h/p_F = 2\pi/k_F$, em sistemas mesoscópicos a condução é dominada por elétrons no nível de Fermi, em metais λ_F é tipicamente da ordem de alguns diâmetros atômicos e em semicondutores é da ordem de 10-100nm. Para termos uma noção das ordens de grandezas desses comprimentos em sistemas reais, apresentamos na Tabela 2.1 alguns valores para gases de elétrons bi-dimensionais (2DEG) formados na interface de heteroestruturas semicondutoras de GaAs/AlGaAs e Si/SiO₂.

Podemos, também, classificar a dimensão do condutor através desses comprimentos de acordo com a Tabela 2.2. Nesta dissertação, o caso 1D é o mais relevante, primeiramente ao explicarmos as propriedades dos condutores mesoscópicos através dos contatos quânticos pontuais formados em heteroestruturas semicondutoras de GaAs/AlGaAs, e posteriormente ao caso particular desta dissertação concernente a nanocontatos metálicos magnéticos.

O regime de transporte, ainda, pode ser discutido em relação a comparação desses comprimentos, Tabela 2.3. Nos regimes dissipativo e difusivo, o transporte é dominado por processos de espalhamentos similares ao caso clássico. Já no regime balístico, todas as dimensões do condutor são menores que os comprimentos característicos dos elétrons de condução, o que torna raro os

Dimensão	Condição
Uma (1D)	$W_1, W_2 < \lambda_F < L$
Duas (2D)	$\lambda_F \approx W_1 \ll W_2, L$
Três (3D)	$\lambda_F \ll W_1, W_2, L$

Tabela 2.2: Classificação da dimensão do condutor mesoscópico.

Regime	Condição
Balístico	$W_1, W_2, L < L_\varphi, l$
Difusivo	$l \ll W_1, W_2, L$
Dissipativo	$L_\varphi \ll W_1, W_2, L$

Tabela 2.3: Classificação dos regimes de transporte do condutor mesoscópico.

processos de espalhamento (mesmo que haja, tais colisões serão elásticas e dessa forma há conservação do momento e da energia) e dessa forma os elétrons fluem através do condutor sem alterar seu momento total e a energia total, ou seja, sem perder a coerência de fase.

2.1 Transporte clássico

A fim do regime de transporte quântico ser apreciado devidamente, é instrutivo iniciar pelo caso clássico. Propriedades de transporte são obtidas a partir da observação da resposta do sistema a um estímulo externo. O transporte térmico sonda o transporte de calor, o transporte eletrônico sonda a condução dos portadores de carga pelo material. Na maioria dos casos, a relação entre o estímulo e a resposta é considerada sendo linear e a razão entre essas duas quantidades (estímulo/resposta) dá informações do sistema.

Materiais metálicos macroscópicos apresentam uma relação linear entre a corrente e a voltagem, a lei de Ohm. Na qual a relação entre a voltagem aplicada V e a corrente I é a resistência R . A resistência depende da condutividade σ (resistividade ρ , com $\sigma = \rho^{-1}$) intrínseca do material e da geometria do condutor (comprimento L e espessura W), $I = (W/L)\sigma V$. A origem da resistência nesses metais é devido a processos de espalhamento inelásticos (defeitos, impurezas, temperatura).

Resistência é um observável estatístico macroscópico visto que muitos elétrons estão envolvidos no processo de condução. Mais precisamente, do ponto de vista estatístico, a resistência é um valor médio ou média da razão entre as medidas da corrente e da voltagem. Intrinsecamente haverá flutuações ao redor do valor médio da resistência medida em função do tempo, usualmente chamadas de ruído em eletrônica. Na Figura 2.1(a) é mostrado uma medida típica de um resistor macroscópico, uma relação linear entre a corrente e a voltagem é observada, como esperado. As flutuações da corrente dependentes do tempo, no mesmo resistor é mostrado na Figura 2.1(b), com uma voltagem fixa de $V = 5mV$. Essas flutuações ou ruído correspondem a variância do valor médio em estatística. A primeira característica desse ruído intrínseco permite obter informações da dinâmica do transporte dos portadores de carga.

Em um condutor macroscópico ($L, W \gg l, L_\varphi$) com uma concentração de impurezas bastante diluída e distribuída aleatoriamente pelo volume, a cinética dos portadores de carga é dada pela

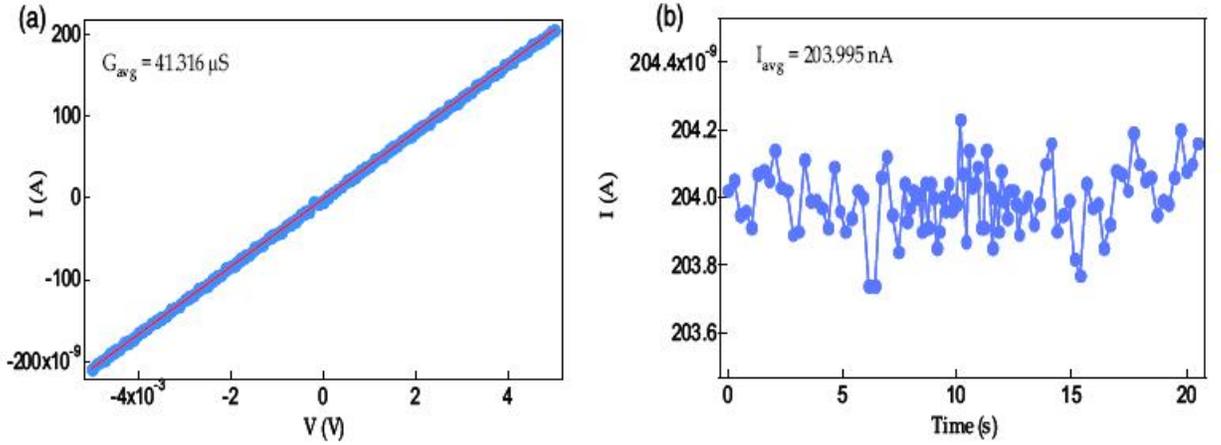


Figura 2.1: (a) Medidas da corrente e da voltagem de um resistor de $23,5k\Omega$. Uma regressão linear mostra uma condutância de $G \approx 41,316\mu S$ (resistência de $R \approx 24,204k\Omega$). (b) Medidas da corrente em função do tempo para uma voltagem de $5mV$ na mesma amostra [6].

equação de transporte de Boltzmann (geralmente uma equação integro-diferencial):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coliso}$$

onde, nessa equação a função de distribuição $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ de uma carga em relação ao fluxo de cargas, \mathbf{r} é a posição, \mathbf{p} é o momento e t o tempo. O termo da direita se refere aos processos de colisões com impurezas, com algumas aproximações (tempo de relaxação independente da energia, e do elétron livre e independente) sobre essa equação (termo de colisão) é possível reconstituir a teoria de Drude para condutividade, $\sigma = ne^2\tau/m^*$ (n densidade de carga, τ tempo de relaxação e m^* massa efetiva eletrônica), válida quando $\lambda_F \ll l$ [5].

Uma aproximação mais prática é considerar apenas a resposta linear do sistema a um estímulo externo. Esse tipo de aproximação é uma grande simplificação em relação ao método cinético de Boltzmann, visto que a resposta linear fornece apenas as propriedades de equilíbrio (ou bem próximo a ele) do sistema (o contrário em que o sistema pode estar fora do equilíbrio pelo método cinético). A teoria da resposta linear assume que o estímulo externo é pequeno de tal forma a ser possível tratá-lo como perturbação (expansão em séries de Taylor). Essa série é considerada convergente rapidamente após o primeiro termo, dessa forma considerar apenas o primeiro termo é suficiente. A resposta linear é uma quantidade mensurável (valor real) e esta relacionada as funções de correlação do sistema, assim, sistemas fora do equilíbrio podem ser tratados como flutuações do estado de equilíbrio. Por isso, é essencial entender a dinâmica do sistema em equilíbrio para poder prever as propriedades fora do equilíbrio [10].

Supondo um sistema isolado, cujo Hamiltoniano é escrito \mathcal{H}_0 , se um pequeno distúrbio dependente do tempo $A \cdot F(t)$ é aplicado ao sistema no instante t_0 , o Hamiltoniano perturbado \mathcal{H} em um tempo posterior t será,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + A \cdot F(t) \quad (2.1)$$

onde A é uma quantidade interna conjugada a $F(t)$. A teoria da resposta linear diz que a média

de A no estado de não-equilíbrio $\langle A(t) \rangle$ é dado por,

$$\langle A(t) \rangle = \langle A(t) \rangle_0 + \int_{-\infty}^t dt' R(t, t') F(t') + \mathcal{O}(F(t)^2) \quad (2.2)$$

onde $\langle . \rangle_0$ é a média sobre ensembles de equilíbrio, $R(t, t')$ é a resposta linear que relaciona dois tempos t e t' , t' é o tempo em que a perturbação externa atua sobre o sistema e t é o tempo de medida. Os limites de integração respeitam o princípio de causalidade. Um exemplo simples de função resposta é a condutividade no equilíbrio. A condutividade σ de um sistema 1D sujeito a uma voltagem constante V em $t = 0$ é obtida da função de correlação da densidade de corrente $j_x(t)$ em tempos distintos,

$$\sigma = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty dt \langle j_x(0) j_x(t) \rangle_0 \quad (2.3)$$

essa expressão é conhecida como Fórmula de Green-Kubo [1, 10].

2.2 Transporte quântico balístico

Condutores mesoscópicos apresentam escalas de comprimentos limitadas entre o comprimento de onda de de Broglie do elétron e o comprimento dos vários mecanismos de espalhamentos que destroem a coerência de fase eletrônica. No caso mais simples, é possível assumir que os elétrons movem-se sem sofrerem espalhamentos (por impurezas, fônons ou outros elétrons). Esse regime de transporte é chamado balístico, ver Tabela 2.3. O pioneiro em estudar esse regime foi R. Landauer [4], na interpretação dele, os elétrons são caracterizados por suas respectivas funções de onda e a região do condutor é caracterizada pelos coeficientes de transmissão e reflexão, ou seja, o condutor é visto como uma barreira de potencial (potencial de espalhamento) pela qual os elétrons ao tentar atravessá-lo sofrerão tunelamento. Com essa interpretação, o processo de condução eletrônica no regime balístico deve ser visto como um processo de transmissão das funções de onda que caracterizam os elétrons, o que já é uma clara distinção do caso clássico. Os dois regime são ilustrados na Figura 2.2.

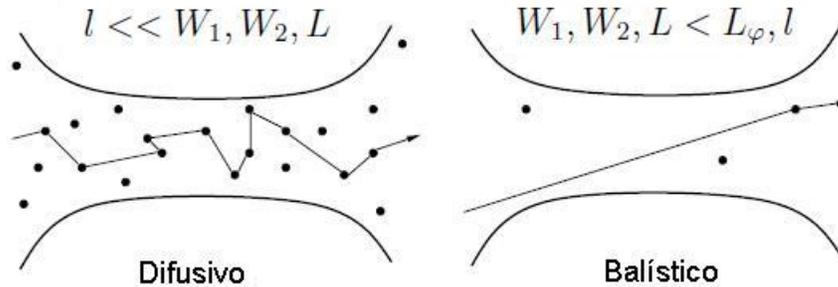


Figura 2.2: Ilustração dos regimes de transporte difusivo e balístico.

2.2.1 A fórmula de Landauer

A formulação de Landauer para condutores reduzidos relaciona a condutância com as propriedades de espalhamento sofridas pelos elétrons ao fluir dentro do condutor. A baixa dimensionalidade do condutor torna a característica ondulatória dos elétrons evidente, fazendo com que o processo de condução dos elétrons seja melhor representado (ou visto como) por um processo de transmissão da função de onda que descreve esses elétrons. Somente por isso, a condução ser vista como um processo de transmissão, já obtêm-se uma distinção da descrição clássica da condução, onde os elétrons são vistos como partículas que sofrem colisões aleatórias num substrato de íons imóveis. No regime mesoscópico as considerações sobre os elétrons de condução serem livres e independentes, assim como na descrição clássica da condução, ainda estão em voga, mas o caráter ondulatório dos elétrons implica em uma interação intrínseca devido a estatística fermiônica (anti-simetria da função de onda decorrente da troca de duas partículas fermiônicas). Essa interação devido a estatística faz surgir fenômenos novos, próprios do regime mesoscópico, como a condutância ser múltiplos inteiros de um valor universal (quantum de condutância), a condutância ser vista como transmissão, o ruído shot nulo para canais completamente transparentes (como mostraremos no Capítulo 3) e outros. Toda essa gama de novos fenômenos deve-se em grande parte ao trabalho pioneiro de Landauer.

Nesta seção, demonstraremos de forma intuitiva a fórmula de Landauer [1, 3, 4] no caso extremo de um condutor 1D com um único canal de condução aberto, em seguida apresentamos a condutância para o caso multicanal (apresentaremos uma demonstração mais rigorosa no Capítulo 3 através da matriz de espalhamento). Há também diversas outras formas de obter a fórmula de Landauer, como pela matriz de transferência, pela teoria da resposta linear e por funções de Green de não-equilíbrio [2].

Um condutor com coerência de fase permite aos elétrons fluir em seu interior por uma longa distância com a mesma fase da função de onda eletrônica. No caso extremo de um condutor unidimensional, onde se tem apenas um canal ocupado, ligado a dois reservatórios caracterizados pelos potenciais eletro-químicos μ_1 e μ_2 ($\mu_1 > \mu_2$), ver Figura 2.3. Os processos de espalhamento no condutor serão representados por uma barreira de potencial entre dois fios unidimensionais ideais, que por sua vez estão conectados aos dois reservatórios. A corrente fluindo do reservatório 1 para o reservatório 2 é dada pela integral sobre o fluxo de elétrons que saem do reservatório 1 com vetor de onda k e entram no condutor, menos o fluxo de elétrons com vetor de onda k' vindos do reservatório 2 para o condutor:

$$I = 2e \left[\int_0^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} v(k) f_1(k) \mathcal{T}(E) - \int_0^{+\infty} \frac{dk'}{2\pi} v(k') f_2(k') \mathcal{T}(E') \right] \quad (2.4)$$

onde o fator 2 é devido a degenerescência de spin do canal, $v(k)$ é a velocidade, \mathcal{T} é o coeficiente de transmissão, $f_1(k)$ e $f_2(k')$ são as funções de distribuição fermiônicas caracterizadas por μ_1 e μ_2 . Os limites de integração respeitam a nossa consideração do sentido do fluxo (reservatório 1 \rightarrow reservatório 2). A baixas temperaturas, as funções de distribuição serão unitárias e o valor de k terá limite superior dado pela energia μ . Fazendo a troca de variáveis de integração para a energia através da relação, $dE = \hbar v(k) dk$, temos:

$$I = \frac{2e}{2\pi} \left[\int_0^{\mu_1} dE \left(\frac{dk}{dE} \right) v(k) \mathcal{T}(E) - \int_0^{\mu_2} dE \left(\frac{dk'}{dE} \right) v(k') \mathcal{T}(E) \right]$$

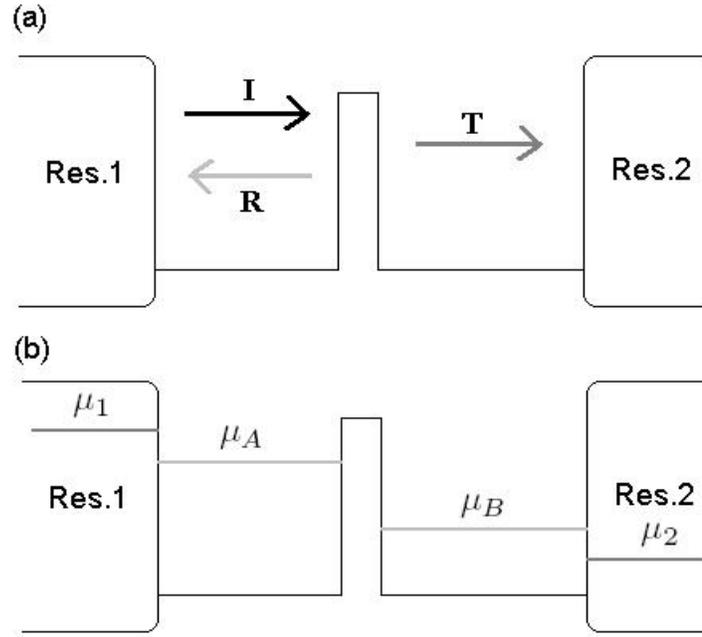


Figura 2.3: Ilustração da geometria de Landauer: (a) I é a corrente incidente, T o coeficiente da transmissão e R é o coeficiente de reflexão. (b) μ_1 e μ_2 são os potenciais eletro-químicos dos reservatórios e μ_A e μ_B são os potenciais do condutor ideal dos dois lados da região de espalhamento.

e

$$I = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \mathcal{T}(E) \quad (2.5)$$

Dessa forma, é importante notar que a corrente é independente da velocidade de Fermi e da densidade de estados. Se a voltagem aplicada é baixa, pode-se considerar que o coeficiente de transmissão será independente da energia, assim:

$$I = \frac{2e}{\hbar} (\mu_1 - \mu_2) \mathcal{T} \quad (2.6)$$

A passagem dos elétrons pelo condutor dará uma carga espacial ao condutor, que por sua vez irá alterar localmente os potenciais eletro-químicos na região de contato entre o condutor e os eletrodos. Assim, os potenciais eletro-químicos efetivos podem ser escrito μ_A e μ_B , com a diferença de potencial entre os eletrodos dada por $eV = \mu_A - \mu_B$, o qual será menor do que a voltagem quando os estados do condutor não estão ocupados $\mu_1 - \mu_2$. Essa diferença é chamada de voltagem de contato. Agora é necessário procurar uma relação entre as energias $\mu_A - \mu_B$ e $\mu_1 - \mu_2$. Para fazer isso, é tomado a densidade de carga do lado esquerdo do condutor:

$$n_a = \frac{2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk f_a(E) = \frac{2}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk [(2 - \mathcal{T}) f_1(E) + \mathcal{T} f_2(E)]$$

onde $f_a(E)$ é a função de distribuição próxima do equilíbrio no lado esquerdo do condutor. A integração leva em consideração os fluxos de elétrons vindos da esquerda e da direita, e a conservação da probabilidade $\mathcal{T} + \mathcal{R} = 1$ é utilizada.

Da mesma forma, podemos escrever a densidade de carga do lado direito do condutor:

$$n_b = \frac{2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk f_b(E) = \frac{2}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk [(2 - \mathcal{T})f_2(E) + \mathcal{T}f_1(E)]$$

Considerando baixas temperaturas, a diferença na densidade $\Delta n = n_a - n_b$ é facilmente obtida:

$$\Delta n = 2 \int_{\mu_B}^{\mu_A} dE \left(\frac{dk}{dE} \right) = \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \left(\frac{dk}{dE} \right) [2 - \mathcal{T}] - \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \left(\frac{dk}{dE} \right) \mathcal{T}$$

Se os potenciais eletro-químicos estão próximos ao nível de Fermi, o coeficiente de transmissão pode ser considerado independente da energia (de fato fazemos $T(E) = T(E_F)$), bem como o inverso da velocidade dk/dE . Portanto:

$$2 \int_{\mu_B}^{\mu_A} dE \left(\frac{1}{\hbar v} \right) = (2 - \mathcal{T}) \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \left(\frac{1}{\hbar v} \right) - \mathcal{T} \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \left(\frac{1}{\hbar v} \right)$$

$$\mu_A - \mu_B = (1 - \mathcal{T})(\mu_1 - \mu_2) \quad (2.7)$$

Como, $eV = \mu_A - \mu_B = (1 - \mathcal{T})(\mu_1 - \mu_2)$ e $G = I/V$:

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{\mathcal{T}}{1 - \mathcal{T}} \quad (2.8)$$

Essa é a fórmula originalmente deduzida por Landauer [3, 4] para o caso monocanal. No entanto, deve-se a Landauer e Buttiker [3] a correta ligação desse resultado e os dados experimentais. O ponto chave está no arranjo dos terminais de medidas, se as medidas de voltagem são feitas de forma não invasiva, ou seja, se a voltagem é medida no par de terminais paralelos àquele que estamos usando para injetar corrente (configuração de 4 terminais) a relação para condutância $G = 2e^2/h \times \mathcal{T}/(1 - \mathcal{T})$ é a correta. Entretanto, ao medirmos a voltagem nos mesmos pares que estamos inserindo corrente, a resistência de contato deve ser levada em conta e tem-se $eV = \mu_1 - \mu_2$, com:

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T} \quad (2.9)$$

Essa última é a relação comumente encontrada na literatura como a fórmula de Landauer [1–3]. O significado dessa fórmula é que a condutância é um valor constante que depende apenas de constantes fundamentais ($G_0 = 2e^2/h = (12, 9k\Omega)^{-1} = 77, 5\mu S$) multiplicadas por um coeficiente quântico. Ela é independente da velocidade, da densidade de estados e nenhum tempo característico como no caso clássico.

No caso de dois terminais com múltiplos canais abertos, sem a troca de cargas entre esses canais, a condutância total é dada pela soma dos coeficientes de transmissão de cada canal aberto multiplicado pelo quantum de condutância (com degenerescência de spin):

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_i \mathcal{T}_i \quad (2.10)$$

A demonstração dessa fórmula será feita no Capítulo 3, ao deduzirmos as expressões para o ruído através da abordagem da matriz de espalhamento, que veremos ser bastante poderosa e intuitiva.

Entretanto, quando o condutor é completamente transparente para os canais abaixo da energia de Fermi, temos $\mathcal{T}_i = 1$ para todos os canais, ou seja, o somatório pode ser substituído por N_{\perp} , o número total de canais discretos abertos (abaixo do nível de Fermi) transversos ao condutor. Assim,

$$G = \frac{2e^2}{h} N_{\perp} \quad (2.11)$$

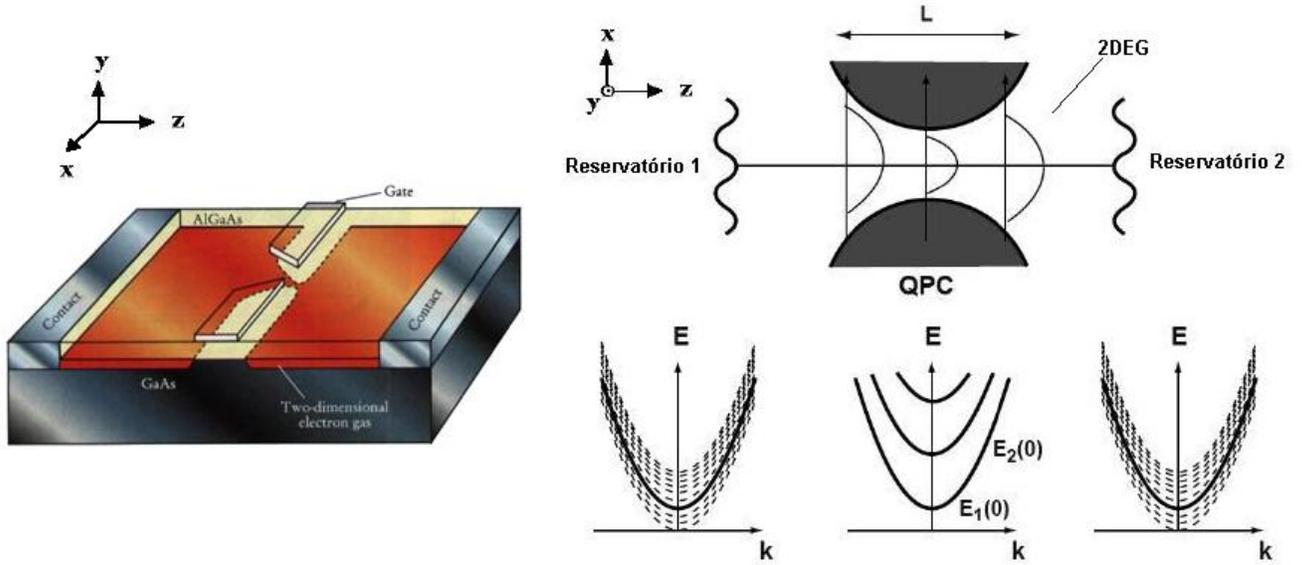


Figura 2.4: Esquema de um contato quântico pontual de comprimento L , conectado a dois grandes reservatórios de elétrons. Os primeiros canais transversos permitem propagação de elétrons. Devido a baixa dimensionalidade, os canais $E_n(0)$ são bem separados na região do contato. Em contraste, há uma grande densidade de canais na região dos reservatórios.

A fórmula de Landauer tem sido verificada experimentalmente, primeiramente em 2DEG com alta mobilidade formado por epitaxia na interface de heteroestruturas semicondutoras de GaAs e AlGaAs dopado ver Tabela 2.1, quando uma voltagem de gate é aplicada para criar um contato quântico pontual cuja espessura W permite acessar o regime balístico Figura 2.4. Esse confinamento lateral, essencialmente forma fios finos o suficiente (da escala λ_{dB}) para que as funções de onda dos elétrons devam ser quantizadas na dimensão transversa, gerando auto-valores de energia discretos (canais) E_n , com $n = 1, 2, \dots$. Cada canal é considerado um “fio” 1D pelos quais um elétron flui com energia cinética (longitudinal) $E_l = \hbar^2 k_z^2 / 2m$. Assim, temos a energia total $E_n(k) = E_n + E_l$. Os reservatórios, geralmente macroscópicos, são as únicas fontes e sorvedouro de elétrons e da energia dissipada quando um elétron atravessa o contato. Nesses reservatórios, há modos transversos, no entanto por serem macroscópicos, esses modos estão muito mais próximos entre si e há um número maior de modos do que na região de contato. Todos os modos nos reservatórios são assumidos serem igualmente populados com elétrons de acordo com a distribuição de Fermi-Dirac com um potencial eletro-químico μ . Isso implica que para uma dada energia (de Fermi) abaixo de μ , todos os modos têm exatamente o mesmo número de elétrons, o qual é unitário devido ao princípio de exclusão de Pauli (ou dois se a degenerescência de spin é incluída).

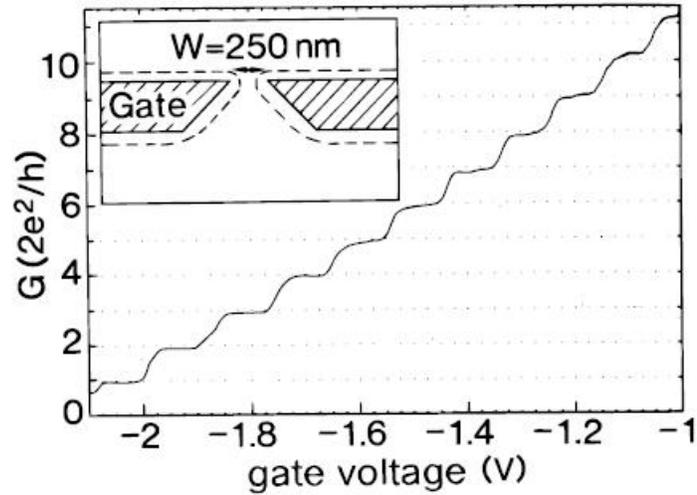


Figura 2.5: Condutância em função da voltagem de gate em um contato quântico a 0,6K (GaAs/AlGaAs). A condutância mostra plateaus múltiplos inteiros de $2e^2/h$. Ver [3].

Se a energia de Fermi é menor que E_1 , ver Figura 2.4, então o contato será fechado para o fluxo de elétrons, ou seja, o coeficiente de transmissão \mathcal{T} vai para zero e o transporte entre os reservatórios acontece apenas por tunelamento. Isso pode ser feito aplicando uma alta voltagem de gate negativa, e assim diminuindo à zero a espessura W do contato. Quando a energia de Fermi esta sobre ou pouco acima de E_1 (diminuindo a voltagem de gate negativa aplicada, por exemplo), é aberto esse canal para passagem dos elétrons e teremos uma condutância finita de $2e^2/h$. Aumentando ainda mais a energia de Fermi, os outros canais são abertos e é observado plateaus de condução devido a quantização da condutância, confirmando a formula de Landauer, Figura 2.5.

Capítulo 3

Ruído

Neste Capítulo será descrito as origens e as características do ruído em condutores eletrônicos. Como flutuações e ruído são fenômenos característicos de processos estocásticos, é introduzido alguns conceitos dessa teoria. Em seguida, descreveremos os vários tipos de ruído associados a circuitos eletrônicos e por fim, é utilizada a abordagem da matriz de espalhamento para descrever alguns tipos de ruído em uma mesma base. A importância do ruído de forma alguma pode ser subestimada, como disse Rolf Landauer, um dos pais da física mesoscópica: “O ruído é o sinal” [15]. O sentido dessa frase é que as flutuações dependentes do tempo de uma medida podem ser fontes de informações que não estão presentes no valor médio da quantidade medida.

3.1 Conceitos básicos de processos estocásticos

A teoria das flutuações é baseada na bem desenvolvida teoria matemática dos processos estocásticos, dessa forma, será introduzido alguns conceitos básicos de processos aleatórios. Por definição, um processo aleatório é uma função $x(t)$ da variável independente t (tempo). Seja $P(\dots)$ a probabilidade de ocorrer um dado evento, as funções de distribuição de primeira, segunda e n -ésima ordem para a variável aleatória $x(t)$ são definidas,

$$\begin{aligned}W_1(x_1, t_1) &= P(x(t_1) \leq x_1) \\W_2(x_1, t_1; x_2, t_2) &= P(x(t_1) \leq x_1; x(t_2) \leq x_2) \\&\dots \\W_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) &= P(x(t_1) \leq x_1; \dots; x(t_n) \leq x_n)\end{aligned}\tag{3.1}$$

onde x_i é o valor da variável aleatória no instante t_i . $W_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$ é a probabilidade de x no instante t_1 seja menor que um valor x_1 , e no instante t_2 seja menor que x_2 . Se $W_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ são funções diferenciáveis das variáveis x_1, \dots, x_n , é possível introduzir as correspondentes funções densidade de probabilidade,

$$\begin{aligned}w_1(x_1, t_1) &= \frac{\partial W_1(x_1, t_1)}{\partial x_1} \\w_2(x_1, t_1; x_2, t_2) &= \frac{\partial^2 W_2(x_1, t_1; x_2, t_2)}{\partial x_1 \partial x_2}\end{aligned}\tag{3.2}$$

onde w_n são funções densidade de probabilidade n-dimensional da quantidade $x(t)$. Tais funções devem ser consistentes entre si, cada função densidade k-dimensional pode ser obtida a partir de uma função n-dimensional se $n > k$, através de integração sobre as variáveis extras, isto é, $w_k(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) = \int dx_{k+1} \dots dx_n w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$.

Processos aleatórios são estacionários se todas as funções de distribuição $w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ mantêm-se invariáveis sobre um desvio idêntico de todos os tempos pontuais t_1, \dots, t_n , isto é, $w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = w_n(x_1, t_1 + \epsilon; \dots; x_n, t_n + \epsilon)$ para todo ϵ . Isso significa que $w_1(x_1, t_1)$ não depende do tempo t_1 , $w_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$ depende somente da diferença $t_1 - t_2$ ($w_2(x_1, x_2, t_1 - t_2)$) e assim por diante. Um processo estacionário não varia com o tempo. Um processo não-estacionário não obedece o considerado acima, nesse caso o conceito de média sobre um ensemble é válida, mas o de média temporal é falho.

O valor médio da variável aleatória $x(t)$ é igual a,

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) dW_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x w_1(x, t) \quad (3.3)$$

Pode-se, também, definir o momento de r-ésima ordem como o valor médio da quantidade aleatória $(\delta x(t))^r$, onde a flutuação $\delta x(t) = x(t) - \langle x \rangle$ da quantidade $x(t)$,

$$\langle (\delta x(t))^r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\delta x)^r w_1(x, t) \quad (3.4)$$

A variância é o momento de segunda ordem. Sabendo a densidade de probabilidade $w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ em instantes de tempo diferentes t_1, \dots, t_n , é possível calcular a função de correlação,

$$\langle \delta x(t_1) \dots \delta x(t_n) \rangle = \int dx_1 \dots dx_n \delta x_1 \dots \delta x_n w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) \quad (3.5)$$

A função de correlação é uma característica não aleatória da cinética das flutuações de $x(t)$, isto é, ela mostra como as flutuações evoluem no tempo em média. Considerando um ensemble de um grande número N de sistemas submetidos as mesmas condições, seja as flutuações $\delta x_i(t_1)$ e $\delta x_i(t_2)$ no i-ésimo sistema do ensemble nos instantes t_1 e t_2 . A função de correlação dessas flutuações é definida,

$$C_x(t_1, t_2) = \langle \delta x(t_1) \delta x(t_2) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta x_i(t_1) \delta x_i(t_2) \quad (3.6)$$

onde $\langle \rangle$ denota a média sobre um ensemble. Em um sistema estacionário, C_x depende somente da diferença $t_1 - t_2$. A função de correlação também pode ser determinada por uma média sobre um período de tempo bastante longo de medida t_m ,

$$C_x(t_1 - t_2) = \overline{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} = \lim_{t_m \rightarrow \infty} \frac{1}{t_m} \int_{-t_m/2}^{t_m/2} dt \delta x(t_1 + t) \delta x(t_2 + t) \quad (3.7)$$

ambas as funções de correlação Eq.(3.6) e Eq.(3.7) coincidem se o sistema é ergódico [8–10, 29, 30]. A Figura 3.1 ilustra as duas formas de se tomar a média de uma quantidade aleatória.

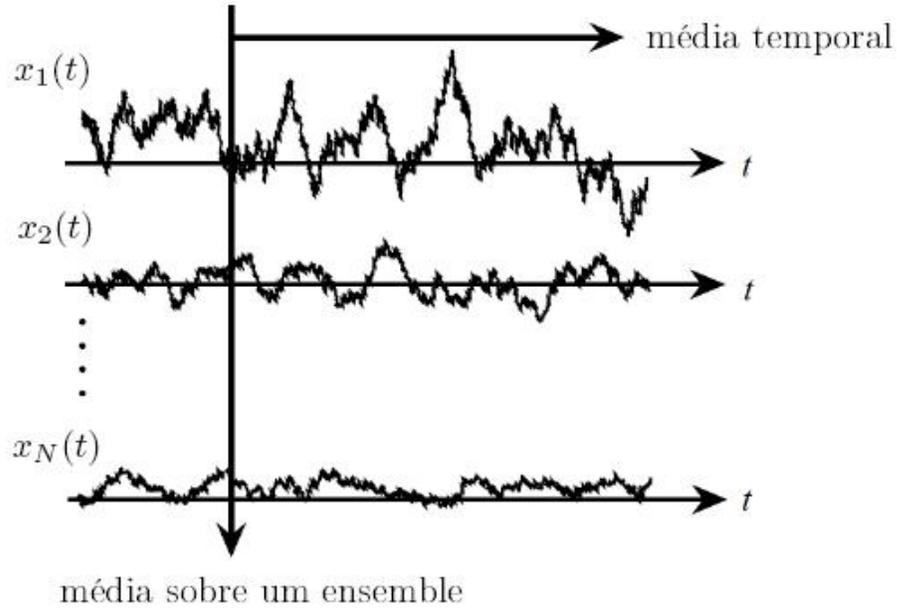


Figura 3.1: Média temporal e média sobre um ensemble de uma quantidade aleatória.

Na mecânica quântica a quantidade $x(t)$ será um operador, $X(t)$, há várias representações equivalentes para descrever as propriedades de um sistema quântico. Na representação de Schrödinger a função de onda depende do tempo e a dinâmica do sistema é governada pela equação de Schrödinger. Na representação de Heisenberg, ao contrário, a função de onda é independente do tempo e a completa dependência do tempo esta no operador $X(t)$, o qual obedece a equação de Heisenberg [27, 28]. A função de correlação é melhor expressa em termos dos operadores de Heisenberg das quantidades flutuantes, no entanto, a função de correlação é um observável físico e por isso deve ser real, para tal a função de correlação deve ser hermitiana,

$$C_X(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle X(t_1)X(t_2) + X(t_2)X(t_1) \rangle \quad (3.8)$$

satisfaz essa condição, é fácil ver que $C_X(t_1, t_2) = C_X(t_2, t_1)$.

No caso geral em que várias quantidades aleatórias estão correlacionadas, X_α ($\alpha = 1, \dots, M$), a função de correlação é uma matriz,

$$C_{\alpha\beta}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle X_\alpha(t_1)X_\beta(t_2) + X_\beta(t_2)X_\alpha(t_1) \rangle \quad (3.9)$$

a qual os elementos satisfazem,

$$C_{\alpha\beta}(t_1, t_2) = C_{\beta\alpha}(t_2, t_1) \quad (3.10)$$

e se o sistema é estacionário,

$$C_{\alpha\beta}(t_1 - t_2) = C_{\beta\alpha}(t_2 - t_1) \quad (3.11)$$

essas relações entre as funções de correlação, são apenas um pequeno esboço de relações mais profundas e menos óbvias entre as funções de correlação. As relações de Onsager [9, 10] dos

coeficientes cinéticos para as simetrias da equação de evolução de qualquer sistema de partículas sobre a simetria de reversão temporal, e para a simetria com respeito ao campo magnético que o sistema esta embebido, $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$. As relações de Onsager ao serem aplicadas a sistemas estacionários, são $C_{\alpha\beta}(t_1 - t_2; \mathbf{B}) = \pm C_{\alpha\beta}(t_2 - t_1; -\mathbf{B})$, onde o sinal + é quando as quantidades físicas $x_\alpha(t)$ e $x_\beta(t)$ (tanto para variáveis clássicas quanto quânticas) são ambas invariantes sobre a reversão temporal ou ambas mudam simultaneamente de sinal, a velocidade de uma partícula é um exemplo de quantidade que muda de sinal sobre uma reversão temporal. O sinal - é quando somente uma das duas variáveis muda de sinal.

A transformada de Fourier da função de correlação para um sistema estacionário é,

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C_{\alpha\beta}(t) \quad (3.12)$$

onde $t = t_1 - t_2$. Como a função de correlação é uma quantidade real, as seguintes relações (de Onsager) para a transformada de Fourier: $\mathcal{C}_{\alpha\beta}^*(\omega) = \mathcal{C}_{\alpha\beta}(-\omega)$ e $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega) = \mathcal{C}_{\beta\alpha}(-\omega) = \mathcal{C}_{\beta\alpha}^*(\omega)$ que são facilmente demonstradas, e $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{B}) = \pm \mathcal{C}_{\alpha\beta}(-\omega; -\mathbf{B}) = \pm \mathcal{C}_{\alpha\beta}^*(\omega; -\mathbf{B})$. A física dessas relações implica que $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega)$ é hermitiana, e na ausência de campo magnético aplicado, a função $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega)$ é puramente real ou puramente imaginária, dependendo da simetria das quantidades $x_\alpha(t)$ e $x_\beta(t)$ perante a reversão temporal.

A decomposição espectral das flutuações da quantidade $x(t)$ (ou da função de correlação associada a essa quantidade) é propriamente a quantidade que chamamos de ruído (densidade espectral do ruído) $\mathcal{S}_x(f)$. O teorema de Wiener-Khintchine [7, 9, 10] estabelece a relação entre a densidade espectral do ruído e a transformada de Fourier da função de correlação,

$$\mathcal{S}_x(f) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \mathcal{C}_x(t) = 2\mathcal{C}_x(\omega) \quad (3.13)$$

no caso geral de flutuações de várias quantidades correlacionadas, temos,

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta}(f) = 2\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega) \quad (3.14)$$

dessa forma, a matriz densidade espectral de ruído obedece as mesmas relações de Onsager mostradas anteriormente para $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(\omega)$.

No caso de circuitos eletrônicos, a densidade espectral do ruído da corrente $\mathcal{S}_I(\omega)$ e da voltagem $\mathcal{S}_V(\omega)$ são,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_I(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle I(t)I(0) + I(0)I(t) \rangle e^{i\omega t} dt \\ \mathcal{S}_V(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle V(t)V(0) + V(0)V(t) \rangle e^{i\omega t} dt \end{aligned} \quad (3.15)$$

tem as unidades A^2/Hz quando há variação da corrente e V^2/Hz quando é a voltagem que flutua.

3.2 Fundamentos de ruído

O termo *Ruído* em circuitos eletrônicos têm predominantemente um sentido negativo, pois ele refere-se ao sinal espúrio, não desejado e incontrollável obtido nas medidas do sinal. No entanto,

o ruído (em outras palavras, as flutuações do sinal) é um fator limitante da sensibilidade do equipamento. Sistemas eletrônicos são sensíveis as fontes de ruídos externos, via acoplamento magnético, capacitivo ou radio-freqüência, por exemplo. Além desses ruídos externos incomodo, há outros tipos de ruído, isto é, um ruído intrínseco dos sistemas. Essa última fonte de ruído não pode ser eliminada por técnicas de filtragem, pois esse ruído intrínseco reflete a natureza estatística devido ao grande número de elétrons associados ao processo de transporte. E dessa forma, esse ruído intrínseco pode fornecer informações sobre a dinâmica interna dos sistema não acessíveis às medidas de valores médios [1, 8, 11, 12].

3.2.1 Movimento Browniano

O movimento Browniano descreve o comportamento aleatório de uma partícula embebida em um fluido, e é o resultado de flutuações estatísticas do equilíbrio térmico desse sistema. Considerando o caso uni-dimensional de uma partícula que se move na direção x com velocidade $v(t)$ no tempo t . O sistema não está completamente isolado do mundo externo, mas está acoplado fracamente com o ambiente. Considerando um acoplamento externo que varia lentamente $\mathcal{F}(t)$ e uma parte que interage com os outros graus de liberdade do sistema $F(t)$, que varia rapidamente. $F(t)$ define um tempo de correlação τ^* , o qual mede o tempo médio entre máximos de $F(t)$. Para um tempo macroscópico τ , isto é, $\tau \gg \tau^*$, a equação de evolução é,

$$m \frac{dv}{dt} = \mathcal{F}(t) + F(t) \quad (3.16)$$

onde m é a massa da partícula, Eq.(3.16) é conhecida como equação de Langevin. Integrando sobre τ e tomando a média sobre um ensemble, tem-se,

$$m \langle v(t + \tau) - v(t) \rangle = \mathcal{F}(t)\tau + \int_t^{t+\tau} \langle F(t') \rangle dt' \quad (3.17)$$

o integrando $\langle F(t) \rangle$ é associado a variação da energia ΔE do mundo externo a temperatura T ,

$$\langle F(t) \rangle = \frac{1}{k_B T} \langle F(t) \Delta E \rangle_0 \quad (3.18)$$

onde $\langle \cdot \rangle_0$ é a média sobre um ensemble de equilíbrio. A variação da energia é equivalente a um trabalho negativo feito pela força $F(t)$,

$$\Delta E = \int_t^{t'} dt'' v(t'') F(t'') \approx -v(t) \int_t^{t'} dt'' F(t'') \quad (3.19)$$

essa última aproximação é válida quando a velocidade do sistema varia muito lentamente em relação a escala de τ . Substituindo a Eq.(3.19) na Eq.(3.18), obtemos,

$$\langle F(t') \rangle = -\frac{1}{k_B T} \langle F(t) v(t) \int_t^{t'} dt'' F(t'') \rangle_0 = -\frac{1}{k_B T} \overline{v(t)} \int_t^{t'} dt'' \langle F(t') F(t'') \rangle_0 \quad (3.20)$$

Como fisicamente o que é importante é a variação temporal do fenômeno, pode-se fazer a troca de variáveis $s = t'' - t'$. Dessa forma a Eq.(3.17) fica,

$$m \langle v(t + \tau) - v(t) \rangle = \mathcal{F}(t)\tau - \frac{1}{k_B T} \overline{v(t)} \int_t^{t+\tau} dt' \int_{t-t'}^0 ds \langle F(t') F(t' + s) \rangle_0. \quad (3.21)$$

Notemos a função de correlação $\langle F(t')F(t'+s) \rangle_0$. O segundo termo do lado direito da Eq.(3.21) esta relacionado com a dissipação no sistema.

3.2.2 Ruído térmico

A temperatura finita ($k_B T \gg e|V|, \hbar\omega$), as colisões dos elétrons com as vibrações da rede e impurezas induzem flutuações nas velocidades e posições desses elétrons. O movimento dos elétrons é bem descrito por um modelo de partícula Browniana. A agitação térmica dos elétrons faz surgir uma flutuação da voltagem do resistor. Como esse tipo de flutuação independe da aplicação de uma voltagem externa, esse é um fenômeno inerente a sistemas em equilíbrio. As flutuações térmicas microscópicas estão relacionadas com as correlações entre as quantidades físicas, tanto a corrente quanto a voltagem, que por sua vez esta associada a termos dissipativos, condutância ou resistência. Esse ruído é chamado de ruído Nyquist-Jonsson ou ruído térmico.

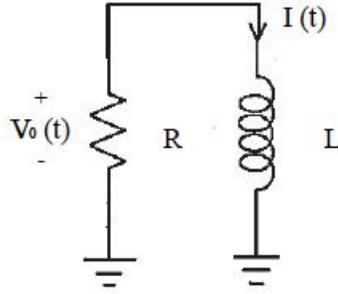


Figura 3.2: Circuito resistor-indutor.

Considerando um circuito resistor-indutor (RL) mostrado na Figura 3.2. Aplicando uma voltagem $V_0(t)$ ao resistor, a lei de Kirchhoff diz que $LdI(t)/dt = V_0(t)$, onde $I(t)$ é a corrente no circuito. Supondo que $V_0(t)$ pode ser decomposta em uma parte que varia lentamente $V(t)$ e uma parte que varia rapidamente $v(t)$. É importante notar que nesse circuito há três constante de tempo relevantes: τ, τ_m, τ^* . τ é uma constante de tempo para uma quantidade macroscópica do circuito mudar, por exemplo, $I(t)$. τ_m é uma constante de tempo para uma mudança na velocidade (momento) do elétron e τ^* é o tempo associado ao livre caminho médio entre colisões sucessivas do elétron com a rede. Assumindo $\tau \gg \tau_m \gg \tau^*$. A parte $V(t)$ varia na escala de tempo τ e a parte $v(t)$ varia na escala τ^* . No circuito, $V(t)$ atua para mante $I(t)$ ao redo de $\overline{I(t)} = 0$, ou seja, $V(t)$ é o termo de relaxação para quando $I(t)$ tenta se desviar do valor estacionário. Dessa forma, pode-se decompor $I(t)$ em uma parte que varia rápido e uma parte que varia lentamente: $I(t) = \overline{I(t)} + i(t)$. Sobre a escala de tempo τ_m a componente que varia rapidamente $i(t)$, após ser tomado a média, pode ser desprezada ($I(t) \approx \overline{I(t)}$), e assim a lei de Kirchhoff fica,

$$L \frac{d\overline{I(t)}}{dt} = V(t).$$

Como $V(t)$ é uma força de restauração para o valor estacionário de $I(t)$, com um coeficiente R . Assim, $V(t) = -R\overline{I(t)}$. Negligenciando pequenas modulações do sinal na corrente, temos,

$$L \frac{dI(t)}{dt} = V(t) + v(t) \approx -RI(t) + v(t) \quad (3.22)$$

fazendo $\gamma = R/L$, a equação de Langevin pode ser obtida para o caso do circuito,

$$\frac{dI(t)}{dt} + \gamma I(t) = \frac{1}{L}v(t) \quad (3.23)$$

Multiplicando a Eq.(3.23) por $e^{\gamma t}$ e rearranjando os termos,

$$\frac{d(e^{\gamma t}I(t))}{dt} = \frac{1}{L}e^{\gamma t}v(t) \quad (3.24)$$

Integrando a Eq.(3.24),

$$I(0) = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^0 e^{\gamma t}v(t)dt \quad (3.25)$$

Supondo que a flutuação da voltagem $v(t)$ é estacionária. A função de covariância dependerá apenas da diferença dos tempos, isto é, $\overline{v(t')v(t'')} = \overline{v(t' - t'')v(0)}$,

$$\overline{I(0)^2} = \frac{1}{L^2} \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^0 e^{\gamma(t+t')} \overline{v(t-t')v(0)} dt dt'. \quad (3.26)$$

Mudando a variável de integração $s = t' + t''$ e $s' = t' - t''$, temos,

$$\overline{I(0)^2} = \frac{1}{2\gamma L^2} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{v(0)v(s')} ds' \quad (3.27)$$

Através do teorema da equipartição da energia, tem-se $\overline{I(t)^2} = k_B T/L$, substituindo s' por t , obtemos,

$$R = \frac{1}{2k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{v(0)v(t)} dt \quad (3.28)$$

A Eq.(3.28) diz que as correlações na voltagem devido ao movimento aleatório térmico dos elétrons são relacionadas a resistência no equilíbrio, que por sua vez é um termo dissipativo no circuito. Aplicando o teorema de Wiener-Khintchine,

$$\mathcal{S}_v(\omega) = 4 \int_0^{\infty} \overline{v(0)v(t)} \cos(\omega t) dt \quad (3.29)$$

Como $v(0)$ e $v(t)$ são correlacionadas apenas na escala de tempo τ^* , pode-se aproximar $\omega\tau^* \ll 1$ e assim $\cos(\omega t) \approx 1$. Combinando as Eq.(3.28) e Eq.(3.29), finalmente obtemos a expressão para o ruído térmico,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_v(\omega) &\approx 2 \int_{-\infty}^{\infty} \overline{v(0)v(t)} dt \\ \mathcal{S}_v(\omega) &= 4k_B T R \end{aligned} \quad (3.30)$$

É importante notar que a Eq.(3.30) é independente da frequência, indicando que o ruído térmico é um ruído branco, até uma certa frequência de corte pelo menos. Similarmente o ruído Nyquist-Johnson em termos da corrente pode ser derivada tal que teremos, $\mathcal{S}_I(\omega) = 4k_B T G$, com G condutância. A maneira de diminuir o ruído térmico é através do resfriamento do resistor (desprezando os efeitos térmicos do cabeamento) o mais próximo possível do zero absoluto, e esse ruído irá ser suprimido linearmente com a temperatura.

3.2.3 Teorema da flutuação-dissipação

A mecânica estatística é o estudo de sistemas de muitos corpos, tratando de maneira efetiva incontáveis graus de liberdade desses sistemas [9, 29, 30]. Ela descreve excelentemente a termodinâmica dos fenômenos macroscópicos em equilíbrio, e também tem investigado processos de não-equilíbrio e irreversíveis. Das inúmeras abordagens, o teorema da flutuação-dissipação é de grande importância visto que ele diz que as propriedades de não-equilíbrio são intimamente relacionadas com as propriedades de equilíbrio [7]. Mais precisamente, esse teorema estabelece uma relação geral entre a resposta do sistema a uma perturbação externa e as flutuações internas do sistema sem perturbação. A validade do teorema da flutuação-dissipação está dentro do regime da resposta linear, o que indica que a perturbação externa é fraca e o termo dominante é linear. A resposta do sistema é caracterizada por uma função resposta, a condutância ou a impedância em circuitos eletrônicos, por exemplo. Por outro lado, as flutuações internas refletem as funções de correlação de quantidades físicas no equilíbrio térmico. Sumariamente, o papel do teorema da flutuação-dissipação pode ser sintetizado: primeiro, ele prediz as flutuações características ou o ruído intrínseco a partir de propriedades conhecidas; segundo, ele estabelece uma fórmula básica para conhecermos propriedades como a resistência, a partir da análise das flutuações no sistema.

Para demonstrarmos o teorema da flutuação-dissipação, é considerado um sistema que interage fracamente com o ambiente (banho) a temperatura T e está em equilíbrio térmico com esse ambiente. Esse sistema é governado por um hamiltoniano, $\mathcal{H}\psi_m = E_m\psi_m$ e a probabilidade desse sistema ser encontrado no m -ésimo estado ψ_m é dada pela distribuição de Gibbs, $w_m = \exp((F - E_m)/k_B T)$, onde E_m é a energia do m -ésimo estado e F é a energia livre do sistema, com $\sum_m w_m = 1$. De acordo com as Eq.(3.8) e Eq.(3.13), a densidade espectral das flutuações associadas a quantidade física (operador) $X(t)$ em equilíbrio,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_X(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} d(t_1 - t_2) \text{Tr}(\rho(X(t_1)X(t_2) + X(t_2)X(t_1))) \\ \mathcal{S}_X(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} d(t_1 - t_2) \sum_{mn} w_m (X_{mn}(t_1)X_{nm}(t_2) + X_{mn}(t_2)X_{nm}(t_1)) e^{i\omega(t_1 - t_2)} \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde ρ é a matriz densidade do sistema ($\rho = \sum_{mn} w_{mn} |\psi_m\rangle\langle\psi_n|$ e $E_m - E_n = \hbar\omega_{mn}$), $\text{Tr}(\cdot)$ é o traço e $X_{mn}(t) = \langle\psi_m|X(t)|\psi_n\rangle$ é o elemento de matriz de Heisenberg do operador $X(t)$. Resolvendo a equação de Heisenberg para esse operador, $\partial X_{mn}(t)/\partial t = i\omega_{mn}X_{mn}(t)$, obtêm-se $X_{mn}(t) = e^{i\omega_{mn}t}X_{mn}(0)$, onde $X_{mn}(0) = X_{mn}$ é o operador na representação de Schrödinger. Assim, a Eq.(3.31) fica,

$$\mathcal{S}_X(f) = 2\pi \sum_{mn} w_m |X_{mn}|^2 (\delta(\omega_{nm} - \omega) + \delta(\omega_{nm} + \omega)) \quad (3.32)$$

onde $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac. Ou de outra forma (trocando os índices mudos do segundo delta),

$$\mathcal{S}_X(f) = 2\pi \sum_{mn} (w_m + w_n) |X_{mn}|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega) \quad (3.33)$$

No caso de um sistema em equilíbrio, a probabilidade de transição entre os estados m e n depende somente da diferença de energias, $w_n = \exp(-\hbar\omega/k_B T)w_m$. Dessa forma, a Eq.(3.33) fica,

$$\mathcal{S}_X(f) = 2\pi(1 + e^{-\hbar f/k_B T}) \sum_{mn} w_m |X_{mn}|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega) \quad (3.34)$$

Queremos comparar a Eq.(3.34) com a equação para a resposta do sistema à perturbação causada pelo ambiente (dentro da teoria da resposta linear), similarmente a Eq.(2.1). Supondo a energia de interação entre a quantidade física X e um campo $F(t)$ como: $\mathcal{H}_F = -XF$. Como exemplo, X pode representar um momento de dipolo elétrico embebido em um campo elétrico F . Se é suposto que F é uma perturbação periódica, com frequência $\omega = 2\pi f$ e amplitude F_0 ,

$$F(t) = \frac{1}{2}(F_0 e^{-i\omega t} + F_0^* e^{i\omega t}) \quad (3.35)$$

Essa perturbação induzirá transições entre os estados do sistema. Conforme a regra de ouro de Fermi, as transições entre esses estados são,

$$W_{mn} = \frac{\pi}{2\hbar^2} |F_0|^2 |X_{mn}|^2 (\delta(\omega_{nm} + \omega) + \delta(\omega_{mn} - \omega)) \quad (3.36)$$

essas transições serão acompanhadas por uma absorção ou emissão de $\hbar\omega$. A potência transferida para o sistema é obtida pela média sobre os estados iniciais,

$$\bar{Q} = \sum_{mn} w_m W_{mn} \hbar\omega_{nm} \quad (3.37)$$

Substituindo a distribuição de Gibbs e Eq.(3.36) em Eq.(3.37), obtêm-se,

$$\bar{Q} = \frac{\pi\omega}{2\hbar} |F_0|^2 (1 - e^{-\hbar f/k_B T}) \sum_{mn} w_m |X_{mn}|^2 \delta(\omega_{mn} - \omega) \quad (3.38)$$

De acordo com a teoria da resposta linear (ver Eq.(2.2)) e considerando a Eq.(3.35), o valor esperado para a quantidade X será,

$$\langle X(t) \rangle = \frac{1}{2} (F_0 R(\omega) e^{-i\omega t} + F_0^* R(-\omega) e^{i\omega t}) \quad (3.39)$$

onde $R(\omega)$ (geralmente chamada de susceptibilidade complexa) é a transformada de Fourier da função resposta $R(t)$. Dessa forma, a potência absorvida pelo sistema e dissipada por ele após uma média temporal por um período $2\pi/\omega$, será

$$\bar{Q} = \overline{-\langle X(t) \rangle \frac{dF}{dt}} = \frac{1}{4} \overline{(-i\omega F_0 R(\omega) e^{-i\omega t} + i\omega F_0^* R^*(\omega) e^{i\omega t}) (F_0 e^{-i\omega t} + F_0^* e^{i\omega t})} \quad (3.40)$$

onde a barra superior denota uma média temporal. Somente os termos independentes do tempo contribuem para dissipação, assim,

$$\bar{Q} = \frac{1}{4} |F_0|^2 i\omega (R^*(\omega) - R(\omega)) = \frac{1}{2} |F_0|^2 \omega \mathcal{I}m(R(\omega)) \quad (3.41)$$

Ao compararmos as Eq.(3.34), Eq.(3.38) e Eq.(3.41), finalmente obtemos o teorema da flutuação-dissipação:

$$\mathcal{S}_X(f) = 2\hbar \coth\left(\frac{\hbar f}{2k_B T}\right) \mathcal{I}m(R(\omega)) \quad (3.42)$$

ou seja, a relação entre a densidade espectral do ruído e a potência dissipada (função resposta) ambas na mesma frequência.

Explicitando a fórmula do teorema da flutuação-dissipação para o caso de sistemas eletrônicos, a relação entre a susceptibilidade R e a condutância generalizada $G(\omega)$, a qual é a resposta da variação temporal de X (isto é, $I = dX/dt$) à perturbação F , $G(\omega) = -i\omega R(\omega)$, com $\mathcal{R}e(G) = \omega \mathcal{I}m(R)$. E a relação entre as densidades espectrais são, $\mathcal{S}_I(f) = \omega^2 \mathcal{S}_X(f)$. Portanto,

$$\mathcal{S}_I(f) = 2hf \coth\left(\frac{hf}{2k_B T}\right) \mathcal{R}e(G(\omega)) \quad (3.43)$$

O movimento Browniano discutido na seção 3.2.1 é um protótipo para o teorema da flutuação-dissipação, visto que na Eq.(3.21) também há uma relação entre a flutuação interna do sistema e a resposta (dissipação) desse sistema a perturbação externa. Também é fácil ver que quando $k_B T \gg hf$ na Eq.(3.43), recuperamos a Eq.(3.30) para o ruído térmico.

3.2.4 Ruído $1/f$

O ruído $1/f$ ou ruído de baixa-freqüência tem vários nomes alternativos, por exemplo, ruído flicker, ruído pink ou ruído telegráfico aleatório. Como o nome indica, o ruído $1/f$ é a fonte dominante de ruído no regime de baixas freqüências. Em um circuito, as seguintes igualdades são válidas [7],

$$\frac{\mathcal{S}_I(f)}{I^2} = \frac{\mathcal{S}_V(f)}{V^2} = \frac{\mathcal{S}_R(f)}{R^2} = \frac{\mathcal{S}_G(f)}{G^2} = \frac{C_{1/f}}{f} \quad (3.44)$$

onde $C_{1/f}$ mede a intensidade do ruído. Experimentalmente, as quantidades $\mathcal{S}_i(f)$ são proporcionais a f^α onde o grau medido $\alpha = -1, 0 \pm 0, 1$ [7]. A origem microscópica desse ruído não é clara e constitui uma significativa área de investigação tanto em ciência quanto em engenharia, devido a sua presença numa vasta gama de sistemas (semicondutores, metais, supercondutores, vidros de spins e etc.). Das muitas especulações teóricas sobre a origem, universalidade, existência de um *cutoff*, por exemplo, o fato é que o ruído telegráfico aleatório deve apresentar um espectro típico proporcional a $1/f$, um modelo simples consiste em associar esse ruído a centros de aprisionamento no sistema que capturam e liberam os elétrons ou buracos de maneira aleatória. No entanto, a questão de quais são os candidatos a serem esses centros de aprisionamento permanece, dentre os possíveis eleitos, defeitos na superfície ou interfaces fazem uma boa campanha.

Considerando um ruído cuja quantidade física seja x e sua flutuação Δx . Supondo que Δx decaia com a escala de tempo τ [21], a equação diferencial de decaimento é,

$$-\frac{d\Delta x(t)}{dt} = \frac{\Delta x(t)}{\tau} \quad (3.45)$$

integrando essa equação temos,

$$\Delta x(t) = \Delta x(t_0)e^{-(t-t_0)/\tau} \quad (3.46)$$

A função de correlação de x é,

$$C_x(t) = \langle \Delta x(t_0)\Delta x(t+t_0) \rangle = \langle (\Delta x)^2 \rangle e^{-(t-t_0)/\tau} \quad (3.47)$$

Utilizando o teorema de Wiener-Khintchine, a densidade espectral de ruído será,

$$\mathcal{S}_x(f) = 4 \int_0^\infty C_x(t) \cos(2\pi ft) dt = 4 \langle (\Delta x)^2 \rangle \left(\frac{\tau}{1 + (2\pi ft)^2} \right) \quad (3.48)$$

A Eq.(3.48) apresenta um espectro tipicamente Lorentziano, mostrando que essa relação apresenta característica de ruído branco (terminologia utilizada para ruído independente da frequência) quando $f\tau \ll 1$ e apresenta espectro proporcional a $1/f^2$ para $f\tau \gg 1$. Se há um grande número de espectros Lorentzianos, o ruído total $\mathcal{S}_x^{Tot}(f)$ é dado através da soma de processos independentes. Matematicamente, esse novo espectro pode ser obtido através da introdução de um fator $g(\tau)$ inversamente proporcional a τ , isso implica que o processo Lorentziano possui um tempo de relaxação τ satisfazendo a desigualdade $\tau_1 < \tau < \tau_2$, e $g(\tau)$ pode ser expresso como $g(\tau)d\tau = \frac{1}{\tau \ln(\tau_2/\tau_1)}d\tau$. Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_x^{Tot}(f) &= \int_{\tau_1}^{\tau_2} g(\tau) \langle (\Delta x)^2 \rangle \left(\frac{4\tau}{1 + (2\pi f\tau)^2} \right) d\tau \\ \mathcal{S}_x^{Tot}(f) &= \frac{2}{\pi \ln(\tau_2/\tau_1)} \left(\frac{1}{f} \right) \langle (\Delta x)^2 \rangle (\tan^{-1}(2\pi f\tau_2) - \tan^{-1}(2\pi f\tau_1)) \end{aligned} \quad (3.49)$$

É possível identificar três regimes na Eq.(3.49): (1) para $f < 1/2\pi\tau_2$, temos $\mathcal{S}_x^{Tot}(f) = 4\tau_2 \langle (\Delta x)^2 \rangle / \ln(\tau_2/\tau_1)$, a qual é independente da frequência; (2) para $1/2\pi\tau_2 < f < 1/2\pi\tau_1$, temos $\mathcal{S}_x^{Tot}(f) = \langle (\Delta x)^2 \rangle / \ln(\tau_2/\tau_1) f$, a qual apresenta um espectro proporcional a $1/f$; (3) para $f > 1/2\pi\tau_1$, temos $\mathcal{S}_x^{Tot}(f) = \langle (\Delta x)^2 \rangle / \pi^2 \tau_1 \ln(\tau_2/\tau_1) f^2$, a qual decai mais rápido com $1/f^2$. Contudo, essa abordagem teórica é bem sucedida, pois apresenta um espectro proporcional a $1/f$ em concordância com os experimentos.

Uma relação empírica para o ruído $1/f$ foi proposta (relações de Hooge) [7,21] para condutores homogêneos (semicondutores e metais),

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_I(f) &= C \frac{\bar{I}^2}{N_c f^\alpha} \\ \mathcal{S}_V(f) &= C \frac{\bar{V}^2}{N_c f^\alpha} \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde $\alpha \approx 1$, N_c é o número total de portadores de carga livres, $C = 2 \times 10^{-3}$ é um coeficiente universal (coeficiente de Hooge). Pelo fato de em metais haver um maior número de portadores livres em relação aos semicondutores, a amplitude do ruído $1/f$ é menor em condutores metálicos do que em semicondutores [7].

3.2.5 Ruído shot

Em 1918, W. Schottky [2, 3, 14] previu que devido a discretização dos portadores de carga em um condutor ou em um tubo de raios catódicos, deveria haver uma flutuação intrínseca das medidas de corrente nesses sistemas, ele chamou *Schroteffekt* e atualmente é denominado ruído shot clássico ou ruído Poissoniano. Cujos desenvolvimentos posteriores são devidos a J. B. Johnson e H. Nyquist em meados da década de 1920. Desprezando interações entre os elétrons, cada elétron emitido pelo cátodo e movendo-se no vácuo entre o cátodo e o ânodo e por fim chegando no ânodo, cria um pulso $F(t)$ medido, estatisticamente esse é um típico evento Poissoniano: cada elétron tem uma probabilidade de ser emitido por unidade de tempo e essa probabilidade não depende

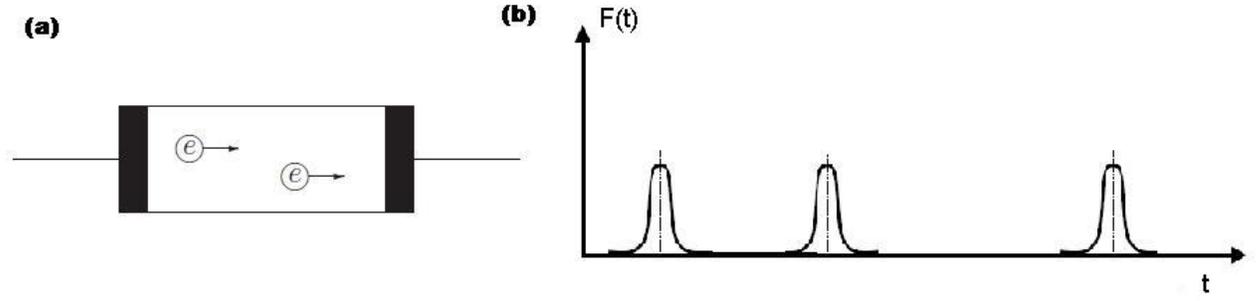


Figura 3.3: Ilustrações: (a) Um tubo de raios catódicos. Devido a discretização da carga dos portadores, a corrente não flui continuamente e dessa forma apresenta ruído shot. (b) Seqüência de pulsos aleatórios medido no ânodo.

do que acontece aos outros elétrons (se eles são emitidos ou não). A integral da função $F(t)$ sobre o tempo é igual à carga do elétron, Figura 3.3.

Considerando que cada pulso é caracterizado pelo índice k , e t_k é o instante que corresponde à chegada do k -ésimo pulso no ânodo. Um pulso pode ser descrito por uma função $F(t - t_k; \mathbf{a}_k)$, a qual depende se os pulsos são idênticos ou não, que será escrito no parâmetro aleatório $\mathbf{a}_k = (a_{k1}, \dots, a_{km})$, esse parâmetro inclui a amplitude do pulso, a duração e etc. A quantidade medida é,

$$x(t) = \sum_k F(t - t_k; \mathbf{a}_k)$$

onde as quantidades aleatórias t_k e \mathbf{a}_k são independentes para k diferentes e as suas funções de distribuição não dependem de k . A probabilidade do tempo t_k estar entre t e $t + dt$ é proporcional a dt e igual a $n_1 dt$, onde n_1 é a frequência média do pulso. Se o tempo de medida do fenômeno pulsado é t_m , o número de pulsos n nesse intervalo de tempo flutuará em torno do valor médio $\bar{n} = n_1 t_m$. Utilizando a distribuição de Poisson,

$$P(n) = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}}$$

onde n é um evento aleatório. Obtemos a função característica $\phi_x(u)$ da variável aleatória x ,

$$\phi_{x_k}(u) = \overline{\exp(iux_k)} = \int d\mathbf{a} w_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) \int_{-t_m/2}^{t_m/2} \frac{dt_k}{t_m} e^{iuF(t-t_k; \mathbf{a})}$$

onde u é uma constante real e w é a função densidade de probabilidade. A função característica total $\phi_{x;n} = (\phi_{x_k})^n$ será,

$$\phi_x(u) = \exp\left(n_1 \int d\mathbf{a} w_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) \int_{-\infty}^{\infty} d\theta (\exp(iuF(\theta, \mathbf{a})) - 1)\right)$$

onde $\theta = t - t'$. A média e a variância de x , de acordo com Eq.(3.3) e Eq.(3.5), são

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x w(x) = n_1 \int d\mathbf{a} w_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) \int_{-\infty}^{\infty} d\theta F(\theta, \mathbf{a})$$

$$\langle (\delta x)^2 \rangle = n_1 \int d\mathbf{a} w_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) \int_{-\infty}^{\infty} d\theta F^2(\theta, \mathbf{a})$$

Lembrando que estamos considerando um processo estacionário, a função de correlação (Eq.(3.6) e Eq.(3.7)) pode ser obtida,

$$C_x(t_1 - t_2) = n_1 \int d\mathbf{a} w_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) \int_{-\infty}^{\infty} d\theta F(\theta; \mathbf{a}) F(\theta + t_1 - t_2; \mathbf{a})$$

Utilizando o teorema de Wiener-Khintchine Eq.(3.13), a densidade espectral do ruído será:

$$\mathcal{S}_x(f) = 2n_1 \int d\mathbf{a} w_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) |F(\omega; \mathbf{a})|^2$$

se todos os pulsos são idênticos, a integral sobre \mathbf{a} desaparece. Quando $F(\omega = 0)$, temos a integral sobre o pulso (carga) Q , dessa forma,

$$\mathcal{S}_x(0) = 2Q^2 n_1$$

com,

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t)$$

A frequência com que os pulsos são detectados, n_1 , é a corrente média pela carga, portanto:

$$\mathcal{S}_I(0) = 2eI \tag{3.51}$$

que é a bem conhecida fórmula para o ruído shot clássico. Medindo o ruído $\mathcal{S}_I(0)$ e a corrente I simultaneamente, é possível determinar a carga dos portadores de corrente. Veremos na próxima seção que para condutores com coerência de fase, o ruído shot apresenta um novo comportamento não somente devido a discretização da carga, mas também devido a estatística (férmions ou bósons) que essa carga pertence.

3.3 Abordagem da matriz de espalhamento

A idéia básica da matriz de espalhamento é relacionar as propriedades de transporte de um sistema, em particular a condutância e as flutuações da corrente, com as propriedades de espalhamento desse sistema, ou seja, com os coeficientes (probabilidades) de transmissão e reflexão. Essas últimas propriedades são obtidas através de cálculos quânticos das auto-funções de onda. Em sua forma tradicional, o método é aplicado para sistemas de partículas não interagentes no regime estacionário. O sistema pode estar tanto no estado de equilíbrio quanto no estado fora do equilíbrio, a distinção é introduzida por meio das funções de distribuição dos terminais que a região de espalhamento (condutor) esta conectada. A fim de esclarecer, é considerado um condutor conectado a dois terminais e partículas fermiônicas. Nesta seção é seguido o formalismo das Refs. [11, 13, 16].

3.3.1 Formalismo

Um sistema mesoscópico conectado a dois reservatórios (terminais), esquerdo (L) e direito (R), onde é assumido que os reservatórios são tão grandes de tal modo a serem caracterizados pelas suas respectivas temperaturas $T_{L,R}$ e potenciais eletro-químicos $\mu_{L,R}$, e as funções de distribuição de elétrons nos reservatórios serão aquelas da estatística de Fermi-Dirac:

$$f_\alpha(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_\alpha)/k_B T_\alpha} + 1} \quad (3.52)$$

com o sub-índice $\alpha = L, R$. É necessário notar que um estado de equilíbrio nos terminais somente pode ser estabelecido via processos inelásticos internos de cada terminal. Entretanto, não é considerado processos inelásticos nos sistemas mesoscópicos, esse sistemas apresentam coerência de fase eletrônica. Tal consideração é justificável pelo fato dos reservatórios serem grandes comparados com a secção transversal reta W (secção de choque) e do comprimento L dos condutores mesoscópicos, dessa forma os condutores mesoscópicos podem ser considerados como apenas uma pequena perturbação entre os reservatórios, os quais podem ter suas propriedades locais descritas por estados de equilíbrio. Outro fato a ser enfatizado é sobre a irreversibilidade do fenômeno, apesar da dinâmica do espalhamento no condutor ser descrita por um Hamiltoniano, a irreversibilidade é introduzida em decorrência dos processos de entrada e saída dos portadores de carga na região de espalhamento (condutor mesoscópico) não serem eventos relacionados (estatística Poissoniana).

Pode-se assumir, sem perda de generalidade, que longe da região de espalhamento o movimento eletrônico longitudinal (ao longo do eixo do condutor) e transversal (perpendicular ao condutor) são separáveis, considera-se o transporte efetivo sempre ocorrendo do reservatório esquerdo (L) para o direito (R). O movimento longitudinal é contínuo e caracterizado pelo vetor de onda $k_l \hat{z}$, com auto-valor de energia $E_l = \hbar^2 k_l^2 / 2m$. O movimento transverso é confinante ao deslocamento dos portadores de carga, dando origem a quantização desse movimento e caracterizado pelo índice discreto n , com auto-valor de energia $E_{\alpha;n}$ que pode ser diferente em cada reservatório. Esses auto-valores de energia do movimento transverso são chamados de canais (modos) transverso de condução. Assim temos $E = E_l + E_n$. O número total de canais do reservatório esquerdo para o condutor e do direito para o condutor é denotado por $N_{L,R}(E)$, respectivamente.

Introduzindo os operadores $a_{Ln}^\dagger(E)$ e $a_{Ln}(E)$ de criação e destruição, respectivamente, de elétrons com energia E no canal transverso n no reservatório esquerdo que incidem no condutor mesoscópico, e os operadores de criação $b_{Ln}^\dagger(E)$ e destruição $b_{Ln}(E)$ fermiônicos que descrevem elétrons refletidos do condutor mesoscópico para o reservatório esquerdo. Tais operadores obedecem as seguintes relações de anti-comutação:

$$a_{Ln}^\dagger(E)a_{Ln'}(E') + a_{Ln'}(E')a_{Ln}^\dagger(E) = \delta_{nn'}\delta(E - E'),$$

$$a_{Ln}(E)a_{Ln'}(E') + a_{Ln'}(E')a_{Ln}(E) = 0,$$

$$a_{Ln}^\dagger(E)a_{Ln'}^\dagger(E') + a_{Ln'}^\dagger(E')a_{Ln}^\dagger(E) = 0.$$

Com significados similares podemos introduzir os operadores de criação e destruição $a_{Rn}^\dagger(E)$ e $a_{Rn}(E)$ para os elétrons incidentes, e $b_{Rn}^\dagger(E)$ e $b_{Rn}(E)$ para os elétrons refletidos do condutor mesoscópico para o reservatório direito. Ver Figura 3.4.

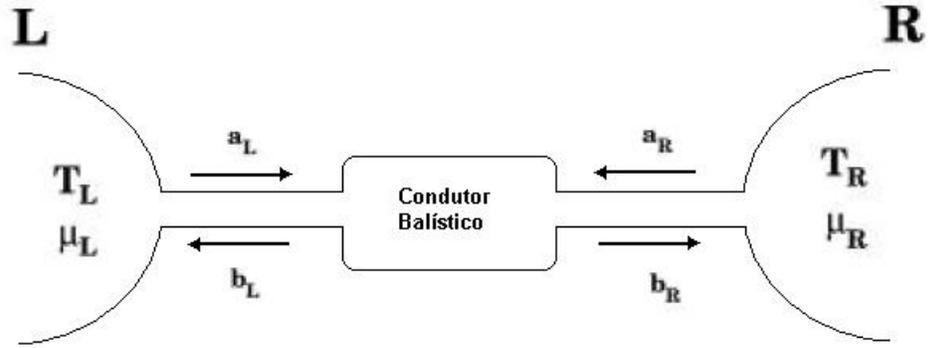


Figura 3.4: Ilustração do condutor balístico acoplado a dois reservatórios de elétrons, no caso de um único canal transversal aberto para condução

Queremos criar uma relação entre os operadores a e b , tal feito é possível através da introdução de uma matriz de espalhamento S :

$$\begin{pmatrix} b_{L1} \\ \vdots \\ b_{LN_L} \\ b_{R1} \\ \vdots \\ b_{RN_R} \end{pmatrix} = S \times \begin{pmatrix} a_{L1} \\ \vdots \\ a_{LN_L} \\ a_{R1} \\ \vdots \\ a_{RN_R} \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

A matriz S possui dimensão¹ $(N_L + N_R) \times (N_L + N_R)$ e cada elemento de matriz depende da energia total E , bem como a própria $S = S(E)$. A forma em bloco da matriz S é dada por:

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Nessa matriz S , os elétrons refletidos do condutor para os reservatórios esquerdo e direito são descritos pelas matrizes-bloco diagonal r (dimensão $N_L \times N_L$) e r' (dimensão $N_R \times N_R$). Já os elétrons transmitidos através do condutor mesoscópico são descritos pelas matrizes-bloco não diagonal t (dimensão $N_R \times N_L$) e t' (dimensão $N_L \times N_R$). Consideramos que o processo de espalhamento conserva o número de partículas (elétrons) envolvidas no transporte, isto é, a

¹A forma completa da matriz de espalhamento é:

$$S = \begin{pmatrix} S_{LL;11} & \cdots & S_{LL;1N_L} & S_{LR;11} & \cdots & S_{LR;1N_R} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{LL;N_L1} & \cdots & S_{LL;N_LN_L} & S_{LR;N_L1} & \cdots & S_{LR;N_LN_R} \\ S_{RL;11} & \cdots & S_{RL;1N_L} & S_{RR;11} & \cdots & S_{RR;11} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{RL;N_R1} & \cdots & S_{RL;N_RN_L} & S_{RR;N_R1} & \cdots & S_{RR;N_RN_R} \end{pmatrix}$$

Onde os elementos de matriz $S_{\alpha\beta,mn}$, com $\alpha, \beta = L, R$ e $m, n = N_\alpha, N_\beta$ indexando os reservatórios e os números de canais de cada reservatório, respectivamente.

matriz de espalhamento S é necessariamente unitária. Ainda, na ausência de campos magnéticos (os quais quebrariam a simetria de reversão temporal) a matriz S é simétrica.

A caracterização do fenômeno de transporte quântico é feito pelo operador de corrente:

$$I_L(z, t) = \frac{\hbar e}{2im} \int d\mathbf{r}_\perp \left[\Psi_L^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi_L(\mathbf{r}, t)}{\partial z} - \frac{\partial \Psi_L^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial z} \Psi_L(\mathbf{r}, t) \right] \quad (3.55)$$

onde o sub-índice L é referente ao reservatório esquerdo e os operadores de campo fermiônico Ψ e Ψ^\dagger são expressos por [12],

$$\Psi_L(\mathbf{r}, t) = \int dE e^{-iEt/\hbar} \sum_{n=1}^{N_L(E)} \frac{\chi_{Ln}(\mathbf{r}_\perp)}{(2\pi\hbar v_{Ln}(E))^{1/2}} [a_{Ln} e^{ik_{Ln}z} + b_{Ln} e^{-ik_{Ln}z}] \quad (3.56)$$

e o seu hermitiano conjugado,

$$\Psi_L^\dagger(\mathbf{r}, t) = \int dE e^{iEt/\hbar} \sum_{n=1}^{N_L(E)} \frac{\chi_{Ln}^*(\mathbf{r}_\perp)}{(2\pi\hbar v_{Ln}(E))^{1/2}} [a_{Ln}^\dagger e^{-ik_{Ln}z} + b_{Ln}^\dagger e^{ik_{Ln}z}] \quad (3.57)$$

onde \mathbf{r}_\perp são os eixos transversos (perpendiculares) ao condutor (definido ao longo do eixo z), χ_{Ln} são as funções de onda transversas, $k_{Ln} = \hbar^{-1}[2m(E - E_{Ln})]^{1/2}$ são vetores de onda (tomamos sempre $E - E_{Ln} \geq 0$ para todos os canais n abertos) e $v_n(E) = \hbar k_{Ln}/m$ é a velocidade dos elétrons de condução no n -ésimo canal.

Com isso, obtemos a seguinte expressão para o operador de corrente:

$$\begin{aligned} I_L(z, t) = & \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_n \int dE dE' \frac{e^{i(E-E')t/\hbar}}{\sqrt{v_{Ln}(E)v_{Ln}(E')}} \times \\ & \times [[v_{Ln}(E) + v_{Ln}(E')][e^{i(k_{Ln}(E') - k_{Ln}(E))z} a_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E') + \\ & - e^{i(k_{Ln}(E) - k_{Ln}(E'))z} b_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E')] + \\ & + [v_{Ln}(E) - v_{Ln}(E')][e^{-i(k_{Ln}(E) + k_{Ln}(E'))z} a_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E') + \\ & - e^{i(k_{Ln}(E) + k_{Ln}(E'))z} b_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E')] \end{aligned} \quad (3.58)$$

Podemos simplificar essa expressão ao considerarmos E próximo de E' , neste caso os termos como velocidades e o vetores de ondas, que dependem da energia (de fato ambas as energia são consideradas ligeiramente deslocadas do nível de Fermi E_F), aproximam-se entre si mais rápido que a diferença de energia $E - E'$. Dessa forma, obtemos uma expressão mais simples:

$$I_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} [a_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E') - b_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E')] \quad (3.59)$$

Da expressão acima é possível notar $n_{Ln}^+(E) = a_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E)$, o operador do número de ocupação dos elétrons incidentes sobre o condutor a partir do reservatório esquerdo através do canal n , e $n_{Ln}^-(E) = b_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E)$, o operador do número de ocupação dos elétrons refletidos do condutor

para o reservatório esquerdo pelo canal n . Fazendo $E' = E + \hbar\omega$ e integrando em relação a ω , obtemos:

$$I_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE [n_{Ln}^+(E, t) - n_{Ln}^-(E, t)] \quad (3.60)$$

onde $n_{Ln}^\pm(E, t)$ são os operadores número de ocupação dependente do tempo. A Eq.(3.60) diz que a diferença no número de ocupação dos elétrons fluindo do reservatório esquerdo para o direito, em cada canal, fornece a corrente em cada instante t .

Utilizando a matriz de espalhamento S , pode-se escrever o operador corrente em termos de a e a^\dagger apenas:

$$I_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha\beta} \sum_{mn} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} a_{\alpha m}^\dagger(E) A_{\alpha\beta}^{mn}(L; E, E') a_{\beta n}(E') \quad (3.61)$$

onde os sub-índices α e β dizem respeito aos reservatórios L e R , e A é uma matriz dada por [13],

$$A_{\alpha\beta}^{mn}(L; E, E') = \delta_{mn} \delta_{\alpha L} \delta_{\beta L} - \sum_k S_{L\alpha;mk}^\dagger(E) S_{L\beta;kn}(E') \quad (3.62)$$

com os elementos da matriz de espalhamento $S_{L\alpha;mk}(E)$ relacionando os estados refletidos ($b_{Lm}(E)$) para o reservatório L pelo canal m com os estados incidentes ($a_{\alpha k}(E)$) pelo reservatório α e canal k .

3.3.2 Condutância

Com a Eq.(3.61), podemos obter a corrente média que flui pelo condutor mesoscópico. Para um sistema no equilíbrio termodinâmico, a média quântico-estatística do produto de operadores de criação e destruição de elétrons de um gás de Fermi é dado por,

$$\langle a_{\alpha m}^\dagger(E) a_{\beta n}(E') \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} \delta(E - E') f_\alpha(E). \quad (3.63)$$

Usando as Eqs.(3.61) e (3.63), e como a matriz de espalhamento S é unitária, obtemos,

$$\langle I_L \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \int dE \text{Tr} [t^\dagger(E) t(E)] [f_L(E) - f_R(E)]. \quad (3.64)$$

Onde t é a matriz-bloco não diagonal da matriz de espalhamento, $t_{mn} = S_{RL;mn}$. No limite de temperatura nula, e para pequenas voltagens aplicadas, obtemos uma condutância,

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \text{Tr} [t^\dagger(E_F) t(E_F)]. \quad (3.65)$$

Dessa forma, é possível observarmos a relação entre a matriz de espalhamento no nível de Fermi e a condutância na Eq.(3.65), a qual é uma expressão básica invariante para a descrição das propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos. Diagonalizando a matriz $t^\dagger t$, ela terá um conjunto real de auto-valores (coeficientes ou probabilidade de transmissão) $\mathcal{T}_n(E)$ variando entre zero e a unidade. Na base dos auto-canais de condução, podemos reescrever a Eq.(3.64),

$$\langle I_L \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE \mathcal{T}_n(E) [f_L(E) - f_R(E)]. \quad (3.66)$$

e dessa forma obtemos a fórmula de Landauer para multi-canais de condução abertos:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_n \mathcal{T}_n(E_F). \quad (3.67)$$

onde n são canais degenerado em relação ao spin dos elétrons.

Também é possível, através da introdução de processos dissipativos (como a absorção ou emissão de radiação eletromagnética), expressarmos a condutância em termos dos coeficientes de transmissão $\mathcal{T}_{RL;mn} = |s_{RL;mn}|^2$ para elétrons transmitidos do reservatório L pelo canal n (entrada) para o reservatório R pelo canal m (saída). Assim obtemos,

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{mn} \mathcal{T}_{mn}(E_F). \quad (3.68)$$

Essas bases dos auto-canais são chamadas de bases naturais para a expressão da condutância. Apesar de detalharmos posteriormente a seguinte asserção, é instrutivo, agora, lembrarmos que apesar da condutância ser descrita apenas com os coeficientes de transmissão, há parâmetros como o ruído shot quântico (quando $e|V| \gg k_B T, \hbar\omega$) que não são apenas descrito por esses coeficientes, assim, os coeficientes de transmissão não são os elementos fundamentais da descrição do transporte, mas sim a cinética eletrônica é governada pela matriz de espalhamento S .

Apesar do trabalho original desta dissertação, considerar apenas uma nanoestrutura condutora acoplada a dois reservatórios (ver Cap. 4), por uma questão de completeza da teoria, tratamos o caso geral de um condutor mesoscópico acoplado a múltiplos reservatórios. Considerando um condutor mesoscópico conectado a múltiplos reservatórios eletrônicos (α), caracterizados pela função de distribuição de Fermi $f_\alpha(E)$, onde $E = E_F + \mu_\alpha$. Para uma dada energia, um reservatório α apresentará $N_\alpha(E)$ canais de condução abertos. Com isso, podemos mais uma vez introduzir os operadores de criação e destruição eletrônicos dos estados incidentes ($a_{\alpha n}^\dagger, a_{\alpha n}$) e dos refletidos ($b_{\alpha n}^\dagger, b_{\alpha n}$), através do canal n . Novamente, ambos esses operadores estão relacionados por meio da matriz de espalhamento, como na Eq.(3.53), da seguinte forma,

$$b_{\alpha m}(E) = \sum_{\beta n} S_{\alpha\beta;mn}(E) a_{\beta n}(E). \quad (3.69)$$

Em conformidade com as derivações anteriores, podemos generalizar o operador de corrente, Eq.(3.61), para o caso do fluxo eletrônico do reservatório α para o condutor,

$$I_\alpha(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\beta\gamma}^{\text{terminais canais}} \sum_{mn} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} a_{\beta m}^\dagger(E) A_{\beta\gamma}^{mn}(\alpha; E, E') a_{\gamma n}(E'), \quad (3.70)$$

com,

$$A_{\beta\gamma}^{mn}(\alpha; E, E') = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma} - \sum_k^{\text{canais}} S_{\alpha\beta;mk}^\dagger(E) S_{\alpha\gamma;kn}(E'). \quad (3.71)$$

onde os sub-índices γ e k referem aos eletrodos e aos canais abertos para condução em cada eletrodo, respectivamente.

A corrente média do condutor, provida do reservatório β , o qual se encontra com um potencial eletro-químico $\mu_\beta = \mu_{eq} + eV_\beta$, onde μ_{eq} refere-se ao potencial químico no equilíbrio, é dada por,

$$\langle I_\alpha \rangle = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\beta(\beta \neq \alpha)} V_\beta \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) [N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - Tr(S_{\alpha\beta}^\dagger S_{\alpha\beta})], \quad (3.72)$$

onde o traço é tomado sobre os índices dos canais do reservatório α . No regime linear, a corrente média é expressa,

$$\langle I_\alpha \rangle = \sum_{\beta} G_{\alpha\beta} V_\beta \quad (3.73)$$

com a matriz de condutância $G_{\alpha\beta} \equiv d\langle I_\alpha \rangle / dV_\beta|_{V_\beta=0}$. Assim,

$$G_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) [N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - Tr(S_{\alpha\beta}^\dagger S_{\alpha\beta})]. \quad (3.74)$$

lembrando que os elementos da matriz de espalhamento são calculados no nível de Fermi, $S_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}(E_F)$. Essa expressão para a matriz de condutância tem sido aplicada com sucesso, pioneiramente por Buttiker, no início da década de 1990, à uma gama de sistemas mesoscópicos com (condutores balísticos multi-terminais) e sem (efeito Hall quântico inteiro) simetria de reversão temporal [13].

A soma da corrente que entra no condutor por todos os terminais é nula em cada instante de tempo (conservação da corrente), para garantir que não haja fontes nem sumidouros de cargas internas no condutor, no caso de dois terminais temos: $I_L + I_R = 0$. Também é considerado que não há corrente líquida no condutor se os potenciais eletro-químicos de todos os terminais são simultaneamente alterados por uma mesma voltagem aplicada (invariância de *gauge*), desconsiderando a variação do potencial devido a um possível gradiente de temperatura. Para a matriz de condutância $G_{\alpha\beta}$, a conservação da corrente e a invariância de gauge implicam: $\sum_{\alpha} G_{\alpha\beta} = \sum_{\beta} G_{\alpha\beta} = 0$. Especialmente, no caso de dois terminais: $G = G_{LL} = G_{RR} = -G_{LR} = -G_{RL}$. Assim, no caso de dois terminais, calculando apenas um dos elementos da matriz de condutância é suficiente para se obter a matriz de condutância completa. Quando é aplicado um campo magnético externo B ao condutor e considerando uma corrente estacionária, as relações de Onsager (ver seção 3.1) podem ser aplicadas à matriz de condução: $G_{\alpha\beta}(B) = G_{\beta\alpha}(-B)$. Contudo, nos casos estacionários (corrente DC), a conservação da corrente e a invariância de gauge são devidos a matriz de espalhamento ser unitária.

3.3.3 Densidade espectral das flutuações da corrente

As flutuações da corrente, em função do tempo, em torno do valor da corrente média, associadas ao reservatório α é definida como:

$$\Delta I_\alpha(t) \equiv I_\alpha(t) - \langle I_\alpha \rangle. \quad (3.75)$$

A função de correlação corrente-corrente (uma característica não aleatória da cinética das flutuações ao acaso, a qual mostra como as flutuações evoluem no tempo em média) entre os reservatórios α e β , $\mathcal{F}_{\alpha\beta}(t - t')$, é definida (ver Eq.(3.9)):

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta}(t - t') \equiv \frac{1}{2} (\langle \Delta I_\alpha(t) \Delta I_\beta(t') \rangle + \langle \Delta I_\beta(t') \Delta I_\alpha(t) \rangle). \quad (3.76)$$

Há várias definições para a função de correlação corrente-corrente, que diferem por um fator numérico, na literatura. Utilizamos a definição usada por Landau [31]. Em um sistema estacionário, isto é, na ausência de campo externo dependente do tempo, o função de correlação corrente-corrente deve ser dependente apenas da diferença $t - t'$.

O espectro de excitações dependente da frequência, isto é, a transformada de Fourier da função de correlação corrente-corrente, será:

$$\delta(\omega + \omega')\mathcal{S}_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi} (\langle \Delta I_{\alpha}(\omega)\Delta I_{\beta}(\omega') \rangle + \langle \Delta I_{\beta}(\omega')\Delta I_{\alpha}(\omega) \rangle), \quad (3.77)$$

onde $\mathcal{S}_{\alpha\beta}(\omega)$, é a densidade espectral do ruído.

A densidade espectral do ruído, Eq.(3.77), é dependente do valor esperado do produto de quatro operadores a . Esse valor esperado para um sistema em equilíbrio é dado por (teorema de Wick),

$$\begin{aligned} & \langle a_{\alpha k}^{\dagger}(E_1)a_{\beta l}(E_2)a_{\gamma m}^{\dagger}(E_3)a_{\delta n}(E_4) \rangle - \langle a_{\alpha k}^{\dagger}(E_1)a_{\beta l}(E_2) \rangle \langle a_{\gamma m}^{\dagger}(E_3)a_{\delta n}(E_4) \rangle \\ & = \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\delta_{kn}\delta_{ml}\delta(E_1 - E_4)\delta(E_2 - E_3)f_{\alpha}(E_1)[1 \mp f_{\beta}(E_2)]. \end{aligned} \quad (3.78)$$

onde o sinal de cima, $-$, corresponde a estatística de Fermi-Dirac, e o sinal de baixo, $+$, a estatística de Bose-Einstein. Também, fica implícito que para férmions, $f_{\alpha}(E)$ é a função de distribuição de Fermi e para bósons, $f_{\alpha}(E)$ é a função de distribuição de Bose. Essas convenções serão mantidas daqui para frente nesta dissertação, apesar de estarmos interessados apenas em sistemas fermiônicos.

Portanto, substituindo a Eq.(3.70) e Eq.(3.78) na Eq.(3.77) e integrando sobre ω' , temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\alpha\beta}(\omega) = & \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\gamma\delta} \sum_{mn} \int dE A_{\gamma\delta}^{mn}(\alpha; E, E + \hbar\omega) A_{\delta\gamma}^{nm}(\beta; E + \hbar\omega, E) \times \\ & \times \{f_{\gamma}(E)[1 \mp f_{\delta}(E + \hbar\omega)] + f_{\delta}(E + \hbar\omega)[1 \mp f_{\gamma}(E)]\}. \end{aligned} \quad (3.79)$$

A Eq.(3.79) é a expressão mais geral que se pode obter com a abordagem da matriz de espalhamento para a densidade espectral do ruído, observamos a relação de simetria $\mathcal{S}_{\alpha\beta}(\omega) = \mathcal{S}_{\beta\alpha}(-\omega)$. Com frequência arbitrária e uma matriz de espalhamento S qualquer, a Eq.(3.79) não conserva corrente e não é invariante de gauge. Portanto, para obtermos um sentido físico dessa equação, é necessário considerações adicionais próprias de cada problema analisado.

3.3.4 Ruído

Com o intuito de relacionar alguns dos vários tipos de ruído descritos na seção 3.2 com a abordagem da matriz de espalhamento, para tratar o ruído em condutores com coerência de fase, mostraremos que para certos valores dos parâmetros, a Eq.(3.79) obtêm alguns dos tipos de ruído descritos. Com exceção do ruído $1/f$.

No caso da densidade espectral do ruído com frequência nula ($eV = 0$ e $k_B T \gg \hbar\omega = 0$), obtemos a relação [11, 13]:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\alpha\beta} \equiv \mathcal{S}_{\alpha\beta}(\omega = 0) &= \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\gamma\delta} \sum_{mn} \int dE A_{\gamma\delta}^{mn}(\alpha; E, E) A_{\delta\gamma}^{nm}(\beta; E, E) \times \\ &\times [f_\gamma(E)[1 \mp f_\delta(E)] + f_\delta(E)[1 \mp f_\gamma(E)]]. \end{aligned} \quad (3.80)$$

A Eq.(3.80) conserva a corrente e é invariante de gauge. Se o condutor esta em equilíbrio térmico a temperatura T com os reservatórios, a função de distribuição em todos os reservatórios são iguais ($f(E)$). Através da relação $f(1 \mp f) = -k_B T \partial f / \partial E$ e como a matriz de espalhamento é unitária, temos: $\sum_{\gamma\delta} Tr(S_{\alpha\gamma}^\dagger S_{\alpha\delta} S_{\beta\delta}^\dagger S_{\beta\gamma}) = \delta_{\alpha\beta} N_\alpha$, onde o traço é feito sobre os índices dos canais, N_α é o número de canais abertos no reservatório α . Assim,

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta} = \frac{2e^2 k_B T}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (2N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - Tr(S_{\alpha\beta}^\dagger S_{\alpha\beta} + S_{\beta\alpha}^\dagger S_{\beta\alpha})) \quad (3.81)$$

Esse é o ruído térmico de equilíbrio (Nyquist-Johnson), cuja origem é devido as flutuações térmicas do número de ocupação dos portadores de carga entre os reservatórios. Para obtermos a forma familiar do ruído térmico, basta substituir a Eq.(3.72) na Eq.(3.81),

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta} = 2k_B T (G_{\alpha\beta} + G_{\beta\alpha}) \quad (3.82)$$

Na ausência de campo magnético aplicado, a matriz de condutância é simétrica e portanto,

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta} = 4k_B T G_{\alpha\beta} \quad (3.83)$$

a qual é a expressão obtida anteriormente Eq.(3.30) para o ruído térmico. O ruído térmico de equilíbrio não fornece nenhuma informação adicional do que aquela obtida com medidas da condução.

No limite de temperatura nula e considerando apenas um sistema fermiônico, a função de distribuição de Fermi-Dirac será uma função de Heaviside, $f_\alpha(E) = 1 - \theta(\mu_\alpha - E)$, com isso, a Eq.(3.80) pode ser escrita,

$$\mathcal{S}_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{h} \sum_{\gamma \neq \delta} \int dE Tr(S_{\alpha\gamma}^\dagger S_{\alpha\delta} S_{\beta\delta}^\dagger S_{\beta\gamma}) (f_\gamma(E)(1 - f_\delta(E)) + f_\delta(E)(1 - f_\gamma(E))) \quad (3.84)$$

No caso de um condutor com coerência de fase conectado a apenas dois reservatórios, e temperaturas e frequências nulas ($eV \gg k_B T, \hbar\omega$), o sistema esta fora do equilíbrio e o ruído associado a esse caso deve ser exclusivamente para situações de não-equilíbrio. Devido a conservação da corrente, temos $\mathcal{S} = \mathcal{S}_{LL} = \mathcal{S}_{RR} = -\mathcal{S}_{LR} = -\mathcal{S}_{RL}$. Com a Eq.(3.54) e a unitariedade da matriz de espalhamento S ($r^\dagger r + t^\dagger t = 1$), obtemos,

$$\mathcal{S} = \frac{2e^2}{h} e|V| Tr(r^\dagger r t^\dagger t) \quad (3.85)$$

onde $|V|$ é a voltagem de *bias*, a matriz de espalhamento é calculada no nível de Fermi, e o traço é a soma sobre k, l, m, n . Essa é a relação básica entre o **ruído shot quântico** e a matriz de

espalhamento, é a expressão para o ruído shot quântico como única fonte de ruído no sistema. Como a condutância, Eq.(3.67), o **ruído shot quântico** na base dos auto-canais é,

$$\mathcal{S} = \frac{2e^3|V|}{h} \sum_n \mathcal{T}_n(1 - \mathcal{T}_n) \quad (3.86)$$

onde \mathcal{T}_n e $\mathcal{R}_n = 1 - \mathcal{T}_n$ são os coeficientes de transmissão e reflexão, respectivamente. É importante enfatizar que o ruído shot quântico puro ($e|V| \neq 0$ e $k_B T = \hbar\omega = 0$) é, primeiramente, um ruído exclusivamente de sistema fora do equilíbrio (tanto o ruído shot quântico como o ruído shot clássico satisfazem essa condição); segundo, o ruído shot quântico apresenta a forma da Eq.(3.86) devido a estatística fermiônica dos portadores de corrente (para férmions, o número de ocupação de um determinado estado n é zero ou um, o que implica $n^2 = n$ e $\overline{\Delta n} = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \mathcal{T}_n(1 - \mathcal{T}_n)$), o que o diferencia do ruído shot clássico; terceiro, o ruído shot quântico não depende apenas dos coeficientes de transmissão como ocorre no caso clássico, mas sim do produto dos coeficientes de transmissão e reflexão. O caso clássico (ruído Schottky) é recuperado para condutores com baixa transmissão $\mathcal{T}_n \ll 1$ (estatística Poissoniana) em todos os canais.

$$\mathcal{S}_P = \frac{2e^3|V|}{h} \sum_n \mathcal{T} = 2e\langle I \rangle \quad (3.87)$$

Comparando a Eq.(3.86) e a Eq.(3.87), vemos que o ruído shot quântico é geralmente sub-Poissoniano [12], quando são desprezadas interações Coulombianas. A distinção entre o ruído Poissoniano e ruído shot quântico é dramática nos limites de canais completamente fechados $\mathcal{T}_n = 0$ e totalmente abertos $\mathcal{T}_n = 1$, visto que o ruído Poissoniano será nulo e máximo nesses limites, respectivamente, já a fórmula para o ruído shot quântico prediz a completa supressão do ruído quântico de não-equilíbrio em ambos os casos. Sendo que picos de ruído shot quântico ocorrerão quando $\mathcal{T}_n = 1/2$, justamente entre os plateaus de condutância na teoria de Landauer, ver Figura 3.5. É importante enfatizar que no regime clássico, $\mathcal{T}_n \ll 1$, medidas do ruído Poissoniano não acrescentam mais informações do que aquelas obtidas por medidas da condutância, medidas simultâneas do ruído e da condutância sondarão a carga dos portadores, mas sem obter nenhuma informação da dinâmica dessas cargas. No entanto, medidas de ruído shot quântico darão informações além das obtidas pela condutância no mesmo regime, pois o ruído apresenta dependência quadrática em relação aos coeficientes de transmissão, isso porque esse tipo de ruído é sensível não apenas a granularidade da carga, mas também a estatística que essas cargas obedecem, mesmo desprezando interações Coulombianas entre as cargas ainda persistirá uma correlação fundamental devido a anti-simetria da função de onda global perante a troca de duas partículas fermiônicas (princípio de exclusão de Pauli). Essa supressão do ruído shot abaixo do valor Poissoniano, dado pela Eq.(3.86), foi um dos aspectos da teoria do ruído em sistemas mesoscópicos a qual desencadeou muitos dos trabalhos teóricos e experimentais posteriores.

Uma medida entre o ruído shot quântico e o caso clássico é dado pelo fator de Fano, no caso em que os coeficientes de transmissão são independentes da energia,

$$F = \frac{\mathcal{S}_{LL}}{\mathcal{S}_P} = \frac{\sum_n \mathcal{T}_n(1 - \mathcal{T}_n)}{\sum_n \mathcal{T}_n} \quad (3.88)$$

o fator de Fano pode assumir valores entre zero (regime de ruído shot quântico dominante) e um (domínio do ruído Poissoniano). Em particular, no caso de apenas um canal, temos, $F = 1 - \mathcal{T}$.

Para alguns sistemas, o fator de Fano apresenta um valor universal: para condutores metálicos difusivos quase-1D ($L \gg l$) o fator de Fano é $1/3$; em cavidades caóticas (pontos quânticos em gases de elétrons 2D) o fator de Fano é $1/4$ [11].

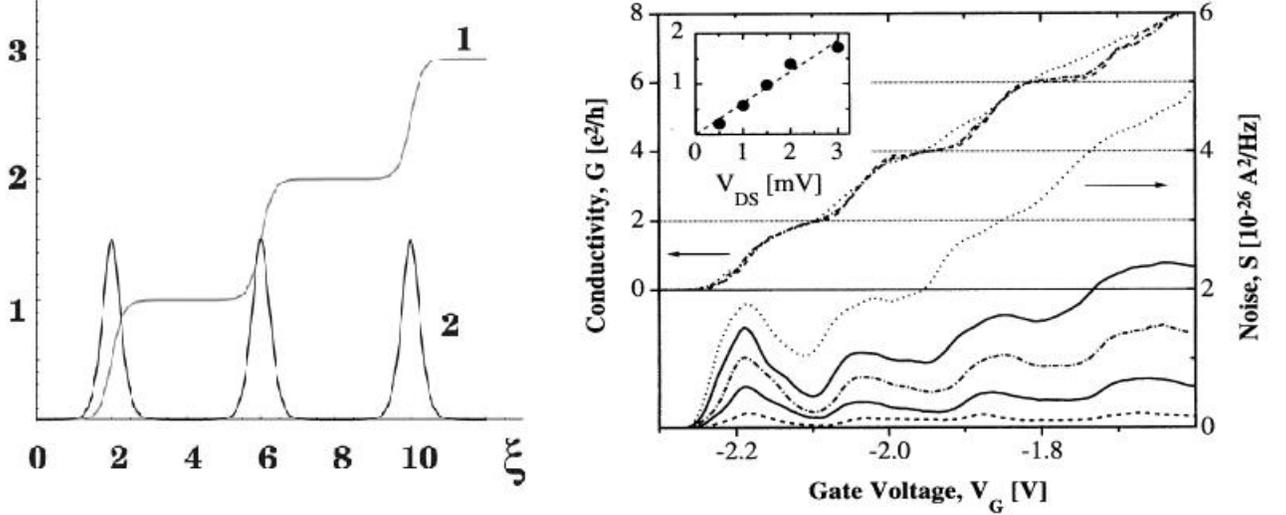


Figura 3.5: (E) Ilustração da condutância em unidades de $e^2/\pi\hbar$ (curva 1) e do ruído shot quântico em unidades de $e^3|V|/6\pi\hbar$ (curva 2) para um contato quântico pontual com $E_n = 4E_l$ em função da voltagem de gate, $\xi = (E_F - V_0)/E_l$ é uma energia adimensional. Notar os picos de ruído justamente entre os plateaus de condução e a ausência de ruído nos regimes de plateaus. (D) Medidas da condutância e do ruído em contatos quânticos pontuais formados em heteroestruturas semicondutoras GaAs/AlGaAs a $T=1,5\text{K}$ em função da voltagem de gate V_G para diversos valores de voltagem de bias, $|V_{DS}| = 0, 5; 1; 1, 5; 2; 3\text{mV}$. No detalhe, a dependência do primeiro pico (nas mesma escalas que a figura maior) em função da voltagem de bias $V_{DS} = 0, 5; 1, 5; 3\text{mV}$, a linha pontilhada é a predição teórica com a Eq.(3.86). Notar que nesse gráfico experimental existe outros tipos de ruído coexistindo com o ruído shot quântico puro e o primeiro pico é a região onde o ruído shot quântico é dominante. Ver [11, 46]

Ainda no caso quando $\omega = 0$ e apenas dois reservatórios, e há coexistência de ruído térmico e de ruído quântico de não-equilíbrio, o ruído total das flutuações da corrente será,

$$\mathcal{S}(\omega = 0, T, V) = \frac{2e^2}{h} \sum_n \int dE (\mathcal{T}_n(E) (f_L(1 \mp f_L) + f_R(1 \mp f_R)) \pm \mathcal{T}_n(E) (1 - \mathcal{T}_n(E)) (f_L - f_R)^2) \quad (3.89)$$

onde os primeiros dois termos é a contribuição da parte em equilíbrio, e o terceiro termo é devido a parte fora do equilíbrio, a qual muda de sinal devido a estatística das cargas (+/- para férmions/bósons). No caso de férmions, a parte de não-equilíbrio aumenta o ruído total em relação a parte de equilíbrio e diminui para o caso de bósons. Devido ao termo quadrático na função de distribuição, e sabendo que em altas energias as funções de distribuições quânticas se aproximam da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann, temos que em altas energia o ruído shot

é negligenciável em relação ao ruído de equilíbrio. Quando os coeficientes de transmissão são independentes da energia (de fato calculado na energia de Fermi), temos,

$$\mathcal{S}(\omega = 0, T, V) = \frac{2e^2}{h} \left(2k_B T \sum_n \mathcal{T}_n^2 + e|V| \coth \left(\frac{e|V|}{2k_B T} \right) \sum_n \mathcal{T}_n (1 - \mathcal{T}_n) \right) \quad (3.90)$$

considerando apenas férmions de agora em diante, e $|V|$ é a voltagem de bias aplicada nos dois eletrodos. Quando $k_B T \gg e|V|$, é recuperado o ruído térmico.

Como o ruído shot é sensível a carga dos portadores, ele pode ser usado para detectar portadores cujas cargas diferem do valor esperado. Uma das aplicações da Eq.(3.90) foi na investigação da carga fracionária no regime Hall quântico fracionário (FQHE) feita por De Picciotto *et al* [22], considerando um contato quântico pontual formado por uma voltagem de gate em um 2DEG de GaAs/AlGaAs a $T=1,5\text{K}$, Figura 3.6. Onde é observado que apenas considerando o ruído shot quântico é obtido o valor correto da carga fracionária. Outro exemplo é a detecção da variação da carga dos portadores de corrente em um supercondutor (pares de Cooper) [1].

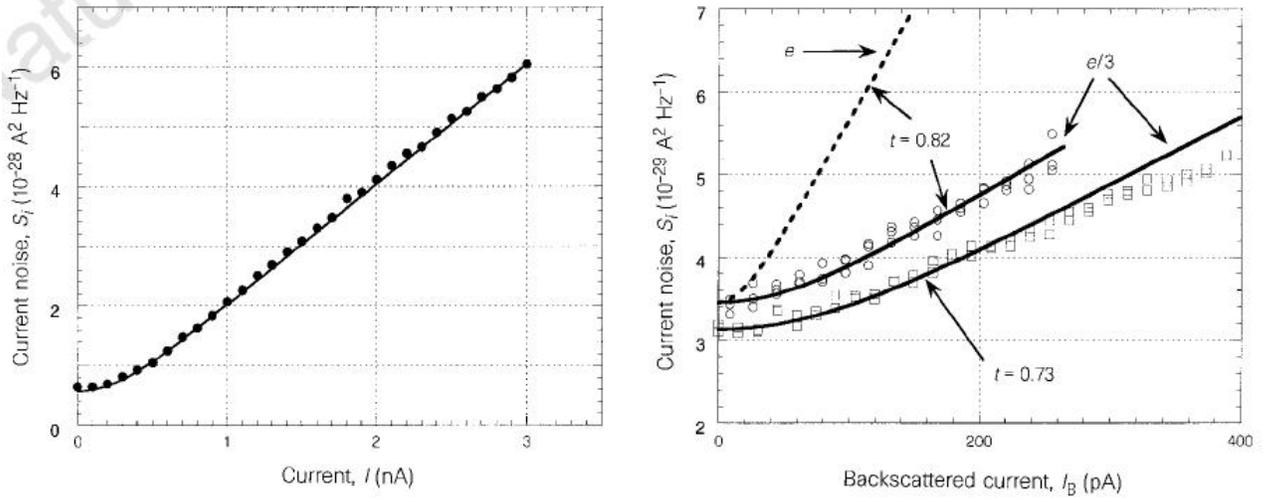


Figura 3.6: Medidas e ajuste teórico para um contato quântico pontual do ruído shot quântico em função da corrente, dado pela Eq.(3.90) nos casos: (E) sem campo magnético aplicado e $T=57\text{mK}$. A transmissão é 0,37 e a concordância é impressionante. (D) com campo magnético aplicado no regime FQHE com o fator de preenchimento $\nu = 1/3$ para dois coeficientes de transmissão diferentes. A linha sólida é a Eq.(3.90) com uma carga dos portadores $Q = e/3$. A linha pontilhada é um ajuste utilizando a relação para o ruído shot clássico com $Q = e$. Mais uma vez observamos a excelente concordância da Eq.(3.90) com o experimento. Ver [22].

Quando a frequência não é nula ($\omega \neq 0$), teremos um densidade espectral do ruído dependente da frequência². No caso de dois terminais e considerando que a matriz de espalhamento seja

²Isso não quer dizer que estamos considerando o ruído $1/f$, de alguma forma esse tipo de ruído deve ser eliminado no experimento.

independente da energia, a Eq.(3.79) nos dará:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{LL}(\omega, T, V) = & \frac{e^2}{h} \left[\sum_n \mathcal{T}_n^2 \int dE (f_{LL}(E, \omega) + f_{RR}(E, \omega)) + \right. \\ & \left. + \sum_n \mathcal{T}_n (1 - \mathcal{T}_n) \int dE (f_{LR}(E, \omega) + f_{RL}(E, \omega)) \right] \end{aligned} \quad (3.91)$$

onde $f_{\alpha\beta}(E, \omega) = f_\alpha(E)(1 - f_\beta(E + \hbar\omega)) + (1 - f_\alpha(E))f_\beta(E + \hbar\omega)$ e os canais n são degenerados. Fazendo a integração,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{LL}(\omega, T, V) = & \frac{e^2}{h} \left[2\hbar\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \sum_n \mathcal{T}_n^2 + [(\hbar\omega + eV) \coth\left(\frac{\hbar\omega + eV}{2k_B T}\right) + \right. \\ & \left. + (\hbar\omega - eV) \coth\left(\frac{\hbar\omega - eV}{2k_B T}\right)] \sum_n \mathcal{T}_n (1 - \mathcal{T}_n) \right] \end{aligned} \quad (3.92)$$

Na Eq.(3.92) há a coexistência de diversos tipos de ruído devido a frequência, temperatura e voltagem e é um resultado bastante geral, válido para coeficientes de transmissão calculados no nível de Fermi. Dela, podemos extrair os outros tipos de ruído já estudados. Quando $\omega = 0$, temos a coexistência do ruído térmico e shot Eq.(3.90). No regime de equilíbrio ($eV = 0$),

$$\mathcal{S}_{LL}(\omega, T, V = 0) = \frac{e^2 \omega}{\pi} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \sum_n \mathcal{T}_n \quad (3.93)$$

o qual é a mesma relação para o teorema da flutuação-dissipação da Eq.(3.43). Quando a temperatura é nula e $\hbar\omega > eV$, a Eq.(3.92) nos dá um ruído dependente da frequência chamado ruído quântico (flutuação quântica de vácuo), o qual é o tipo de ruído dominante na região de altas frequências,

$$\mathcal{S}_{LL}(\omega, T = V = 0) = \frac{e^2}{\pi} |\omega| \sum_n \mathcal{T}_n = 2\hbar|\omega|G \quad (3.94)$$

A coexistência do ruído quântico e do ruído shot quântico é obtida, a temperatura nula e $\hbar\omega < e|V|$,

$$\mathcal{S}_{LL}(\omega, T = 0, V) = \frac{e^2}{\pi\hbar} \left(\hbar|\omega| \sum_n \mathcal{T}_n^2 + eV \sum_n \mathcal{T}_n (1 - \mathcal{T}_n) \right) \quad (3.95)$$

o ruído quântico apresenta dependência linear com a frequência, com frequência nula é recuperado o espectro do ruído shot quântico puro, Eq.(3.86). Um *crossover* ocorre quando $\hbar\omega = \pm eV$.

3.3.5 Classificação do ruído

Pode-se classificar os vários tipos de ruídos estudados em função da frequência, como mostra a ilustração na Figura 3.7. Na qual identificamos três regimes: (1) em baixa frequência, onde o ruído $1/f$ é o dominante; (2) frequências intermediárias, onde os ruídos térmico e shot (ruídos brancos) são as fontes majoritárias; (3) alta frequência, onde o ruído quântico é o dominante.

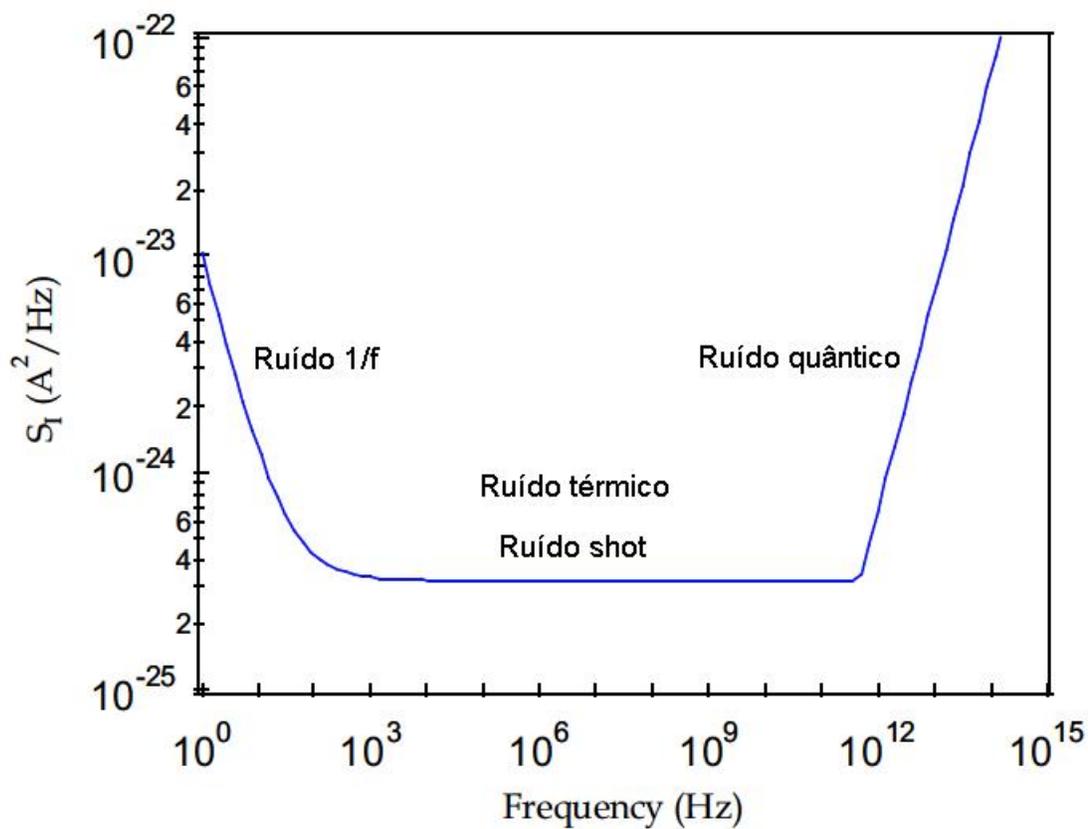


Figura 3.7: Classificação do ruído em função da frequência. Ver [6].

Capítulo 4

Nanocontatos

Neste capítulo descreveremos um modelo para representar os processos de condução eletrônica em nanofios e nanocontatos dos materiais magnéticos de transição acoplados a dois reservatórios da mesma espécie, proposto nas Refs. [23–26]. É considerado que os elétrons itinerantes pertencem aos orbitais s e os orbitais d , que estão semi-preenchidos nesses materiais, constituirão fontes de momentos magnéticos locais e são descritos por um Hamiltoniano de Ising ferromagnético, determinando a separação dos canais de condução permitidos nesse fio ou contato (interação de troca $s-d$, que será governada por um Hamiltoniano misto de Heisenberg-Ising ferromagnético com interações locais). É utilizado um Hamiltoniano tipo *tight binding* para descrever o transporte, que será diagonalizado através de aproximações permitidas pela teoria de perturbações com vetores de estado hibridizados em relação ao spin e a condutância é calculada pela formulação de Landauer-Buttiker para o transporte balístico. No caso de um nanocontato, é possível obter expressões analíticas para os coeficientes de transmissão, a condutância, o **ruído shot quântico** (o qual apresenta maior contribuição em relação aos outros tipos de ruído, visto que são considerados temperaturas e frequências identicamente nulas), o fator de Fano (que mede justamente a razão de importância do ruído shot quântico em relação aos ruídos Poissonianos) e a magnetoresistência. Todas essas quantidades são estudadas nos casos monocanal e bicanais de condução abertos, visto que os orbitais s são considerados como sendo os de condução, e para a polarização magnética paralela e anti-paralela dos eletrodos.

4.1 Motivações

Recentes experimentos tem sido divulgados na literatura sobre a fabricação de fios e contatos constituídos de poucos átomos, principalmente dos elementos Au, Al, Ag, Pb, Nb, Pd, Ni e Co [33–37, 39, 43]. As técnicas experimentais de fabricação desses sistemas são diversas, como por exemplo por eletro-deposição, que consiste em fazer pontas muito finas de um determinado metal através de uma reação eletrolítica quando esse fio metálico é colocado em contato com uma solução eletrolítica (por exemplo, de KCl ou NaCl) suspensa (por um outro metal em forma de anel) e é passado uma corrente elétrica para que o fenômeno de oxi-redução ocorra. Em seguida essas pontas são colocadas em contato com um outro fio metálico e é passado uma pequena corrente por esse sistema. Por essa técnica tem sido reportado valores de MR da ordem de 3000% [36].

Outra técnica, é utilizar a ponta de um microscópio de corrente de tunelamento (*scanning*

tunneling microscope - STM), o qual permite investigar a topografia e as propriedades eletrônicas de superfícies metálicas e semicondutoras com resolução atômica, e também é a ferramenta ideal para estudar contatos na escala atômica. Ao se encostar a ponta do STM de uma amostra condutora, haverá uma pequena mistura dos átomos da ponta e os átomos na região de contato da amostra, em seguida ao se puxar a ponta, por algum tempo existirá uma ligação de poucos átomos entre a ponta e a amostra e dessa forma têm-se um nanofio ou nanocontato, Figura 4.1.

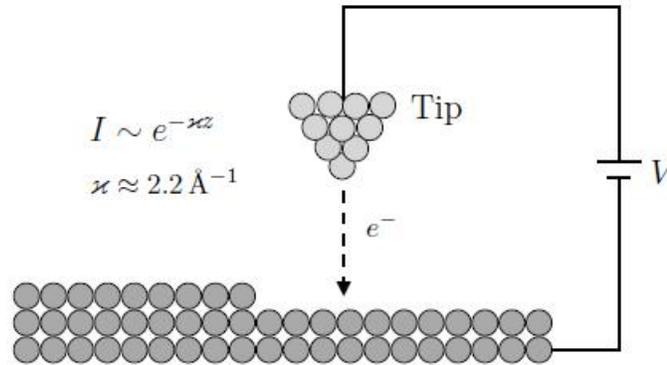


Figura 4.1: Ilustração de um STM. O STM investiga a densidade de estados de um material através de uma corrente de tunelamento, a qual flui do da ponta metálica do microscópio para a superfície. A corrente de tunelamento depende sensivelmente (exponencial) da distância da ponta à superfície; uma resolução de 0,1nm é possível. A resolução lateral é limitada pela espessura da ponta, a ponta de um bom STM é feito de apenas um único átomo, dando resolução lateral de 0,1nm.

A técnica experimental mais largamente utilizada é a *mechanically controllable break junction* (MCBJ) [33], ilustrada na Figura 4.2. Essa técnica consiste em prender um condutor parcialmente cortado no centro (com espessura da ordem de 0,1 mm) em um substrato flexível, e em seguida aplica-se uma tração (através de um material piezo-elétrico) de tal forma a esticar (afinar) o condutor na região já parcialmente cortada. Com essa técnica é possível obter fios e contatos constituídos por fileiras de poucos átomos.

Através da técnica de MCBJ, foram obtidos resultados bastante impressionantes ao permitir a construção de contatos constituídos de três, dois e até mesmo um único átomo. Como foi dito no Capítulo 2, nesse regime de baixa dimensionalidade as características ondulatórias dos elétrons são de fundamental relevância na descrição do transporte por essas nanoestruturas. O transporte eletrônico torna-se balístico, e é excelentemente descrito pela fórmula de Landauer [1–4], nessa fórmula temos que considerar o coeficiente de transmissão em cada canal aberto. Entretanto é necessário uma palavra aqui sobre quem faz o papel dos canais, visto que não temos mais efetivamente bandas e sim a estrutura eletrônica do átomo em si como mediadora para condução. A explicação mais aceita é que nessa escala, os orbitais de valências atômicos farão o papel dos canais permitidos de condução [33,35], por exemplo, nos metais de transição, os orbitais s , p e d podem potencialmente abrir $2+6+10$ canais degenerados [35]. Apesar de essa explicação não dar conta da condutância medida de e^2/h nos casos da Pd e Pt [43], nos quais já é sabido que no volume não muito limpo tais metais desenvolvem propriedades magnéticas devido a efeitos de

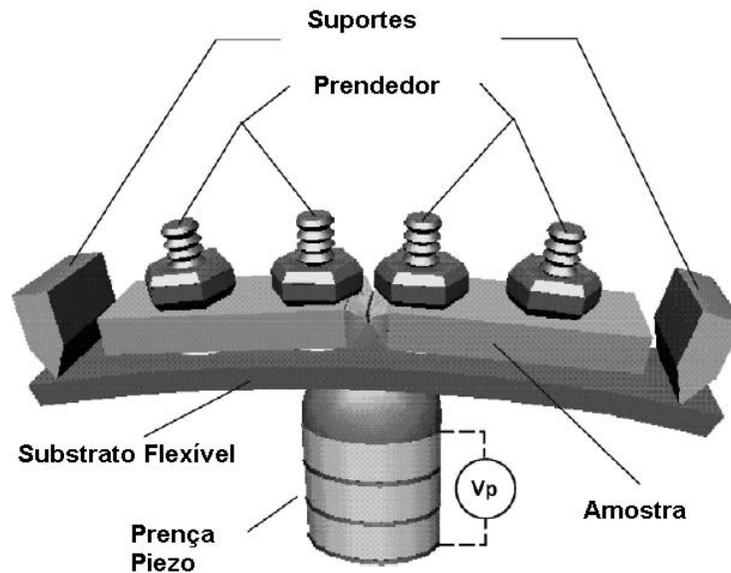


Figura 4.2: Ilustração da técnica de MCBJ.

proximidade, mas na escala atômica há uma carência de explicação.

Para fios na escala atômica, é bastante difícil obter gráficos I-V diretamente, para contornar esse problema foi criado o método de histogramas. Ao fazer medida da condutância, cada nanofio feito apresentará um conjunto de formas diferentes de ligação em termos dos seus eixos cristalográficos, dessa forma, não se pode dizer que medidas feitas numa mesma amostra resultam em valores idênticos, mas sim em um conjunto de dados que devem ser tratados estatisticamente. Esse tratamento culmina na elaboração de histogramas, Figura 4.3, que medem qual o valor da condutância as milhares de medidas feitas em uma amostra apresentam em média.

Nesta dissertação, os nanofios e nanocontatos são imaginados formados mecanicamente (estiramento de um fio comercial) mostrado em Figura 4.4 [39]. Através de um microposicionador para fazer o contato entre dois eletrodos de Ni com 2mm de diâmetro e extremidades adequadamente arredondadas e polidas. Para minimizar os efeitos térmicos e magnetoestrictivos, e aumentar a rigidez mecânica, os eletrodos de Ni são colocados em um orifício perfurado através de um bloco de teflon. Mesmo assim, a estabilidade mecânica ainda é um problema persistente para os experimentais. O problema da temperatura não é significativo, pois a quantização da condutância pode ser observado a temperatura ambiente [1, 34]. Nas espiras que envolvem o eletrodo do lado esquerdo é aplicado uma corrente DC com o intuito de gerar um campo magnético H_{esp}^L , e simultaneamente, é aplicado uma corrente AC nas espiras do lado direito que gera um campo magnético H_{esp}^R . Com esses campos magnéticos gerados pelas espiras, é possível polarizar ligeiramente (visto que os campos internos são muitos maiores que esses campos externos aplicados [5]) os eletrodos volumétricos ferromagnéticos de ambos os lados nas configurações paralelas, $H_{esp}^L = H_{esp}^R = H_{esp}$, e anti-paralela, $H_{esp}^L = -H_{esp}^R = H_{esp}$. Tipicamente, é encontrado na literatura campos magnéticos aplicados H_{esp} entre $100Oe$ e $120Oe$ [39].

Estudar as propriedades de transporte em fios e contatos constituídos por cadeias atômicas interligadas dos metais magnéticos de transição tem atraído bastante atenção, devido as suas potenciais aplicações para dispositivos spintrônicos e mesmo para a tecnologia atual, pela sua alta

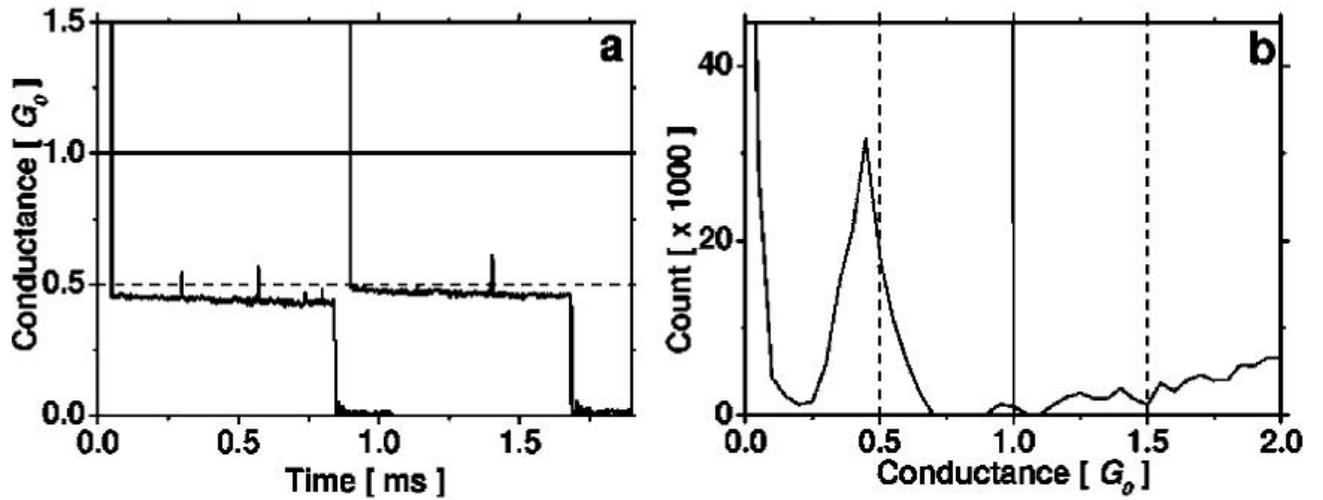


Figura 4.3: Medidas da condutância de um nanofio de Co em ultra-alto vácuo pela técnica de MCBJ, a temperatura ambiente e sem campo magnético externo aplicado, onde: (a) curvas do transporte eletrônico mostrando os plateaus de condutância; (b) histograma exibindo o comportamento estatístico da condutância de uma seqüência de nanofios gerados. É importante notar que os plateaus em (a) coincidem com o primeiro pico de e^2/h em (b). Dados devido a Rodrigues *et. al.* [43].

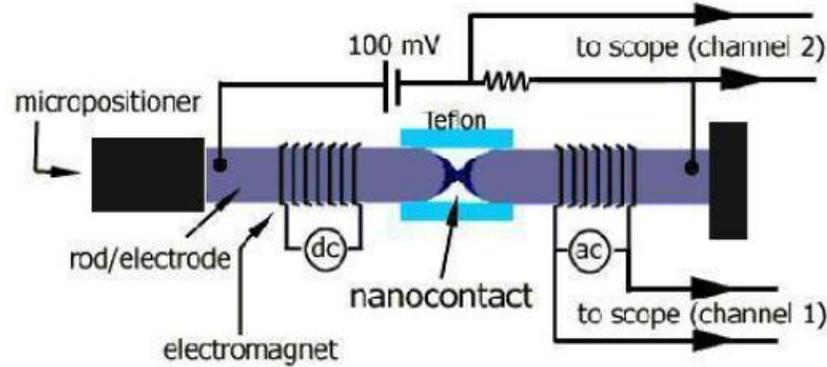


Figura 4.4: Ilustração do aparato experimental.

magneto-resistência reportado na literatura [34, 36]. Pelo caráter magnético desses materiais, a degenerescência de spin do quantum de condutância é levantada, isto é, temos múltiplos inteiros de $N \times e^2/h$, no caso de N canais não degenerados completamente transparentes. Neste Capítulo, será descrito um modelo de nanofio definido [23, 24] por uma cadeia linear de átomos magnéticos acoplados pelos extremos do fio, a dois reservatórios (do mesmo material do fio) de elétrons polarizados magneticamente por campos magnéticos aplicados externamente (gerados pelas espiras). Tais elementos apresentam orbitais d semi-preenchidos, e é considerado que os elétrons de condução são somente aqueles do tipo s e os orbitais d são fontes de momentos magnéticos locais que interagem com os elétrons de condução somente por interação de troca, e dessa forma, separam

os canais de condução pertencentes aos orbitais s . Experimentalmente [33, 35], tais sistemas tem sido construídos e medidas de condutância de e^2/h , mesmo a temperatura ambiente, sem campo magnético externo aplicado e feitas no ar [43] confirmam esse valor. Além da condutância, é obtido o ruído shot quântico no caso de nanocontatos constituídos de dois átomos, considerando temperaturas e frequências nulas. Esse tipo de ruído é o mais interessante para se estudar a dinâmica temporal dos elétrons, visto que ele é uma consequência da discretização da carga dos portadores de corrente e esta associado a estatística fermiônica (Princípio de Exclusão de Pauli) [12, 19].

4.2 Modelo teórico

Uma ilustração dos nanofios formados por estiramento de um condutor volumétrico podem ser visto nas Figuras 4.4-4.5. Desprezando os efeitos de geometria estrutural do fio (o que, de forma efetiva, ainda pode ser incorporado no modelo como um efeito de diminuição do overlap das funções de onda dos orbitais de condução), que é considerado linear. Estamos interessados em fios dos metais magnéticos de transição, como foi discutido na secção anterior, é considerado que os elétrons de condução são devido apenas aqueles dos orbitais s , o qual apresenta apenas dois canais de spin de transmissão próximos ao nível de Fermi. Os spins dos elétrons dos orbitais s serão representados por $\vec{\sigma}$. Já os orbitais d , serão fontes de momentos magnéticos locais \vec{S}_i que atuam sobre os elétrons itinerantes dos orbitais s via uma interação de troca do tipo ferromagnética $s-d$, a localidade da interação é garantida por uma função delta de Dirac $\delta(\cdot)$. Essa dinâmica é dada pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{sd} = - \sum_i J_{sd}(i) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (4.1)$$

A interação entre os spins dos orbitais d , é mapeada por um Hamiltoniano ferromagnético ($J > 0$) tipo Ising com campo transversal H_t [38]:

$$\mathcal{H}_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g(H_1^z S_1^z + H_N^z S_N^z) - gH_t \sum_{i=1}^N S_i^x \quad (4.2)$$

A interação entre o primeiro e o último átomo do fio com os eletrodos é dado através dos acoplamentos longitudinais H_1^z e H_N^z , definindo o eixo z ao longo do fio como a direção de condução. Introduzimos flutuações quânticas por meio do “campo” transversal H_t , este campo assegura o regime quântico do sistema, pois as componentes do operador de spin S_i^z e S_i^x não comutam [38] e o princípio de incerteza de Heisenberg permite flutuações desse spin. É interessante notar que o campo transversal H_t é uma forma efetiva de considerar as interações entre as componentes transversas do spin de cada sítio na região do nanofio. Controlando os acoplamentos longitudinais nos eletrodos, pode-se alterar levemente os estados de polarização dos reservatórios ferromagnéticos, na configuração paralela (P) $H_1 = H_N$, e para o alinhamento anti-paralelo (AP) dos mesmos, $H_1 = -H_N$, surgirá uma parede de domínio quântica na região central do fio, cuja localização irá depender da importância em relação as flutuações quânticas induzidas por H_t . O efeito dos acoplamentos longitudinais sobre as componentes de spins das funções de onda eletrônicas, que transitarão entre os reservatórios através do fio, será criar estados de spin $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. Já o campo transversal é o responsável pela mistura desses estados de spin ($|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$) na região da parede de

domínio quântica, e permitirá a ocorrência de magnetoresistência finita (quando $H_t = 0$, temos que a Eq.(4.2) será puramente do tipo Ising, o qual apresentaria MR infinita). É importante ressaltar que os acoplamentos longitudinais e o campo transversal são campos internos ao material ferromagnético do qual é constituído o fio, que por sua vez são ordens de grandeza maiores que os campos magnéticos gerados pelas espiras. O campo magnético das espiras são introduzido para dar uma pequena polarização aos eletrodos ferromagnéticos, e assim permitir que os acoplamentos longitudinais sejam configurados nas polarizações paralela e anti-paralela. Ou seja, $H_{esp}^L \neq H_1^z$ e $H_{esp}^R \neq H_N^z$. O acoplamento Zeeman entre os campos magnéticos das espiras e os momentos de dipolos magnéticos dos sítios do fio é negligenciada. Nessas escalas de comprimentos, o regime é balístico e a formulação de Landauer é a que melhor descreve os processos de condução. Tomando as medidas da condução como feitas nos dois reservatórios ferromagnéticos.

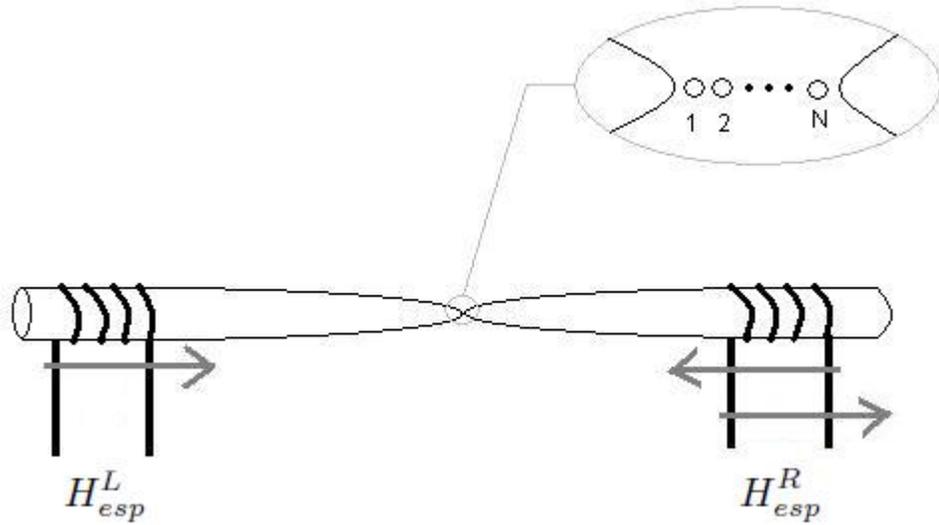


Figura 4.5: Ilustração do nanofio ferromagnético entre dois reservatórios R_L e R_R da mesma espécie.

A descrição do transporte dos elétrons itinerantes ao longo do fio é dada pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_e = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathcal{H}_{sd} \quad (4.3)$$

onde $\mathbf{p}^2/2m$ é o termo de energia cinética e \mathcal{H}_{sd} , Eq.(4.1), é o termo de troca magnético entre os elétrons de condução (orbitais s) e os elétrons localizados (orbitais d). Os termos de acoplamento Zeeman e interações spin-órbita são negligenciados, como é feito usualmente. É mais conveniente tratarmos o Hamiltoniano de transporte em termos do método de Segunda Quantização, através dos operadores de campo de destruição e criação fermiônica, $\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i\sigma} \phi_i(\mathbf{x})\chi_\sigma c_{i\sigma}$ e $\Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{i\sigma} \phi_i^*(\mathbf{x})\chi_\sigma^\dagger c_{i\sigma}^\dagger$, respectivamente, onde ϕ_i são funções de orbitais centradas no i -ésimo sítio do nanofio, χ é o spinor de Pauli ¹ e $c_{i\sigma}$ é o operador fermiônico de destruição. Há apenas um orbital s por sítio. Com,

¹ $\chi_\sigma^\dagger \sigma_z \chi_{\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'}$; $\chi_\sigma^\dagger \sigma_+ \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow}$; $\chi_\sigma^\dagger \sigma_- \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow}$

$$\mathcal{H} = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \mathcal{H}_e \Psi(\mathbf{x}) \quad (4.4)$$

Portanto o Hamiltoniano de transporte expresso em termos dos operadores fermiônicos será:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{ij} \left[\Lambda_{ij}^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + \Lambda_{ij}^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + \Lambda_{ij}^z (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \right] \quad (4.5)$$

com as definições,

$$t_{ij} = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \phi_i^*(\mathbf{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \phi_j(\mathbf{x}) \quad (4.6)$$

como o parâmetro de *hopping* canônico, e

$$\Lambda_{ij}^+ = - \sum_{k=1}^N J_{sd}(k) \phi_i^*(\mathbf{x}_k) \phi_j(\mathbf{x}_k) \langle S_k^+ \rangle \quad (4.7)$$

e

$$\Lambda_{ij}^- = - \sum_{k=1}^N J_{sd}(k) \phi_i^*(\mathbf{x}_k) \phi_j(\mathbf{x}_k) \langle S_k^- \rangle \quad (4.8)$$

são termos de transferência com precessão de spin induzido pela interação de troca $s-d$ transversa, e

$$\Lambda_{ij}^z = - \sum_{k=1}^N J_{sd}(k) \phi_i^*(\mathbf{x}_k) \phi_j(\mathbf{x}_k) \langle S_k^z \rangle \quad (4.9)$$

é a componente longitudinal da interação de troca $s-d$, sem inversão de spin. Na obtenção das Eqs.(4.7)-(4.9) foi feita a substituição dos operadores de spins locais S_k^α , com $\alpha = (+, -, z)$, por seu valores médios sobre os auto-vetores de estado do Hamiltoniano \mathcal{H}_M , Eq.(4.2), i.e. $\langle S_k^\alpha \rangle$ ². A partir do conhecimento dessas distribuições ($\langle S_k^\alpha \rangle$), as quais dependem fortemente das condições de contorno impostas sobre a Eq.(4.2), pode-se obter as propriedades de transporte através da Eq.(4.5).

É importante notar que a Eq.(4.5) é bastante completa, pois nela temos a interação magnética entre o elétron de condução em cada sítio com todos os demais elétrons localizados no fio. O problema da diagonalização da Eq.(4.5) é tratado através da teoria de perturbação de segunda ordem independente do tempo [27,28], começando por separarmos a Eq.(4.5) em duas partes:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I \quad (4.10)$$

com o qual definimos um Hamiltoniano não perturbado \mathcal{H}_0 , que possui apenas termos locais,

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_i \left[\Lambda_{ii}^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + \Lambda_{ii}^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + \Lambda_{ii}^z (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) \right] \quad (4.11)$$

onde $\epsilon_i \equiv t_{ii}$, pode-se ver que a escolha não foi arbitrária, pois Eq.(4.11) já é diagonal nos índices de sítio, ficando somente o problema da diagonalização em relação aos índices de spin. Para

²É importante ressaltar que essa não é uma média estatística sobre um *ensemble* canônico [29,30], mas uma média quântica sobre os auto-vetores de estado do sistema. Os quais serão obtidos neste capítulo.

escrevermos a parte perturbada, é considerado que a superposição entre as funções de onda dos elétrons itinerantes se dá apenas entre os primeiros vizinhos, i.e. $j = i \pm 1$. Portanto temos o Hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_I :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I = & \sum_{i\sigma} t_{i,i+1} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \\ & + \sum_i \left[\Lambda_{i,i+1}^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} + \Lambda_{i,i+1}^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow} + \Lambda_{i,i+1}^z \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow} \right) \right] + h.c. \end{aligned} \quad (4.12)$$

na Eq.(4.12), o primeiro termo é o hopping canônico do modelo *Tight-binding* [1], os termos $\Lambda_{i,i+1}^\pm$ dizem respeito a interação de troca entre os orbitais s e d , e são responsáveis por um hopping com inversão de spin. O termo com $\Lambda_{i,i+1}^z$ é referente a um hopping que depende do spin, mas sem inversão de spin. Algumas simplificações nas funções de onda do Hamiltoniano \mathcal{H} são necessárias, a fim de obtermos os coeficientes Λ :

(i) As funções de onda de cada sítio são todas equivalentes, diferindo apenas por uma translação ao longo do fio;

(ii) A superposição entre as funções de onda de cada sítio somente se dará entre sítios adjacentes, como já foi feito ao substituírmos $j = i \pm 1$.

Denotando $\phi_i(\mathbf{x}_i)$ como a amplitude da função de onda do i -ésimo sítio, centrada no i -ésimo orbital, a amplitude dessa mesma função de onda nos sítios adjacentes $\mathbf{x}_{i\pm 1}$ é atenuada pelo fator η , onde $|\eta| < 1$. Esse fator η pode assumir um valor complexo, em geral, entretanto ele é tomado como sendo um número real,

$$\phi_i(\mathbf{x}_{i+1}) = \phi_i(\mathbf{x}_{i-1}) \approx \eta \phi_i(\mathbf{x}_i). \quad (4.13)$$

A superposição entre vizinhos mais distantes é negligenciada,

$$\phi_i(\mathbf{x}_k) \phi_{i+1}(\mathbf{x}_k) \approx 0$$

onde $\mathbf{x}_k \neq \mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_k \neq \mathbf{x}_{i+1}$. O máximo da distribuição de probabilidade da amplitude de cada função de onda é independente do índice de sítio, i.e. $|\phi_i(\mathbf{x}_i)|^2 \equiv |\phi|^2$. Fazendo a integral de troca J_{sd} uniforme ao longo do fio, podemos definir um acoplamento que não depende do sítio,

$$K = J_{sd} |\phi|^2. \quad (4.14)$$

Assim obtemos,

$$\Lambda_{ii}^\mu = -K [\langle S_i^\mu \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^\mu \rangle + \langle S_{i+1}^\mu \rangle)] \quad (4.15)$$

$$\Lambda_{i,i+1}^\mu = -K \eta (\langle S_i^\mu \rangle + \langle S_{i+1}^\mu \rangle) \quad (4.16)$$

onde $\mu = (+, -, z)$. Como $S_j^\pm = S_j^x \pm i S_j^y$, temos $\langle S_j^+ \rangle = \langle S_j^- \rangle = \langle S_j^x \rangle$ são números reais, pois por simetria $\langle S_j^y \rangle = 0$ para os auto-vetores da Eq.(4.2). O que permite definir as seguintes quantidades:

$$\alpha_i = \langle S_i^+ \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^+ \rangle + \langle S_{i+1}^+ \rangle) = \langle S_i^- \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^- \rangle + \langle S_{i+1}^- \rangle) \quad (4.17)$$

$$\beta_i = \langle S_i^z \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^z \rangle + \langle S_{i+1}^z \rangle) \quad (4.18)$$

$$\gamma_{i,i+1} = \langle S_i^z \rangle + \langle S_{i+1}^z \rangle \quad (4.19)$$

$$\Gamma_{i,i+1} = \langle S_i^+ \rangle + \langle S_{i+1}^+ \rangle = \langle S_i^- \rangle + \langle S_{i+1}^- \rangle \quad (4.20)$$

Com as Eqs.(4.17)-(4.20), obtemos \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_I como segue:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - K \sum_i [\alpha_i (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}) + \beta_i (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow})] \\ &= \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \sigma K \beta_i) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - K \sum_i \alpha_i (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}) \end{aligned} \quad (4.21)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I &= \sum_{i\sigma} t_{i,i+1} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} - \eta K \sum_i [\Gamma_{i,i+1} (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow}) + \\ &\quad + \gamma_{i,i+1} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow})] + h.c. \\ &= \sum_{i\sigma} t_{i,i+1}^\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} - \eta K \sum_i [\Gamma_{i,i+1} (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow})] + h.c. \end{aligned} \quad (4.22)$$

com o parâmetro de hopping dependente do spin $t_{i,i+1}^\sigma$ dado por,

$$t_{i,i+1}^\sigma = t_{i,i+1} - \sigma \eta K \gamma_{i,i+1} \quad (4.23)$$

com $\sigma = \pm$.

O Hamiltoniano \mathcal{H}_0 , Eq.(4.21), é diagonal nos índices de sítios, mas não nos índices de spins. Podemos obter a diagonalização de \mathcal{H}_0 através de funções de onda de orbitais hibridizados de spin:

$$|\Psi_{i,-}\rangle = \cos \theta_i |i \uparrow\rangle + \sin \theta_i |i \downarrow\rangle \quad (4.24)$$

$$|\Psi_{i,+}\rangle = \sin \theta_i |i \uparrow\rangle - \cos \theta_i |i \downarrow\rangle \quad (4.25)$$

com auto-valores de energia,

$$E_{i,-} = \epsilon_i - K \Delta_i \quad (4.26)$$

$$E_{i,+} = \epsilon_i + K \Delta_i \quad (4.27)$$

respectivamente, onde $\Delta_i = \sqrt{\alpha_i^2 + \beta_i^2}$. A separação entre os dois canais de condução $E_{i,\mp}$ é devido a interação de troca $s-d$, os quais estão localizados próximos ao nível de Fermi se a energia ϵ_i for aproximada do valor de volume. O ângulo θ_i é dado pela relação:

$$\tan \theta_i = \frac{\alpha_i}{\beta_i + \Delta_i} = \frac{\Delta_i - \beta_i}{\alpha_i}. \quad (4.28)$$

Para um nanofio bastante curto, em decorrência do efeito da repulsão eletrônica e do tempo muito pequeno dispendido pelos elétrons de condução para atravessar esse curto nanofio, é óbvio que o processo de hopping de um único elétron contribuirá para a corrente. Com o intuito de aplicar o modelo descrito, na seção seguinte considera-se o caso mais simples, mas em absoluto não trivial e nem simplório, de uma nanofio constituído de apenas dois átomos (um nanocontato) em baixas voltagens e temperatura nula.

4.3 Aplicação: contato constituído de dois átomos

Na seção anterior, foi descrito o modelo de um nanofio ferromagnético conectado a dois reservatórios ferromagnéticos (R_L e R_R). Nesta seção, aplica-se o modelo descrito para o caso de um nanocontato³, caracterizado por **dois átomos** dos metais magnéticos de transição acoplados a dois reservatórios da mesma espécie, polarizados magneticamente, ver Figura 4.6. Quando o nível de Fermi está sobre ou pouco acima do auto-valor de energia do estado fundamental no nanocontato, Eq.(4.26), estamos no regime de baixas temperaturas e baixas voltagens, já que a energia de troca pode ser estimada entre $2\hbar J_{sd} \approx 0,1 - 0,5eV$. Para elevarmos o nível de Fermi, e assim ativarmos o auto-valor de energia do estado excitado, Eq.(4.27), podemos considerar um pequeno aumento proporcional a $2K\Delta$ do potencial eletro-químico entre os eletrodos.

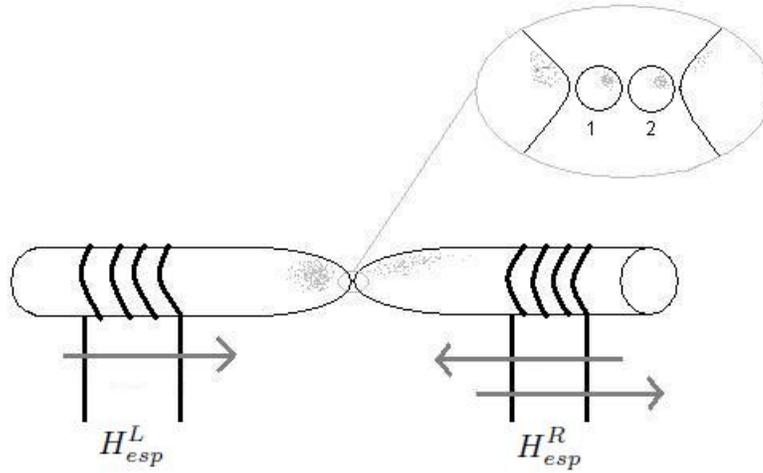


Figura 4.6: Ilustração do nanocontato constituído de dois átomos.

Dentro das aproximações da teoria de perturbação, por meio da Regra de Ouro de Fermi, a probabilidade $|\langle \Psi_{i+1,\sigma'} | \mathcal{H}_I | \Psi_{i,\sigma} \rangle|^2$ de um elétron saltar do sítio i com spin σ para o sítio $i+1$ com spin σ' é diretamente proporcional a transmissão ao longo do nanofio/contato. A condutância para a configuração de dois terminais é encontrada através da famosa Fórmula de Landauer [1–4]. A teoria de Landauer diz que a condutância é proporcional a soma dos coeficientes de transmissão de cada canal de condução aberto no nanocontato:

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_n \tau_n, \quad (4.29)$$

onde τ_n é o coeficiente de transmissão do n -ésimo canal não degenerado de spin, próximo ao nível de Fermi. Os cálculos dos coeficientes de transmissão são feitos através do Hamiltoniano de transferência \mathcal{H}_I , Eq.(4.22), para dois sítios. O coeficiente de transmissão será proporcional a probabilidade de transição $|\langle \Psi_{2\mp} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1\mp} \rangle|^2$ do elétron pular do primeiro sítio para o segundo, a condução é tomada no sentido da esquerda para a direita devido ao potencial, mantendo-se no mesmo canal. As transições cruzadas, $\langle \Psi_{2-} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1+} \rangle$ e $\langle \Psi_{2+} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-} \rangle$, são proibidas, a menos que

³O termo “contato atômico pontual”, também é encontrado na literatura.

processos inelásticos sejam considerados. A probabilidade de transição deve ser normalizada pela integral de hopping do volume t_0 , que corresponde aos eletrodos, com o hopping no contato menor que o hopping no volume. Portanto, os coeficientes de transmissão para cada canal e estado de polarização magnética dos eletrodos são escritos:

$$\mathcal{T}_-^C \equiv \frac{|\langle \Psi_{2-}^C | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-}^C \rangle|^2}{|t_0|^2}, \quad (4.30)$$

$$\mathcal{T}_+^C \equiv \frac{|\langle \Psi_{2+}^C | \mathcal{H}_I | \Psi_{1+}^C \rangle|^2}{|t_0|^2}, \quad (4.31)$$

onde $C = P, AP$, ver Figura 4.7.

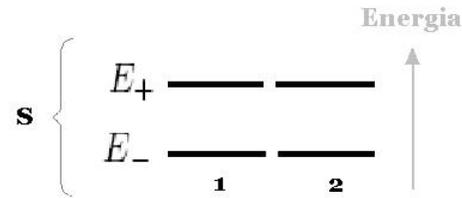


Figura 4.7: Ilustração dos canais de condução no nanocontato.

Com dois átomos constituindo o nanocontato ($N = 2$), o Hamiltoniano magnético \mathcal{H}_M , Eq.(4.2), pode ser diagonalizado ao escolhermos as bases do operador S_i^z , dadas por $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$, com a notação *spin do átomo 1, spin do átomo 2*.

Na configuração **paralela** dos acoplamentos longitudinais, ($H_1 = H_2 = H$), e considerando o campo transversal H_t apenas como uma perturbação pequena em relação a H (no regime de forte anisotropia), intuitivamente é óbvio que o estado dominante seja $|\uparrow\uparrow\rangle$. Por outro lado, o auto-vetor de estado $|\downarrow\downarrow\rangle$ dará uma contribuição pequena (de segunda ordem na expansão perturbativa) para a distribuição de spins do nanocontato nessa configuração. Devido a simetria, o auto-vetor que descreve o sistema, no estado fundamental, pode ser escrito como:

$$|P\rangle = A|\uparrow\uparrow\rangle + B(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + C|\downarrow\downarrow\rangle. \quad (4.32)$$

Na configuração **anti-paralela** dos acoplamentos longitudinais, $H_1 = -H_2 = H$, o auto-vetor $|\uparrow\downarrow\rangle$ será o dominante e o auto-vetor $|\downarrow\uparrow\rangle$ dará pequenas contribuições. Assim, mais uma vez pela simetria do problema, temos:

$$|AP\rangle = \bar{A}|\uparrow\downarrow\rangle + \bar{B}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) + \bar{C}|\downarrow\uparrow\rangle. \quad (4.33)$$

Os valores médios dos operadores de spins, nas configurações P e AP serão:

$$\langle S_1^+ \rangle_P = \langle S_2^+ \rangle_P = \langle S_1^- \rangle_P = \langle S_2^- \rangle_P = \hbar B(A + C), \quad (4.34)$$

$$\langle S_1^z \rangle_P = \langle S_2^z \rangle_P = \frac{\hbar}{2}(A^2 - C^2), \quad (4.35)$$

$$\langle S_1^+ \rangle_{AP} = \langle S_2^+ \rangle_{AP} = \langle S_1^- \rangle_{AP} = \langle S_2^- \rangle_{AP} = \hbar \bar{B}(\bar{A} + \bar{C}), \quad (4.36)$$

$$\langle S_1^z \rangle_{AP} = -\langle S_2^z \rangle_{AP} = \frac{\hbar}{2}(\bar{A}^2 - \bar{C}^2). \quad (4.37)$$

onde utilizamos a notação $\langle S \rangle_P = \langle P|S|P \rangle$. Conhecendo os valores médios de spins, podemos determinar os parâmetros α , β , γ e Γ nas relações Eqs.(4.17)-(4.20) em ambas as configurações.

Para se obter $A(\bar{A})$, $B(\bar{B})$ e $C(\bar{C})$, a partir de \mathcal{H}_M , Eq.(4.2), utiliza-se a teoria de perturbação de segunda ordem não degenerada, a qual é bastante apropriada na obtenção de aproximações analíticas. Primeiramente, pode-se reescrever \mathcal{H}_M em termos dos operadores de Pauli, para ambas as configurações P e AP :

$$\mathcal{H}_M^P = -\frac{\hbar^2 J}{4} \left[\sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{\mu}{2}(\sigma_1^z + \sigma_2^z) + \frac{\lambda}{2}(\sigma_1^x + \sigma_2^x) \right], \quad (4.38)$$

$$\mathcal{H}_M^{AP} = -\frac{\hbar^2 J}{4} \left[\sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{\mu}{2}(\sigma_1^z - \sigma_2^z) + \frac{\lambda}{2}(\sigma_1^x + \sigma_2^x) \right], \quad (4.39)$$

onde definimos,

$$\mu \equiv \frac{4gH}{\hbar J}, \quad (4.40)$$

$$\lambda \equiv \frac{4gH_t}{\hbar J}. \quad (4.41)$$

Considerando os termos não diagonais nas Eqs.(4.38) e (4.39) como pequenos campos perturbativos, isto é, $\lambda/2 < 1$. Portanto, podemos obter os coeficientes das Eqs.(4.32) e (4.33) até segunda ordem, e dessa forma os estados:

$$|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + 2\left(\frac{\lambda}{2\mu+4}\right)^2}} \left[|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{\lambda}{2\mu+4}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + \frac{\lambda^2}{4\mu(\mu+2)}|\downarrow\downarrow\rangle \right] \quad (4.42)$$

$$|AP\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + 2\left(\frac{\lambda}{2\mu-4}\right)^2}} \left[|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\lambda}{2\mu-4}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) + \frac{\lambda^2}{4\mu(\mu-2)}|\downarrow\uparrow\rangle \right] \quad (4.43)$$

Os estados são renormalizados dentro da aproximação de segunda ordem em λ [27]. Uma singularidade ocorre em $\mu = \pm 2$, neste caso deve-se aplicar a teoria de perturbações degenerada e as relações (4.42) e (4.43) não são mais válidas. Como essa singularidade é um caso específico do problema de dois átomos, e não representa perigo à teoria geral, tal singularidade será evitada. Com base física podemos tomar, seguramente, $|\mu| > 2$ e $|\lambda| < 1$, na Eq.(4.38) e Eq.(4.39).

Com as Eqs.(4.42)-(4.43), têm-se os parâmetros α , β , γ e Γ das Eqs.(4.17)-(4.20), conforme o prometido, para uma contato constituído de dois átomos em ambas as configurações de polarização dos eletrodos.

No caso P ,

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha = \hbar B(A + C)(1 + \eta^2) = \frac{\hbar \lambda (1 + \eta^2)}{(2\mu + 4) \left[1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu + 4} \right)^2 \right]} \left[1 + \frac{\lambda^2}{4\mu(\mu + 2)} \right] \quad (4.44)$$

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta = \frac{1 + \eta^2}{2} \hbar(A^2 - C^2) = \frac{\hbar(1 + \eta^2)}{2 \left[1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu+4} \right)^2 \right]} \left[1 - \left(\frac{\lambda^2}{4\mu(\mu+2)} \right)^2 \right] \quad (4.45)$$

$$\gamma_{12} = \gamma = \hbar(A^2 - C^2) = \frac{\hbar}{1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu+4} \right)^2} \left[1 - \left(\frac{\lambda^2}{4\mu(\mu+2)} \right)^2 \right] \quad (4.46)$$

$$\Gamma_{12} = \Gamma = 2\hbar B(A - C) = \frac{2\hbar\lambda}{(2\mu+4) \left[1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu+4} \right)^2 \right]} \left[1 - \frac{\lambda^2}{4\mu(\mu+2)} \right] \quad (4.47)$$

No caso AP ,

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \bar{\alpha} = \hbar\bar{B}(\bar{A} + \bar{C})(1 + \eta^2) = \frac{\hbar\lambda(1 + \eta^2)}{(2\mu-4) \left[1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu-4} \right)^2 \right]} \left[1 + \frac{\lambda^2}{4\mu(\mu-2)} \right] \quad (4.48)$$

$$\beta_1 = -\beta_2 = \bar{\beta} = \frac{1 - \eta^2}{2} \hbar(\bar{A}^2 - \bar{C}^2) = \frac{\hbar(1 - \eta^2)}{2 \left[1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu-4} \right)^2 \right]} \left[1 - \left(\frac{\lambda^2}{4\mu(\mu-2)} \right)^2 \right] \quad (4.49)$$

$$\gamma_{12} = \bar{\gamma} = 0 \quad (4.50)$$

$$\Gamma_{12} = \bar{\Gamma} = 2\hbar\bar{B}(\bar{A} - \bar{C}) = \frac{2\hbar\lambda}{(2\mu-4) \left[1 + 2 \left(\frac{\lambda}{2\mu-4} \right)^2 \right]} \left[1 - \frac{\lambda^2}{4\mu(\mu-2)} \right] \quad (4.51)$$

Explicitando o estado de mais baixa energia Eq.(4.24) e o estado excitado Eq.(4.25) de \mathcal{H}_0 para a polarização paralela dos eletrodos, obtemos:

$$|\Psi_{1-}^P\rangle = \cos\theta_P|1\uparrow\rangle + \sin\theta_P|1\downarrow\rangle, \quad (4.52)$$

$$|\Psi_{2-}^P\rangle = \cos\theta_P|2\uparrow\rangle + \sin\theta_P|2\downarrow\rangle, \quad (4.53)$$

e

$$|\Psi_{1+}^P\rangle = \sin\theta_P|1\uparrow\rangle - \cos\theta_P|1\downarrow\rangle \quad (4.54)$$

$$|\Psi_{2+}^P\rangle = \sin\theta_P|2\uparrow\rangle - \cos\theta_P|2\downarrow\rangle \quad (4.55)$$

onde $\theta_1^P = \theta_2^P = \theta_P$ é dado pela Eq.(4.28)⁴. Utilizando Eq.(4.6) e Eq.(4.13) para dois sítios, o hopping aproximado será,

$$t_{12} = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \phi_1^*(\mathbf{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \phi_2(\mathbf{x}) = \eta t_{11} = \eta \epsilon_1 = \eta \epsilon$$

4

$$\theta_P = \arctan \left[\frac{\alpha}{\beta + \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \right]$$

Dessa forma, pode-se obter os coeficientes de transmissão, Eqs.(4.30)-(4.31), para configuração P :

$$\mathcal{T}_-^P = \frac{1}{|t_0|^2} |\eta\epsilon - \eta K [\Gamma \sin 2\theta_P + \gamma \cos 2\theta_P]|^2, \quad (4.56)$$

$$\mathcal{T}_+^P = \frac{1}{|t_0|^2} |\eta\epsilon + \eta K [\Gamma \sin 2\theta_P + \gamma \cos 2\theta_P]|^2. \quad (4.57)$$

Da mesma forma, os estados de mais baixa energia, Eq.(4.24), na configuração anti-paralela dos eletrodos, temos:

$$|\Psi_{1-}^{AP}\rangle = \cos \theta_{AP} |1 \uparrow\rangle + \sin \theta_{AP} |1 \downarrow\rangle \quad (4.58)$$

$$|\Psi_{2-}^{AP}\rangle = \sin \theta_{AP} |2 \uparrow\rangle + \cos \theta_{AP} |2 \downarrow\rangle \quad (4.59)$$

e

$$|\Psi_{1+}^{AP}\rangle = \sin \theta_{AP} |1 \uparrow\rangle - \cos \theta_{AP} |1 \downarrow\rangle \quad (4.60)$$

$$|\Psi_{2+}^{AP}\rangle = -\cos \theta_{AP} |2 \uparrow\rangle + \sin \theta_{AP} |2 \downarrow\rangle \quad (4.61)$$

onde, $\sin \theta_1^{AP} = \cos \theta_2^{AP} = \sin \theta_{AP}$ e $\cos \theta_1^{AP} = \sin \theta_2^{AP} = \cos \theta_{AP}$ é dado pela Eq.(4.28)⁵. E os coeficientes de transmissão para a configuração AP :

$$\mathcal{T}_-^{AP} = \frac{1}{|t_0|^2} |\eta\epsilon \sin 2\theta_{AP} - \eta K \bar{\Gamma}|^2, \quad (4.62)$$

$$\mathcal{T}_+^{AP} = \frac{1}{|t_0|^2} |\eta\epsilon \sin 2\theta_{AP} + \eta K \bar{\Gamma}|^2. \quad (4.63)$$

Necessitamos incluir a polarização magnética dos eletrodos na fórmula para a condutância, Eq(4.29). Quando um elétron está vindo de um eletrodo ele possui momento e spin definidos (dados pelos eletrodos), em seguida ao entrar na região do contato esse elétron escolherá um dos canais de condução disponíveis, então será transferido para o outro eletrodo com momento e spin definido pelo canal escolhido. A polarização magnética é proporcional ao produto das correspondentes densidades de estados das bandas de spins em ambos os eletrodos. Portanto, ver Apêndice A, temos:

$$f_-^P(\theta_P) = \left(\frac{1 + \zeta_F \cos 2\theta_P}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (4.64)$$

$$f_-^{AP}(\theta_{AP}) = \left(\frac{1 + \zeta_F \cos 2\theta_{AP}}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (4.65)$$

5

$$\theta_{AP} = \arctan \left[\frac{\bar{\alpha}}{\bar{\beta} + \sqrt{\bar{\alpha}^2 + \bar{\beta}^2}} \right]$$

$$f_+^P(\theta_P) = \left(\frac{1 - \zeta_F \cos 2\theta_P}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (4.66)$$

$$f_+^{AP}(\theta_{AP}) = \left(\frac{1 - \zeta_F \cos 2\theta_{AP}}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (4.67)$$

onde o sub-índice se refere ao canal (-/+) e o sobre-índice (P/AP) ao estado de polarização dos eletrodos. Com,

$$\zeta_F = \frac{D_M(E_F) - D_m(E_F)}{D_M(E_F) + D_m(E_F)} \quad (4.68)$$

é a polarização dos eletrodos no nível de Fermi, e M/m dizem respeito a banda de spin majoritária/minoritária. É considerado que as densidades de estado não variam muito no nível de Fermi, uma descrição condizente com orbitais de condução tipo s .

A partir da fórmula de Landauer, Eq.(4.29), e das polarizações dos eletrodos descritas acima, podemos obter a condutância no caso P :

$$G_-^P = \frac{e^2}{h} f_-^P(\theta_P) \mathcal{T}_-^P, \quad (4.69)$$

$$G_{Total}^P = \frac{e^2}{h} \{ f_-^P(\theta_P) \mathcal{T}_-^P + f_+^P(\theta_P) \mathcal{T}_+^P \}. \quad (4.70)$$

E no caso AP :

$$G_-^{AP} = \frac{e^2}{h} f_-^{AP}(\theta_{AP}) \mathcal{T}_-^{AP}, \quad (4.71)$$

$$G_{Total}^{AP} = \frac{e^2}{h} \{ f_-^{AP}(\theta_{AP}) \mathcal{T}_-^{AP} + f_+^{AP}(\theta_{AP}) \mathcal{T}_+^{AP} \} \quad (4.72)$$

onde a soma sobre os canais n abertos torna-se a soma sobre os canais E_- e E_+ , com as devidas correções devido a polarização dos eletrodos, abertos no nosso caso de nanocontato.

Da mesma forma, obtemos as expressões para o **ruído shot quântico** no caso P :

$$\mathcal{S}_-^P = \frac{e^3 |V|}{h} \mathcal{T}_-^P (1 - \mathcal{T}_-^P), \quad (4.73)$$

$$\mathcal{S}_{Total}^P = \frac{e^3 |V|}{h} \{ \mathcal{T}_-^P (1 - \mathcal{T}_-^P) + \mathcal{T}_+^P (1 - \mathcal{T}_+^P) \}, \quad (4.74)$$

E no caso AP :

$$\mathcal{S}_-^{AP} = \frac{e^3 |V|}{h} \mathcal{T}_-^{AP} (1 - \mathcal{T}_-^{AP}), \quad (4.75)$$

$$\mathcal{S}_{Total}^{AP} = \frac{e^3 |V|}{h} \{ \mathcal{T}_-^{AP} (1 - \mathcal{T}_-^{AP}) + \mathcal{T}_+^{AP} (1 - \mathcal{T}_+^{AP}) \}. \quad (4.76)$$

No Capítulo 3, foi obtido a expressão geral para o ruído shot quântico a temperaturas e frequências nulas, Eq.(3.86), onde, da mesma forma que nas expressões para a condutância, os canais n referem-se aos canais disponíveis E_- e E_+ .

O fator de Fano, Eq.(3.88), também pode ser obtido no caso P :

$$\mathcal{F}_-^P = \frac{\mathcal{S}_-^P}{\mathcal{S}_I} = 1 - \mathcal{T}_-^P, \quad (4.77)$$

$$\mathcal{F}_{Total}^P = \frac{\mathcal{T}_-^P(1 - \mathcal{T}_-^P) + \mathcal{T}_+^P(1 - \mathcal{T}_+^P)}{\mathcal{T}_-^P + \mathcal{T}_+^P}, \quad (4.78)$$

E no caso AP ,

$$\mathcal{F}_-^{AP} = 1 - \mathcal{T}_-^{AP} \quad (4.79)$$

$$\mathcal{F}_{Total}^{AP} = \frac{\mathcal{T}_-^{AP}(1 - \mathcal{T}_-^{AP}) + \mathcal{T}_+^{AP}(1 - \mathcal{T}_+^{AP})}{\mathcal{T}_-^{AP} + \mathcal{T}_+^{AP}} \quad (4.80)$$

Da mesma forma, definimos a magnetoresistência, para o canal E_- aberto:

$$MR_-(\%) = \frac{G_-^P - G_-^{AP}}{G_-^P + G_-^{AP}} \times 100\%, \quad (4.81)$$

e a magnetoresistência quando os dois canais E_- e E_+ estão abertos,

$$MR_{Total}(\%) = \frac{(G_-^P + G_+^P) - (G_-^{AP} + G_+^{AP})}{G_-^P + G_+^P + G_-^{AP} + G_+^{AP}} \times 100\% \quad (4.82)$$

No Capítulo 5, aplicaremos as Eqs.(4.56)-(4.57) e (4.62)-(4.63) para os coeficientes de transmissão, as Eqs.(4.69)-(4.72) para a condutância, as Eqs.(4.73)-(4.76) para o ruído shot, as Eqs.(4.77)-(4.80) para o fator de Fano e as Eqs.(4.81)-(4.82) para a magnetoresistência ao adotarmos valores baseados na literatura para os parâmetros que essas grandezas dependem.

Capítulo 5

Resultados e Discussão

Neste Capítulo será analisado as relações para o coeficiente de transmissão, a condutância, o **ruído shot quântico**, o fator de Fano e a magnetoresistência para um nanocontato constituído de **dois átomos** ferromagnéticos (ver Figura 4.6 e Figura 4.7) ligados a dois reservatório da mesma espécie, que são submetidos a um campo magnético aplicado nos eletrodos (gerado pelas espiras) na direção da condução, tal campo favorecerá um acoplamento longitudinal, entre os átomos dos eletrodos e os átomos do nanocontato, com as configurações paralela P e anti-paralela AP , e um campo transversal (tal campo é considerado como a interação dos graus de liberdade transversos intrínsecos do spin) a direção da condução, o qual permitirá flutuações quânticas, devido ao princípio de incerteza de Heisenberg, dos spins dos elétrons de condução, descrito no Capítulo 4. Nesse intuito, será adotado valores para os parâmetros baseados em resultados experimentais.

Como um **exemplo prático** para aplicarmos as fórmulas obtidas no Capítulo 4 e analisarmos as quantidades de interesse, é adotado os seguintes valores para os parâmetros [23, 24, 36, 39]: $\mu = 4,0$; $K/t_0 = 0,05$; $\epsilon/t_0 = 0,85$; $\zeta_F = 0,3$; $|V| = 1,0mV$. Onde observamos uma forte anisotropia imposta pelo acoplamento longitudinal μ , ver Eq.(4.40); a razão K/t_0 sugere uma pequena interação de troca entre os elétrons itinerantes nos orbitais s e os elétrons localizados nos orbitais d , Eqs.(4.1) e (4.14); a razão ϵ/t_0 diz que a chance de um elétron sofrer hopping é maior que a chance desse elétrons ficar em um dado sítio no nanocontato, como é o esperado para elétrons itinerantes no orbital s , ver Eq.(4.6) com t_{12} ; a polarização ζ_F dos eletrodos é fraca, ver Eq.(4.68); $|V|$ é um voltagem usual para nanofios.

A partir desses valores, podemos estudar o coeficiente de transmissão, a condutância, o ruído shot quântico, o fator de Fano e a magnetoresistência nas configurações P e AP dos acoplamentos longitudinais, e no caso monocanal e bicanais de condução abertos, em função do parâmetro de sobreposição entre as funções de onda eletrônica em cada átomo η , a qual referiremos como overlap, e da flutuação quântica transversa λ , com $\lambda < 2$, devido a aproximação perturbativa utilizada $\lambda < \mu$. Com um exemplo similar, C. A. Dartora e G. G. Cabrera [23, 24] estudaram as propriedades da condutância e da magnetoresistência, quando somente o canal E_- está aberto para condução. Para valores de magnetoresistência, eles obtiveram $MR(\%) \approx 370\%$, que é uma boa aproximação dos resultados experimentais obtidos para nanofios de Ni e Co [34, 36, 37]. Nesta dissertação, reconstituimos os resultados do Dartora e Cabrera, e apresentamos **originalmente** um estudo da condutância, quando os dois canais de condução E_- e E_+ estão abertos, um estudo da dinâmica temporal da condutância acessada pelo ruído shot quântico nos casos monocanal e bicanais abertos, a comparação entre o ruído shot quântico e o ruído shot clássico (ruído Poissoniano) através do

fator de Fano nos dois casos de abertura dos canais, e uma descrição da magnetoresistência nos casos monocanal e bicanais abertos, tomando uma faixa de variação para os parâmetros.

A Figura 5.1 apresenta os gráficos dos coeficientes de transmissão do canal E_- , Eqs.(4.56) e (4.62), e a Figura 5.2 os gráficos dos coeficientes de transmissão do canal E_+ , Eqs.(4.57) e (4.63), parâmetros adimensionais que variam de 0 à 1, em função do overlap η e alguns valores da flutuação quântica λ . No caso da configuração P dos acoplamentos, é observado um aumento monotônico do coeficiente de transmissão em relação a η . Esse aumento monotônico, é o mesmo obtido através de cálculos *ab initio* para contatos atômicos de Co [48]. Um resultado novo e intuitivamente inesperado, no caso P , é o coeficiente de transmissão independente das flutuações λ . Já no caso AP , para valores grandes de λ , há um comportamento similar ao caso P . No entanto, quando λ toma valores pequenos, o coeficiente de transmissão decresce apreciavelmente, apesar de haver um aumento de η .

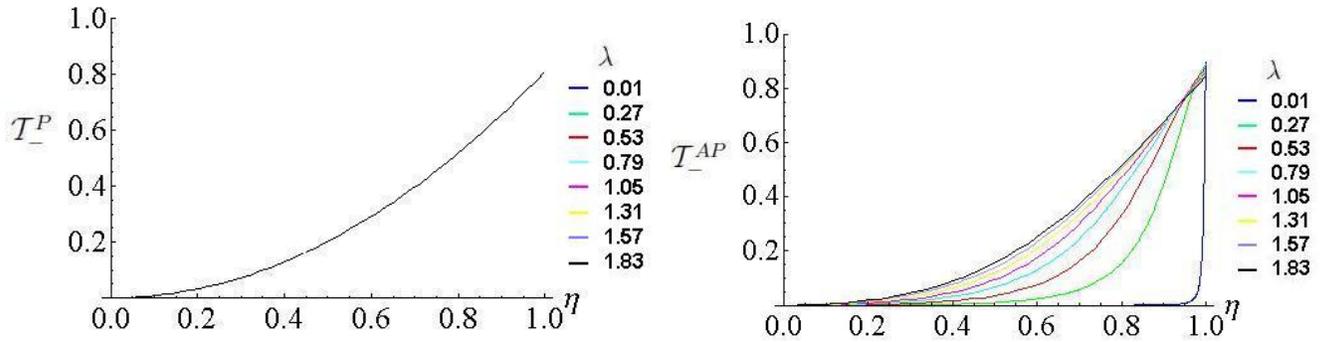


Figura 5.1: Coeficientes de transmissão T_-^P (E) e T_-^{AP} (D) com o canal E_- aberto para condução em função de η .

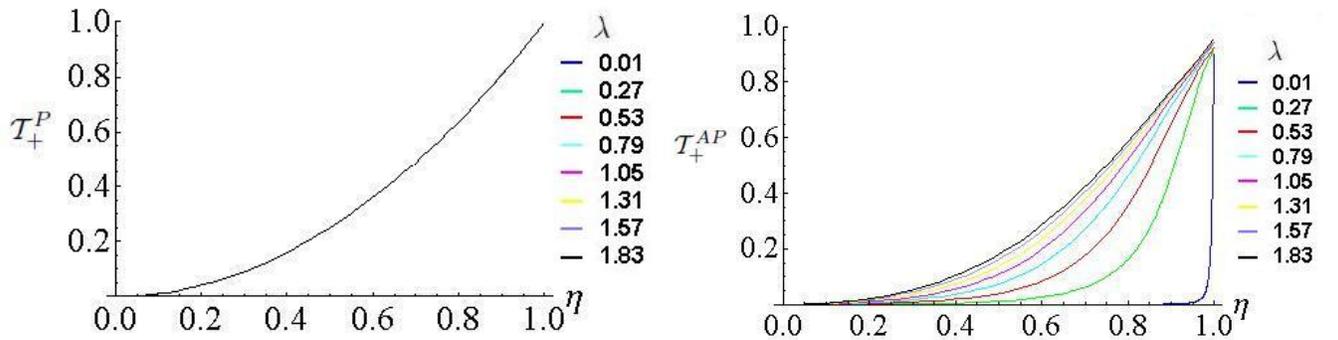


Figura 5.2: Coeficiente de transmissão T_+^P (E) e T_+^{AP} (D) com o canal E_+ aberto para condução em função de η .

Na Figura 5.3 é mostrado as curvas da condutância no caso monocanal, Eqs.(4.69) e (4.71), e na Figura 5.4 as curvas da condutância no caso bicanais, Eqs.(4.70) e (4.72), que apresentam comportamento similar aos dos coeficientes de transmissão, tanto na caso P quanto no caso AP . É importante notar os valores da condutância, considerando alto overlap ($\eta \approx 0,8$), temos uma condutância no caso monocanal da ordem de $\approx 0,65e^2/h$ e no caso bicanais de $\approx 0,75e^2/h$ para configuração P , e de $\approx 0,35e^2/h$ e $\approx 0,65e^2/h$ nos casos monocanal e bicanais, respectivamente, para configuração AP . Esses resultados estão dentro da faixa de valores para nanocontatos de Ni obtidos experimentalmente, pela técnica MCBJ, de $\approx 17k\Omega$ à $\approx 28k\Omega$ (convertendo teremos, $\approx 0,65e^2/h$ à $\approx 1,08e^2/h$, respectivamente) [35], e de $\approx e^2/h$ medidos para nanofios de Co (em nanofios feitos dos outros metais ferromagnéticos de transição 3d, também foi observado esse comportamento), em ultra-alto vácuo pela mesma técnica [43], Figura 4.3. Tal fato, é um sinal de uma corrente com polarização de spin. Os valores de condutância aproximados de e^2/h , mesmo para os dois canais de condução abertos, em grande parte, são devidos aos fatores de polarização dos eletrodos (ζ_F) deverem ser incluídos no cálculo da condutância no modelo, pois, caso contrário, têm-se uma soma simples dos coeficientes de transmissão, Figuras 5.1 e 5.2, $\mathcal{T}_- + \mathcal{T}_+ \approx 2$ (ou seja, $2e^2/h$) no caso bicanais abertos, isto é, a condutância esperada de $2e^2/h$ para dois canais não degenerados e completamente abertos não é observada, devido a polarização dos eletrodos ferromagnéticos afetar a condutância de cada canal. Dessa forma, enfatizando a visão “de baixo para cima” do modelo estudado, onde o quantum de condutância é o limite superior permitido [44]. Ainda, como podemos observar, a condutância AP é mais afetada, que a condutância P , pela abertura do segundo canal. Pois, na configuração P , o estado fundamental $|\Psi_{i,-}\rangle$ e o excitado $|\Psi_{i,+}\rangle$, são dominados pelos estados majoritários e minoritários, respectivamente, fazendo com que a condutância do primeiro canal seja mais representativa que a contribuição do segundo canal. Diferentemente, na configuração AP , no estado fundamental e no estado excitado, ambos os estados majoritários e minoritários contribuem significativamente para a condutância de cada canal, ver Apêndice B. Assim, a contribuição do segundo canal no caso AP é maior que no caso P . Da mesma forma que para os coeficientes de transmissão, é observado a independência da condutância em relação a λ no caso P . Entretanto, vemos a dependência da condutância em relação a λ no caso AP nesses gráficos.

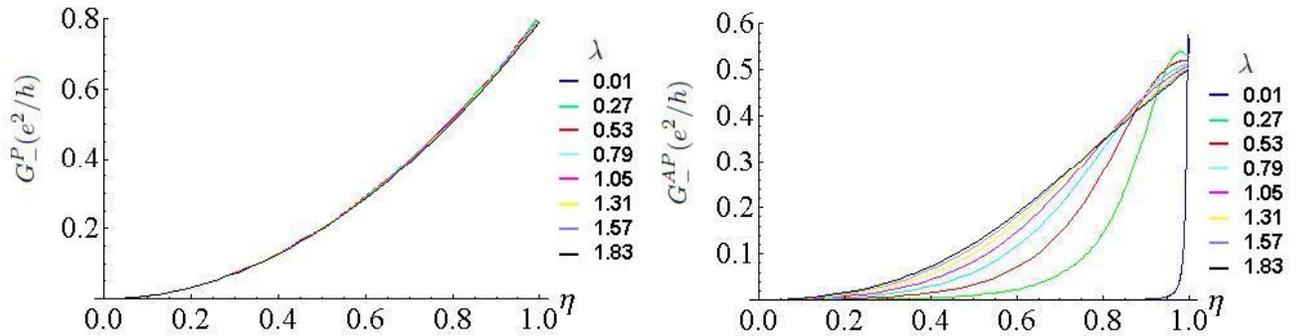


Figura 5.3: Condutância monocanal G_-^P (E) e G_-^{AP} (D) com o canal E_- aberto para condução em função de η .

O comportamento do ruído shot quântico, Eqs.(4.73)-(4.76), é mostrado nas Figuras 5.5-5.8. No caso da configuração P do acoplamento, Figuras 5.5 e 5.7, o comportamento qualitativo do

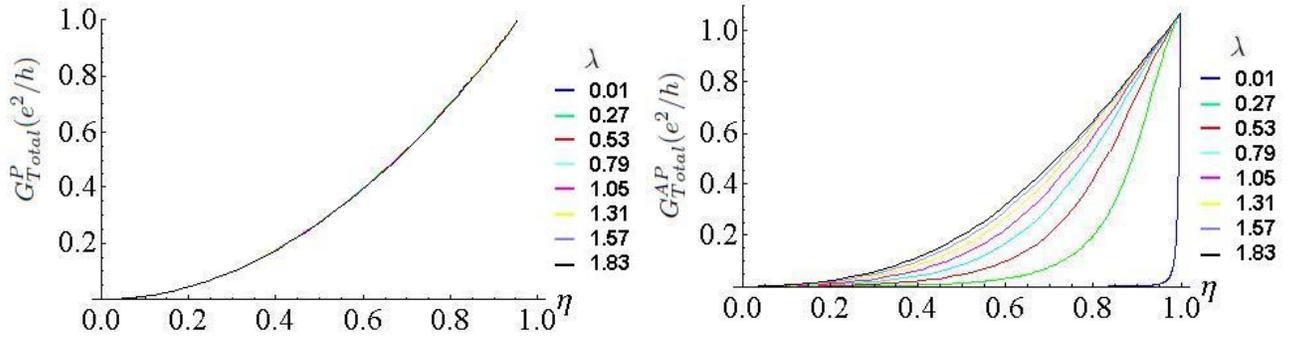


Figura 5.4: Condutância total G_{Total}^P (E) e G_{Total}^{AP} (D) com os canais E_- e E_+ abertos para condução em função de η .

ruído shot quando somente o canal mais baixo E_- , e quando ambos os canais E_- e E_+ estão abertos, é bastante similar, diferindo apenas pela amplitude do pico do ruído, $\mathcal{S}_{-(Max)}^P \approx 1,6 \times 10^{-27} A^2/Hz$ e $\mathcal{S}_{Total(Max)}^P \approx 3,1 \times 10^{-27} A^2/Hz$, respectivamente. Nessa mesma configuração, é possível observar que o ruído shot não depende apreciavelmente das flutuações λ , assim como foi notado para os coeficientes de transmissão e a condutância na configuração P . No caso da configuração AP do acoplamento, Figuras 5.6 e 5.8, o ruído shot depende tanto de η quanto de λ , o qual é suprimido quando η vai para 1 e λ tende à 0. Como medidas de ruído shot, no sistema que estamos estudando, é atualmente um grande desafio para os experimentais, para termos uma noção das escalas de valores do ruído shot quântico em nanocontatos, apesar de serem em outros tipos de elementos e diferentes geometrias, pode-se citar as seguintes medidas: para contatos constituídos de poucos átomos de Au a temperatura de 4,2K, corrente de bias 0,9 μA e frequência nula, com a condutância entre $0,8 \times 2e^2/h$ e $2,5 \times 2e^2/h$, foi medido ruído shot na faixa de $6,9 \times 10^{-26} A^2/Hz$ ($0,24 \times 2eI$) à $1,15 \times 10^{-25} A^2/Hz$ ($0,4 \times 2eI$) [16, 33, 52]; para contatos de poucos átomos de Al, nas mesmas condições de temperatura, corrente e frequência, à condutâncias entre $0,8 \times 2e^2/h$ e $2,5 \times 2e^2/h$, medidas de ruído shot entre $8,65 \times 10^{-26} A^2/Hz$ ($0,3 \times 2eI$) à $1,7 \times 10^{-25} A^2/Hz$ ($0,6 \times 2eI$) são observadas [16, 33] (em ambas as medidas, Au e Al, o ruído térmico contribui de certa forma, visto que a temperatura nos experimentos é de 4,2K, além de poder haver algum tipo de auto-aquecimento eletrônico devido a corrente); e medidas feitas em contatos quânticos pontuais (formados por processo de confinamento lateral por uma voltagem de gate de um gás de elétrons bi-dimensionais gerado na interface de heteroestruturas semicondutoras de GaAs-AlGaAs) apresentam pico de ruído shot de $6,2 \times 10^{-27} A^2/Hz$ a $V_{bias} = 1mV$, baixas temperaturas e frequência nula, ver Figura 3.5(D) [46]. É importante ressaltar a forma geral de pico e decréscimo apresentada nos nossos resultados, e as características da fórmula de Lesovik [12], que estamos utilizando para calcular o ruído shot a temperatura e frequência nulas. Por essa fórmula é observado picos de ruído shot quando temos um coeficiente de transmissão igual ao coeficiente de reflexão ($\mathcal{T} = \mathcal{R} = 1/2$), ou seja, os picos do ruído shot quântico ocorrem entre os plateaus de condutância, e mínimo para transparência/opacidade total ($\mathcal{T} = 1$ ou 0), isto é, no regime de plateaus de condutância. Ainda, nota-se que os valores máximos do ruído shot independem da configuração P ou AP , dependendo apenas do número de canais abertos e de η , no caso P , e de η e da flutuação quântica λ considerada, no caso AP . Essa característica de pico e decréscimo é observada no sistema estudado, e as escalas de valores obtidas estão aproximadamente de acordo

com as medidas citadas anteriormente, demonstrando que o presente estudo apresenta resultados que podem guiar na elaboração de experimentos no sistema considerado.

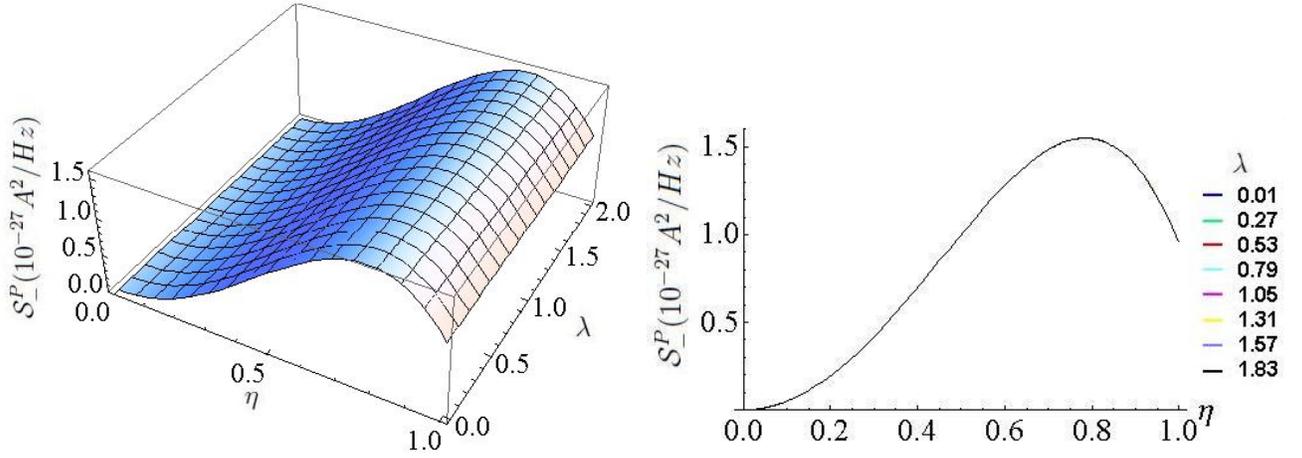


Figura 5.5: Ruído shot, \mathcal{S}_-^P , para configuração P com o canal E_- aberto para condução.

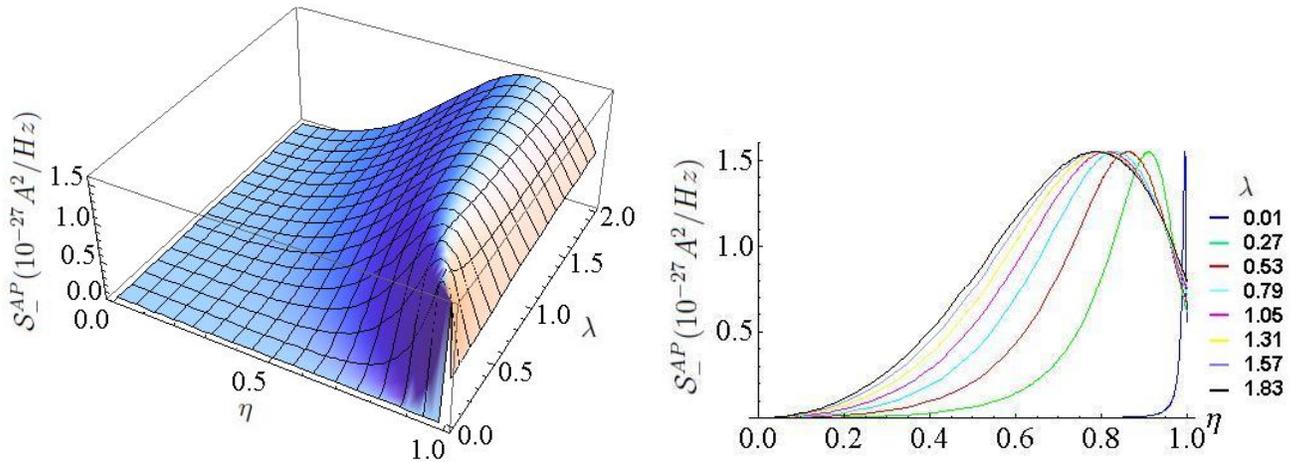


Figura 5.6: Ruído shot, \mathcal{S}_-^{AP} , para configuração AP com o canal E_- aberto para condução.

A comparação entre o ruído shot quântico e o ruído Poissoniano ($\mathcal{S}_I = 2eI$) é dada pelo fator de Fano, Eqs.(4.77)-(4.80), o ruído shot quântico apresenta valores sub-Poissonianos. Nas Figuras 5.9-5.10, na configuração P , tanto no caso monocanal E_- aberto, quanto no caso em que ambos os canais E_- e E_+ estão abertos para condução, o fator de Fano decresce monotonicamente com η , saindo do limite do ruído Poissoniano, com η próximo da origem, e chegando na região onde o ruído shot quântico domina, quando η tende à 1. Fica evidente a afirmação que o ruído shot quântico é sub-Poissoniano no sistema estudado, pois apresenta valores menores que a unidade. Além de, na mesma configuração, observarmos o fator de Fano independente das flutuações λ . No caso AP , o fator de Fano é deslocado para valores onde o ruído Poissoniano é dominante, quando temos altos valores de η , e λ se aproxima da origem. Como um exemplo, é encontrado na literatura medidas para o alumínio de um fator de Fano entre 0,3-0,6 [52]. Fatores como a geometria dos nanocontatos,

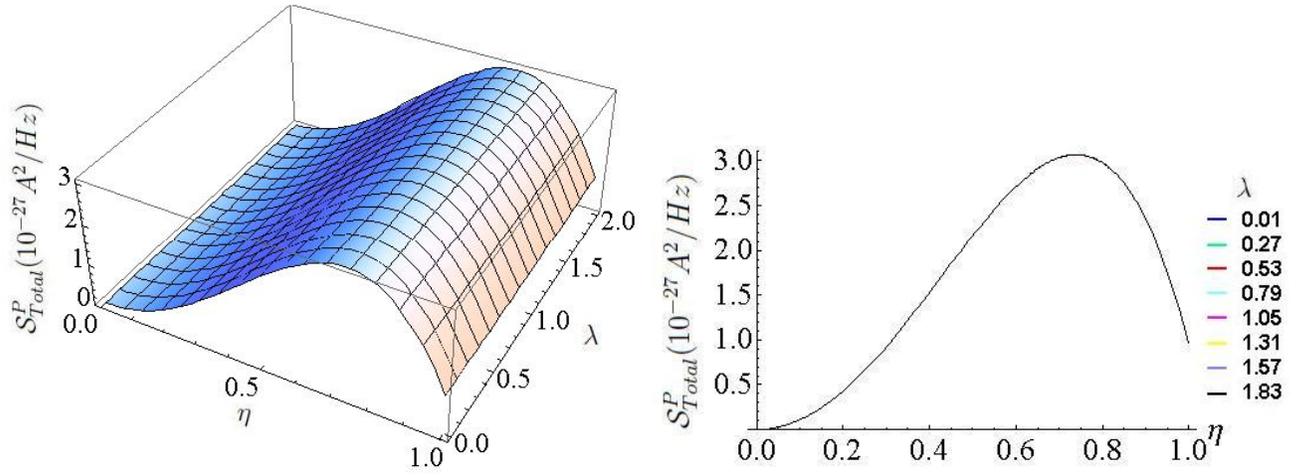


Figura 5.7: Ruído shot, \mathcal{S}_{Total}^P , para configuração P com os dois canais E_- e E_+ abertos para condução.

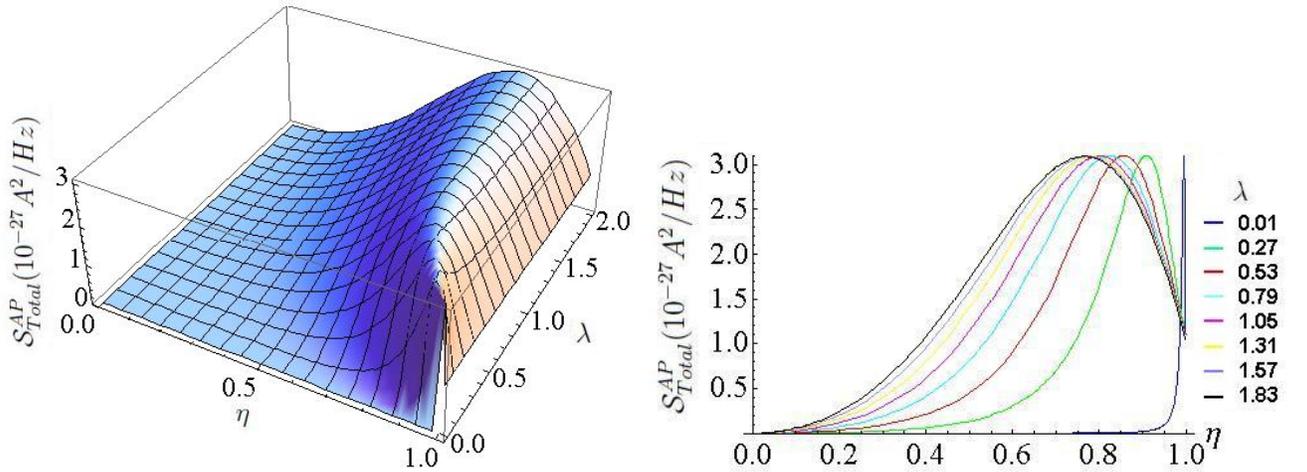


Figura 5.8: Ruído shot, \mathcal{S}_{Total}^{AP} , para configuração AP com os canais E_- e E_+ abertos para condução.

podem reduzir o fator de Fano em até $\approx 25\%$ no caso do Al [53]. Tais fatores geométricos afetam a forma com que os átomos no nanocontato ligam-se, o que influenciará (diminuindo) o overlap das funções de onda dos elétrons de condução, os quais podem ser levados em conta, no modelo estudado, por um pequeno valor do overlap η .

Fisicamente, é possível entender a independência observada em relação as flutuações λ do coeficiente de transmissão, da condutância, do ruído shot e do fator de Fano, na configuração P , como uma ausência de espalhamento induzida magneticamente por λ . Nesse caso, não há uma estreita parede de domínio magnética formada no centro entre os dois átomos, com isso, os elétrons de condução no orbital s não necessitam sofrer spin flip, e atravessam o nanocontato adiabaticamente [39]. Mesmo se localmente o campo transversal alterar a magnetização, essa alteração será a mesma para os coeficientes de todos os estados (ver Eqs. 4.52-4.55), e dessa

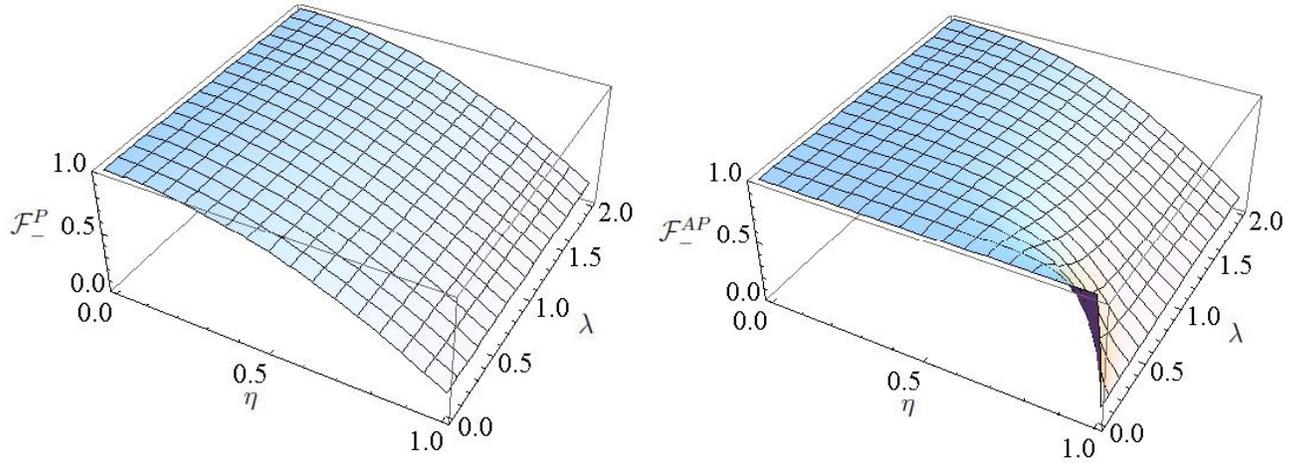


Figura 5.9: Fator de Fano, \mathcal{F}_-^P (E) e \mathcal{F}_-^{AP} (D), com o canal E_- aberto para condução em função de η e λ .

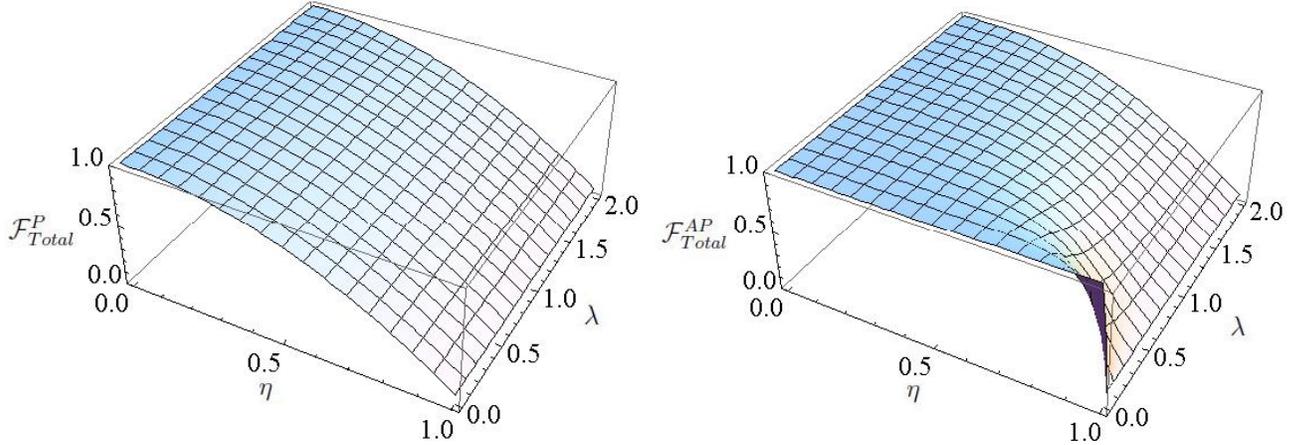


Figura 5.10: Fator de Fano, \mathcal{F}_{Total}^P (E) e \mathcal{F}_{Total}^{AP} (D), com os canais E_- e E_+ abertos para condução em função de η e λ .

forma não induzirá variação da fase dos elétrons de condução ao passarem de um átomo para o outro. Portanto, mantendo a independência das quantidades citadas em relação ao campo transversal λ . No caso AP , para as mesmas quantidades, temos duas regiões, quando temos baixas flutuações λ a supressão observada para o coeficiente de transmissão, a condutância, o ruído shot e o fator de Fano pode ser entendida, intuitivamente, da seguinte forma, a energia dada pelo campo transversal λ para que os elétrons de condução atravessem a parede de domínio magnética se torna menor ou comparada com a energia da parede, fazendo com que os elétrons de condução não consigam se acomodar ao brusco spin flip imposto pela parede, e assim, há um maior espalhamento induzido magneticamente, com a supressão das quantidades citadas nessa região. Fazendo o campo transversal maior, chega-se a uma região quase independente de λ , com comportamento em relação a η semelhante ao caso P . Isso pode ser visto como decorrente da energia dada pelo campo transversal ser muito maior que a energia da parede, fazendo com que os elétrons de condução atravessem a parede com fácil acomodação a magnetização local de um átomo para o outro.

As magnetoresistências para o canal E_- aberto, Eq.(4.81), e para os canais E_- e E_+ abertos, Eq.(4.82), são mostradas nas Figuras 5.11 e 5.12, respectivamente. Em ambos os casos, a MR é reduzida com o aumento de λ , pois, como foi mostrado nas Figuras 5.3 e 5.4, a condutância AP se aproxima da condutância P com o aumento de λ . Tal fato, é devido a maior facilidade dos elétrons itinerantes sofrerem spin flip com o aumento de λ , de acordo com o princípio de incerteza de Heisenberg. Conforme a curva universal da MR em função da condutância, proposta por Chung *et. al.* [39], e nas medidas de Tatara *et. al.* [34], para nanocontatos de poucos átomos dos metais ferromagnéticos, o crescimento no número de canais abertos produz uma diminuição da MR. Esse decréscimo da MR com o aumento no número de canais é observado nas Figuras 5.3 e 5.4, onde as amplitudes das condutâncias são aumentadas ao passarmos do caso monocanal para o caso bicanais de condução abertos. É importante notar os altos valores de MR que obtivemos, mesmo com eletrodos fracamente polarizados ($\zeta_F = 0,3$).

Cálculos utilizando a teoria do funcional densidade (DFT) para nanocontatos formados por dois e três átomos, em cadeia linear e em zig-zag para Ni e Co, sugeriram que a magnetoresistência obtida experimentalmente de algumas centenas de porcentagem (280% para Ni-Ni a temperatura ambiente e $100Oe$ de campo magnético aplicado [37]; 300% para Ni-Ni e Co-Co a temperatura ambiente e $120Oe$ [34]; 700% para Ni-Ni de 10-30 nm a temperatura ambiente e $720Oe$, feito por eletrodeposição [50]; 3000% para Ni-Ni a temperatura ambiente e $\pm 2,5kOe$ e uma corrente constante $200\mu A$, feito por eletrodeposição [36]) pela técnica de estiramento de um fio macroscópico, não poderiam exceder uma MR de 50% em cadeias puras, quando apenas efeitos eletrônicos são considerados, e justificando um limite de MR não maior que 450%, como sendo devido a impurezas (oxigênio) que deverião reagir com os átomos no nanocontato [47–49]. Entretanto, enfatizamos que o modelo sugerido por Dartora e Cabrera [23–26] e estudado em detalhes nesta dissertação, o qual considera apenas efeitos eletrônicos e utilizando as regras da Mecânica Quântica, nos permite obter valores de MR similares aos resultados experimentais [39], apenas alterando alguns parâmetros (de fato, a definição de MR utilizada nessas medidas é $MR = (G_P - G_{AP})/G_{AP}$ [37, 50], mas essa definição tende a infinito quando G_{AP} vai para zero ($\lambda \rightarrow 0$), recuperando o resultado do modelo de Ising em que a MR é infinita, dessa forma, utilizamos a definição de MR dadas pelas Eqs.(4.81)-(4.82), visto que essa definição permite-nos observar melhor o comportamento da MR quando η se aproxima da origem e não há divergência). Portanto, o modelo descreve muito bem os resultados experimentais, considerando apenas efeitos eletrônicos, contrariando os cálculos por DFT. De fato, Tatara *et. al.* [34] já calcularam analiticamente uma MR de 300% considerando apenas processos eletrônicos, mas utilizando uma aproximação semi-clássica.

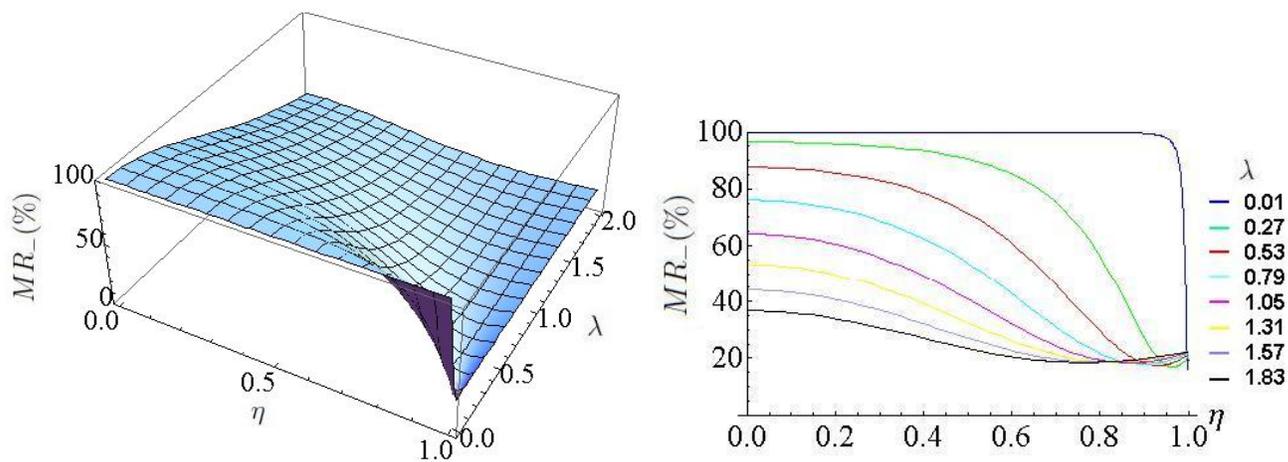


Figura 5.11: MR para o canal E_- , $MR_(\%)$, aberto.

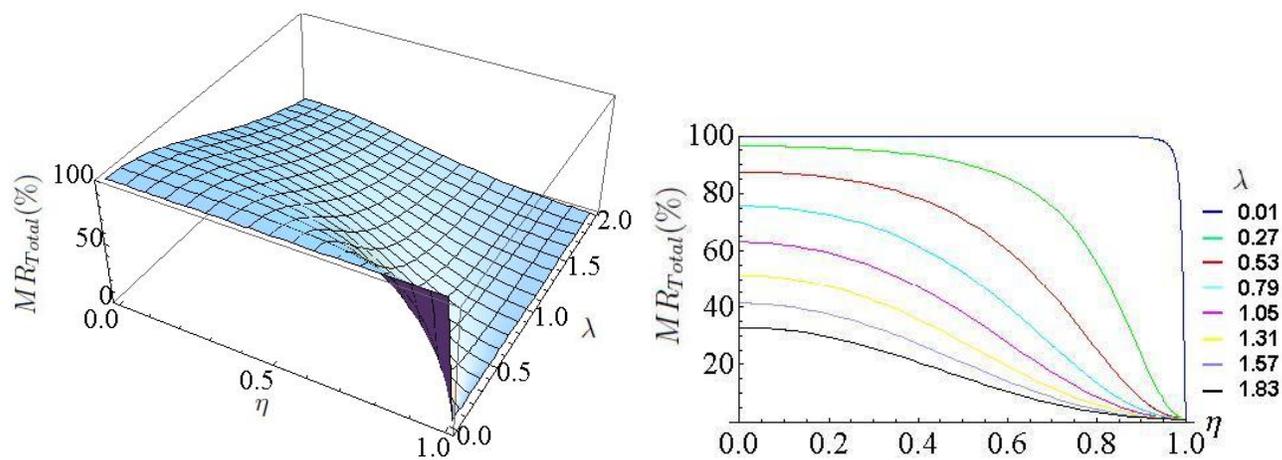


Figura 5.12: MR total, com os canais E_- e E_+ abertos, $MR_{Total}(\%)$.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta dissertação, fizemos uma revisão das características fundamentais de condutores mesoscópicos, das origens e propriedades dos diversos tipos de ruídos que surgem no processo de transporte eletrônico, em vários tipos de condutores.

Com o intuito de descrever as propriedades de transporte de nanofios e nanocontatos feitos dos metais magnéticos de transição, é estudado um modelo proposto por Dartora e Cabrera [23, 24]. Para nanofios com N átomos, são obtidos os auto-valores de energia e os vetores de estado de cada canal de condução. Para nanocontatos, constituídos de dois átomos, é obtido expressões analíticas para os coeficientes de transmissão, as condutâncias, os ruídos shot quânticos, os fatores de Fano e as magnetoresistências para os dois canais disponíveis.

No nanocontato estudado, na configuração P , é observado que os coeficientes de transmissão, as condutâncias, os ruídos shot quânticos e os fatores de Fano são independentes da flutuação quântica transversa λ , isso implica na ausência de espalhamento com spin flip dos elétrons itinerantes, devido a cada canal ser dominado por um tipo de estado de spin, majoritário ou minoritário. Já na configuração AP , as quantidades citadas dependem de λ , como esperado, visto que é a flutuação quântica λ (através do princípio de incerteza de Heisenberg) que possibilita o brusco spin flip sofrido pelos elétrons ao transitarem entre os eletrodos. No caso AP , os estados majoritários e minoritários contribuem quase que igualmente nos dois canais, pois os coeficientes $\cos\theta_{AP}$ e $\sin\theta_{AP}$ não diferem muito, entre si, para λ grande. Ainda, temos que para grandes valores da flutuação λ , a condutância, o ruído shot quântico e o fator de Fano, em ambas as configurações P e AP , são similares.

Comparando com os dados experimentais para nanocontatos, os valores dos máximos das condutâncias obtidas, no caso P de $G_-^P = 0,8e^2/h$ e $G_{Total}^P = e^2/h$ para monocanal e bicanal de condução abertos, respectivamente, e para o caso AP de $G_-^{AP} = 0,6e^2/h$ e $G_{Total}^{AP} = e^2/h$ para monocanal e bicanal abertos, respectivamente, estão dentro da faixa de valores medidos de $0,65e^2/h$ à $1,08e^2/h$ para Ni [35], e de e^2/h para Co [43]. Nos casos do ruído shot quântico e do fator de Fano, há carência de medidas específicas para o sistema estudado, por isso, foi feita a comparação com as medidas existentes para nanocontatos de metais normais (Au e Al) e contatos quânticos pontuais em semicondutores (heteroestrutura de GaAs/AlGaAs), a fim de termos um espectro de valores grande, com o qual possamos inferir as ordens de grandezas do ruído [16, 33, 46, 52]. Os valores obtidos nesta dissertação para o ruído shot quântico, com picos no caso P de $\mathcal{S}_-^P = 1,5 \times 10^{-27} A^2/Hz$ e $\mathcal{S}_{Total}^P = 3,0 \times 10^{-27} A^2/Hz$ para monocanal e bicanais abertos, respectivamente, e no caso AP de $\mathcal{S}_-^{AP} = 1,5 \times 10^{-27} A^2/Hz$ e $\mathcal{S}_{Total}^{AP} = 3,0 \times 10^{-27} A^2/Hz$

para monocanal e bicanais abertos, nessa ordem, e o fator de Fano, estão dentro desse espectro de valores medidos. Portanto, este trabalho fornece resultados que podem guiar na elaboração de experimentos que visam o estudo do ruído shot quântico em nanocontatos metálicos magnéticos.

Similarmente aos resultados obtidos por Dartora e Cabrera [23, 24] e Tatara *et. al.* [34], mostramos que ao contrário do previsto por cálculos utilizando a teoria do funcional densidade [47–49], considerando apenas processos eletrônicos é possível obter os altos valores de magnetoresistência (280% [37], 700% [50] ou 3000% [36]) que concordam com os dados experimentais para nanocontatos e nanofios dos metais magnéticos de transição, através de ajuste de alguns parâmetros no modelo. Com esses ajustes, tomando a flutuação quântica λ pequeno, até mesmo valores de magnetoresistência muito maiores que 3000% podem ser obtidos, pois o espalhamento com spin flip é bastante aumentado.

Apêndice A

Polarização dos eletrodos

A polarização dos eletrodos é proporcional ao produto das correspondentes densidades de estados das bandas de spin em ambos os eletrodos. Escrevendo $D_{\sigma}^{(\alpha)}(E_F)$ como as densidades de estados no nível de Fermi, com $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ como as bandas de spin e $\alpha = (L, R)$ os índices esquerda e direita dos eletrodos, e os estados Eqs.(4.52)-(4.55) e Eqs.(4.58)-(4.61). Como os orbitais de condução são do tipo s , é possível considerar que as densidades de estados não variam muito ao redor desse nível e é aplicado uma voltagem pequena em relação ao nível de Fermi.

$$\begin{aligned}
 f_{-}^P(\theta_1, \theta_2) \equiv & D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

$$\begin{aligned}
 f_{-}^{AP}(\theta_1, \theta_2) \equiv & D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}
 f_{+}^P(\theta_1, \theta_2) \equiv & D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

$$\begin{aligned}
 f_{+}^{AP}(\theta_1, \theta_2) \equiv & D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\uparrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\
 & + D_{\downarrow}^{(L)}(E_F)D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

Tomando, $D_{\uparrow}^{(L)}(E_F) = D_M(E_F)$, $D_{\uparrow}^{(R)}(E_F) = D_M(E_F)$, $D_{\downarrow}^{(L)}(E_F) = D_m(E_F)$ e $D_{\downarrow}^{(R)}(E_F) = D_m(E_F)$. A polarização dos eletrodos ferromagnéticos no nível de Fermi é,

$$\zeta_F \equiv \frac{D_M(E_F) - D_m(E_F)}{D_M(E_F) + D_m(E_F)} \quad (\text{A.5})$$

onde M/m diz respeito a banda de spin majoritária/minoritária. Notando que no caso AP , as bandas M e m devem ser trocadas. Assim,

$$f_{-}^P(\theta_P) = D_M^2(E_F) \cos^2 \theta_P \cos^2 \theta_P + D_m^2(E_F) \sin^2 \theta_P \sin^2 \theta_P + 2D_M(E_F)D_m(E_F) \cos^2 \theta_P \sin^2 \theta_P \quad (\text{A.6})$$

pois $\theta_1^P = \theta_2^P = \theta_P$. Utilizando, $\zeta_F D = D_M - D_m$ e $D = D_M + D_m$, temos,

$$f_{-}^P(\theta_P) = \left(\frac{1 + \zeta_F \cos 2\theta_P}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (\text{A.7})$$

Da mesma forma, podemos obter,

$$f_{-}^{AP}(\theta_{AP}) = \left(\frac{1 + \zeta_F \cos 2\theta_{AP}}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (\text{A.8})$$

$$f_{+}^P(\theta_P) = \left(\frac{1 - \zeta_F \cos 2\theta_P}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (\text{A.9})$$

$$f_{+}^{AP}(\theta_{AP}) = \left(\frac{1 - \zeta_F \cos 2\theta_{AP}}{1 + \zeta_F} \right)^2 \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Coefficientes

Para observarmos a contribuição dos estados majoritários e minoritários nas duas configurações P e AP , é mostrado os gráficos dos coeficientes de cada estado Eqs.(4.52)-(4.55) e Eqs.(4.58)-(4.61), dentro do exemplo discutido no Capítulo 5, com $\mu = 4$ e $\eta = 0, 7$.

Na configuração P , os estados majoritários e minoritários são $\{|1 \uparrow\rangle, |2 \uparrow\rangle\}$ e $\{|1 \downarrow\rangle, |2 \downarrow\rangle\}$, respectivamente. Assim, o comportamento dos coeficientes desses estados, $\cos \theta_P$ e $\sin \theta_P$, é mostrado na Figura B.1. Portanto, observamos que os estados com o coeficiente $\cos \theta_P$, são os dominantes. No estado fundamental, $|\Psi_-\rangle$, o estado dominante é $\{|1 \uparrow\rangle, |2 \uparrow\rangle\}$, e no estado excitado, $|\Psi_+\rangle$, o estado $\{|1 \downarrow\rangle, |2 \downarrow\rangle\}$ dominará.

Na configuração AP , os estados majoritários e minoritários são $\{|1 \uparrow\rangle, |2 \downarrow\rangle\}$ e $\{|1 \downarrow\rangle, |2 \uparrow\rangle\}$, respectivamente. Os coeficientes, $\cos \theta_{AP}$ e $\sin \theta_{AP}$, são mostradas na Figura B.1. Agora, não é possível desprezar a contribuição do coeficiente $\sin \theta_{AP}$. Dessa forma, em ambos os estados, fundamental e excitado, os estados $\{|1 \uparrow\rangle, |2 \downarrow\rangle\}$ e $\{|1 \downarrow\rangle, |2 \uparrow\rangle\}$ contribuem.

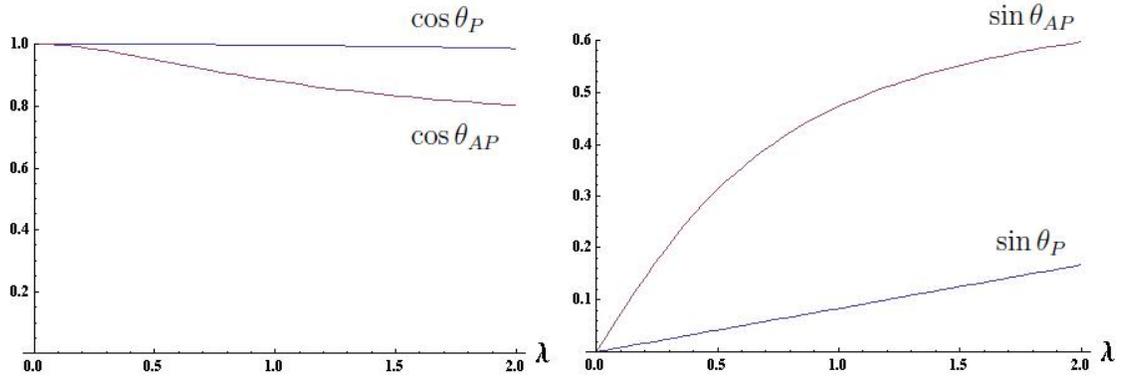


Figura B.1: Coeficientes: (E) $\cos \theta_P$ e $\cos \theta_{AP}$, (D) $\sin \theta_P$ e $\sin \theta_{AP}$.

Referências Bibliográficas

- [1] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Second Edition, Oxford University Press (2002).
- [2] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, New Edition, Cambridge University Press (1997).
- [3] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press (2001).
- [4] R. Landauer, *Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction*, IBM J. Res. Develop. 1, 233 (1957); Y. Imry, R. Landauer, *Conductance viewed as transmission*, Rev. Mod. Phys., Vol. 71, No 2, 306 (1999).
- [5] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Harcourt Publ. (1976).
- [6] Na Young Kim, *Correlated electron transport in one-dimensional mesoscopic conductors*, Phd. Thesis, Stanford University (2006).
- [7] Sh. Kogan, *Electronic Noise and Fluctuations in Solids*, Cambridge University Press (1996).
- [8] N. Wax(Ed.), *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*, Dover Publications (1954).
- [9] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill International Editions (1985).
- [10] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, Springer Series in Solid-State Science 31, Springer-Verlag, (1985); R. Kubo, *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I.*, J. Phys. Soc. Jpn., 570-586, 12 (1957).
- [11] Ya.M. Blanter, M. Büttiker, *Shot Noise in Mesoscopic Conductors*, Phys. Rep. 336, 1-166 (2000).
- [12] G.B. Lesovik, *Excess quantum noise in 2D ballistic point contacts*, [Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 49, 513 (1989)]JETP Lett., Vol. 49, No. 9, 592-594 (1989); V.A. Khlus, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 93, 2179 (1987) [Sov. Phys. JETP 66, 1243 (1987)].
- [13] M. Buttiker, *Scattering theory of current and intensity noise correlations in conductors and wave guides*, PRB, 46, 19, 12485 (1992).
- [14] M.J.M. de Jong, C. W. J. Beenakker, *Shot noise in mesoscopic systems*, arXiv:cond-mat/961140 (1996).

- [15] C.W.J. Beenakker, C. Schonenberger, *Quantum Shot Noise*, Physics Today, pg. 37, May (2003).
- [16] Y.V. Nazarov(Ed.), *Quantum Noise in Mesoscopic Physics*, NATO Science Series, Kluwer Acad. Publ. (2003).
- [17] T. Martin, *Noise in meoscopic physics*,[arXiv: cond-mat/0501208], Les Houches Session LXXXI, H. Bouchiat *et. al.* Eds., Elsevier (2005).
- [18] S.R. Eric Yang, *Quantum Shot Noise Spectrum of a Point Contact*, Sol. Stat. Communications, Vol. 18, 5, 375-378 (1992).
- [19] Ya.M. Blanter, *Recent Advances in Studies of Current Noise*, arXiv:cond-mat/0511478v2 (2005).
- [20] A. van der Ziel *Noise in Solid State Devices ans Circuits*, John Wiley & Sons Publications (1986).
- [21] F.N. Hooge, *et. al.*, *Experimental studies on 1/f noise*, Rep. Prog. Phys. 44, 479 (1981).
- [22] de Picciotto, *et. al.*, *Direct observation of a fractional chage*, Nature 389, 162 (1997).
- [23] C.A. Dartora, *Tunelamento e Transporte Quântico em Sistemas Mesoscópicos: Fundamentos e Aplicações*, Tese de Doutorado, IFGW/Unicamp (2005).
- [24] C.A. Dartora, G.G. Cabrera, *Quantum transport properties of a two-channel atimic-sized magnetic contact*, PRB, 72, 064456 (2005).
- [25] C.A Dartora, G.G. Cabrera, *Quantum transport in a ferromagnetic nanowire: conductance and MR effect*, Physics Letter A, 334, 46 (2005).
- [26] C.A. Dartora, G.A. Viana, G.G. Cabrera, *Quantized conductance and giant MR effect in atomic-sized ferromagnetic contacts*, Physica E, 39,155 (2007).
- [27] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Ed., Addison Wesley (1994).
- [28] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Third Ed., John Wiley & Sons (1998).
- [29] S.R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, Edusp (2005).
- [30] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2nd Ed., Elsevier Butterworth-Heinemann (2006).
- [31] L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Statistical Physics*, Part 1, Butterworth-Heinemann, Oxford (1980).
- [32] C.W.J. Beenakker, H. van Houten, *Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures*,[Solid State Physics, 44, 1 (1991)] arXiv:cond-mat/0412664 (2004).
- [33] N. Agrait, A.L. Yeyati, J.M. van Ruitenbeek, *Quantum properties of atomic-sized conductors*, Phys. Rep. 337, 81-279 (2003).

- [34] G. Tataru, *et al.*, *Domain Wall Scattering Explains 300% Ballistic Magnetoconductance of Nanocontacts*, PRL 83, 10, 2030 (1999).
- [35] M. Viret, *et al.*, *Magneto-resistance through a single nickel atom*, PRB 66, 220401(R) (2002).
- [36] H.D. Chopra, S. Hua, *Ballistic magneto-resistance over 3000% in Ni nanocontacts at room temperature*, PRB 66, 020403(R) (2002).
- [37] N. García, *et al.* *Magneto-resistance in excess of 200% in Ballistic Ni Nanocontacts at Room Temperature and 100Oe*, PRL, 82, 14, 2923 (1999).
- [38] B.K. Chakrabarti, A. Dutta, P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*, Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag (1996).
- [39] S.H. Chung, M. Muñoz, N. García, W.F. Egelhoff, R.D. Gomez, *Universal scaling of ballistic magneto-resistance in magnetic nanocontacts*, PRL 89, 28, 287203-1 (2002).
- [40] A. Sokolov, C. Zhang, E.Y. Tsybal, J. Redepenning, B. Doudin, *Quantized magneto-resistance in atomic-size contacts*, Nature Nanotechnology, Vol. 2, Issue 3, 171-175 (2007).
- [41] R.J. Schoelkopf, *et al.*, *Frequency Dependence of Shot Noise in a Diffusive Mesoscopic Conductor*, PRL 78, 17, 3370 (1997).
- [42] H.D. Chopra, *et al.*, *The quantum spin-valve in cobalt atomic point contacts*, Nature Materials, Vol. 4, 832, November (2005).
- [43] V. Rodrigues, *et al.*, *Evidence for Spontaneous Spin-Polarized Transport in Magnetic Nanowires*, PRL, 91, 9, 096801 (2003).
- [44] S. Datta, *Electrical resistance: an atomistic view*, Nanotechnology 15, 433 (2004).
- [45] M. Kindermann, P.W. Brouwer, *Conductance reduction without shot noise in quantum wires*, PRB, 74, 125309 (2006).
- [46] M. Reznikov, *et al.*, *Temporal Correlation of Electrons: Suppression of Shot Noise in a Ballistic Quantum Point Contact*, PRL, 75, 18, 3340 (1995).
- [47] A.R. Rocha, *et al.*, *Search for magneto-resistance in excess of 1000% in Ni point contacts: Density functional calculations*, PRB, 76, 054435 (2007).
- [48] A. Bagrets, *et al.*, *Conduction eigenchannels of atomic-sized contacts: Ab initio KKR Green's function formalism*, PRB, 75, 235448 (2007).
- [49] A. Bagrets, *et al.*, *Magneto-resistance of atomic-sized contacts: An ab initio study*, PRB 70, 064410 (2004).
- [50] N. García, *et al.*, *Ballistic magneto-resistance in a magnetic nanometer sized contact: an effective gate for spintronics*, App. Phys. Let. 79, 27, 4550 (2001).

- [51] O. Céspedes, *et al.*, *Random telegraph noise in a nickel nanoconstriction*, Journal of Applied Physics, 93, 10, 8433 (2003).
- [52] H.E. van den Brom, *et al.*, *Statistical and Dynamical Aspects of Mesoscopic Systems*, Edited by D. Reguera, *et al.*, Springer-Verlag, p. 114-122 (2000).
- [53] J. Yao, *et al.*, *Effect of atomic geometry on shot noise in aluminum quantum point contacts*, PRB 73, 233407 (2006).