

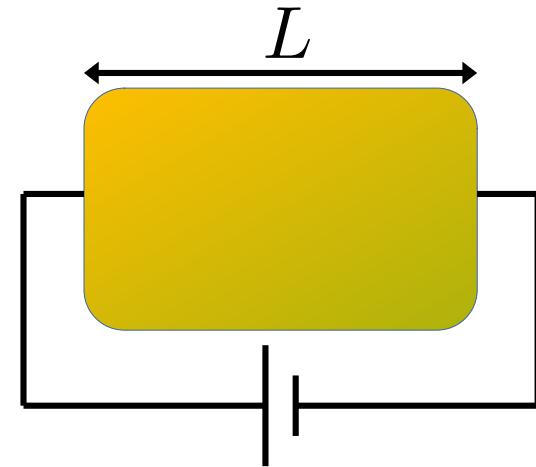
Transporte Quântico Mesoscópico

Bruno Amorim

Escola Mato-Grossense de Física 2021
03 a 05 Novembro 2021

O que é transporte mesoscópico?

- As propriedades de transporte de um material são tipicamente descritas em termos da **conductividade** (intensiva, intrinseca ao material)

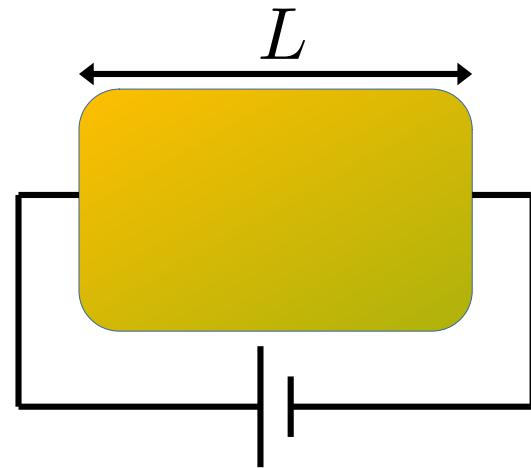


O que é transporte mesoscópico?

- As propriedades de transporte de um material são tipicamente descritas em termos da **conductividade** (intensiva, intrinseca ao material)
- A validade disto depende de duas escalas:

L = dimensão do dispositivo

ℓ_ϕ = comprimento de coerência de fase



O que é transporte mesoscópico?

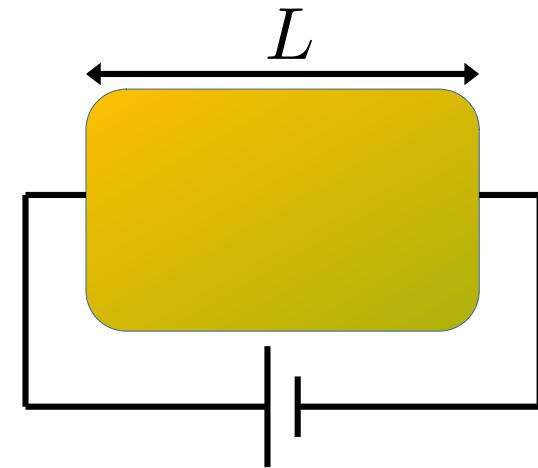
- As propriedades de transporte de um material são tipicamente descritas em termos da **conductividade** (intensiva, intrinseca ao material)
- A validade disto depende de duas escalas:

L = dimensão do dispositivo

ℓ_ϕ = comprimento de coerência de fase

$L \gg \ell_\phi$  Condutividade ✓

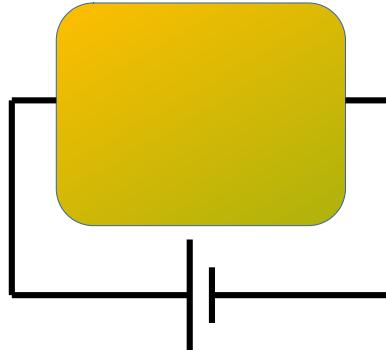
$L < \ell_\phi$  Condutividade ✗, carácter ondulatório dos electrões torna-se dominante. Transporte depende da geometria do dispositivo. Apenas podemos falar em **conductância** ✓



Transporte mesoscópico

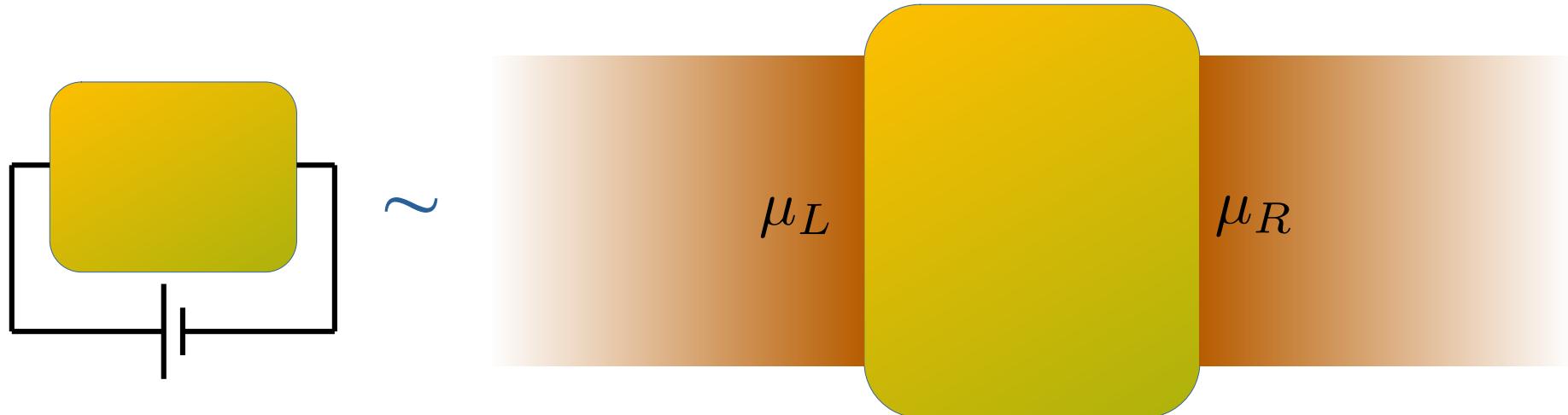
Transporte estacionário

- Se estamos interessados em **transporte estacionário** (muito depois de ligar a voltagem, mas muito antes da bateria descarregar):



Transporte estacionário

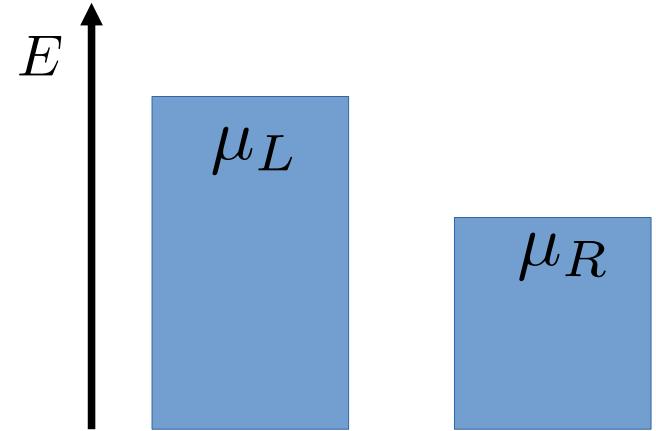
- Se estamos interessados em **transporte estacionário** (muito depois de ligar a voltagem, mas muito antes da bateria descarregar):



Duas abordagens a transporte mesoscópico

Corrente eléctrica pode ser escrita como:

$$I_{L \rightarrow R}^e = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} (f_L(E) - f_R(E)) \mathcal{T}(E)$$

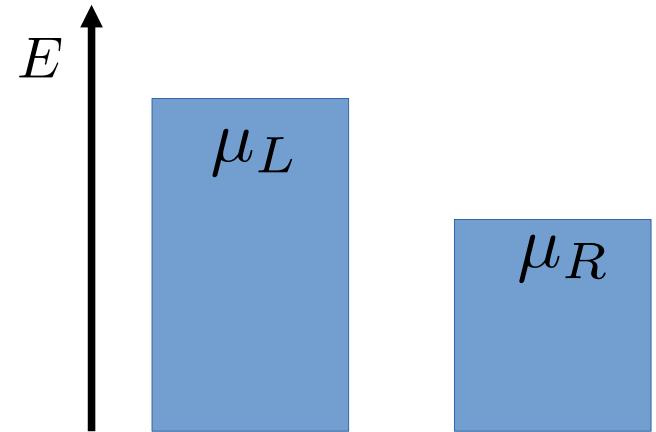


Duas abordagens a transporte mesoscópico

Corrente eléctrica pode ser escrita como:

$$I_{L \rightarrow R}^e = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} (f_L(E) - f_R(E)) \mathcal{T}(E)$$

$\mathcal{T}(E)$ é a transmitância = probabilidade de electrão ser transmitido entre os dois contactos

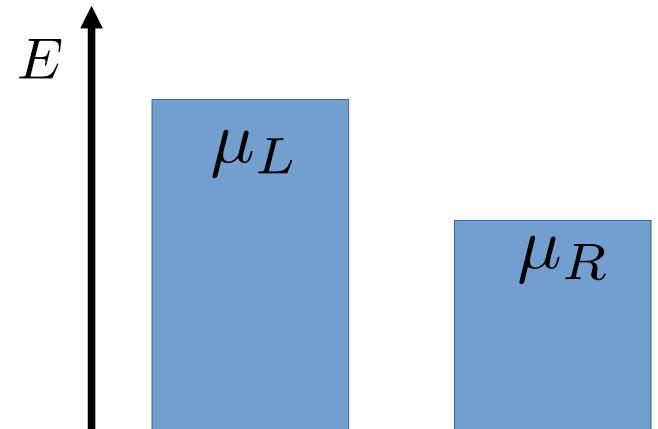


Duas abordagens a transporte mesoscópico

Corrente eléctrica pode ser escrita como:

$$I_{L \rightarrow R}^e = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} (f_L(E) - f_R(E)) \mathcal{T}(E)$$

$\mathcal{T}(E)$ é a transmitância = probabilidade de electrão ser transmitido entre os dois contactos



Fórmula de Landauer-Büttiker

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2$$

M. Büttiker, PRB 38, 9375 (1988)

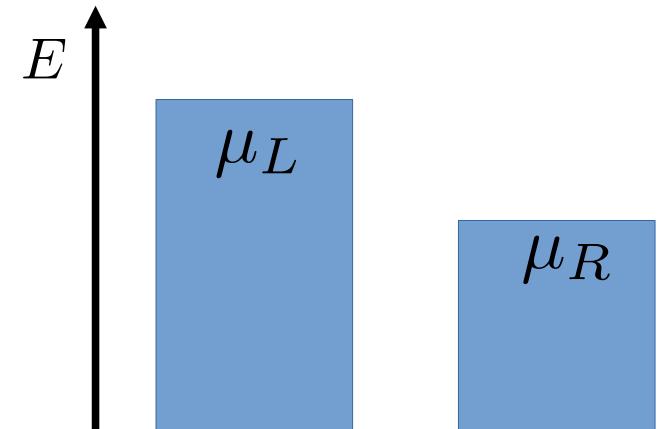
Michael Wimmer, PhD Thesis (2008)

Duas abordagens a transporte mesoscópico

Corrente eléctrica pode ser escrita como:

$$I_{L \rightarrow R}^e = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} (f_L(E) - f_R(E)) \mathcal{T}(E)$$

$\mathcal{T}(E)$ é a transmitância = probabilidade de electrão ser transmitido entre os dois contactos



Fórmula de Landauer-Büttiker

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2$$

M. Büttiker, PRB 38, 9375 (1988)

Michael Wimmer, PhD Thesis (2008)

Fórmula de Caroli

$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R \cdot \boldsymbol{G}^R \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \boldsymbol{G}^A]$$

C. Caroli et al, J Phys C 4, 916 (1971)

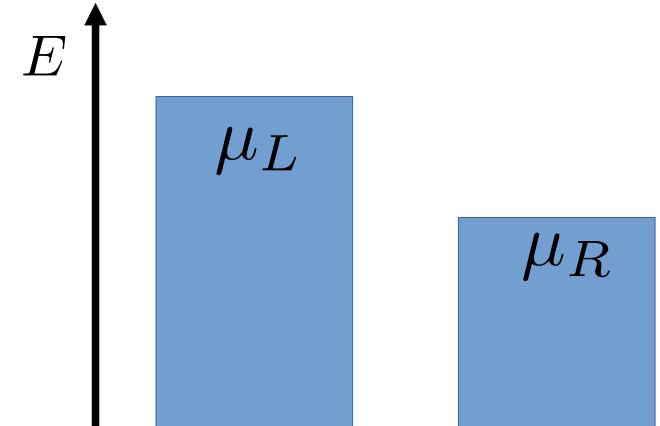
Haug & Jauho "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors"

Duas abordagens a transporte mesoscópico

Corrente eléctrica pode ser escrita como:

$$I_{L \rightarrow R}^e = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} (f_L(E) - f_R(E)) \mathcal{T}(E)$$

$\mathcal{T}(E)$ é a transmitância = probabilidade de electrão ser transmitido entre os dois contactos



Fórmula de Landauer-Büttiker

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2$$

M. Büttiker, PRB 38, 9375 (1988)

Michael Wimmer, PhD Thesis (2008)

?
=

Fórmula de Caroli

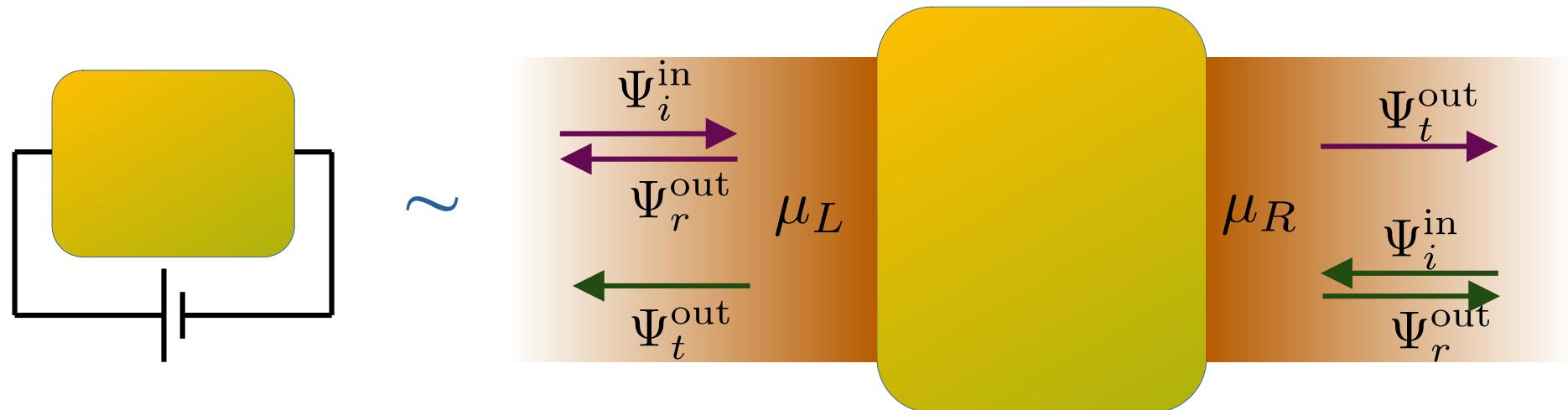
$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R \cdot \boldsymbol{G}^R \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \boldsymbol{G}^A]$$

C. Caroli et al, J Phys C 4, 916 (1971)

Haug & Jauho "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors"

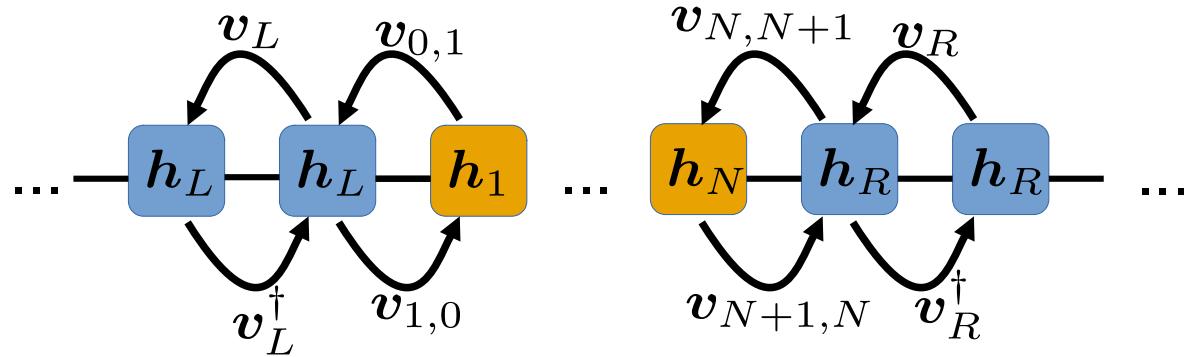
Formalismo de Landauer-Büttiker

Descrever transporte como um problema de espalhamento

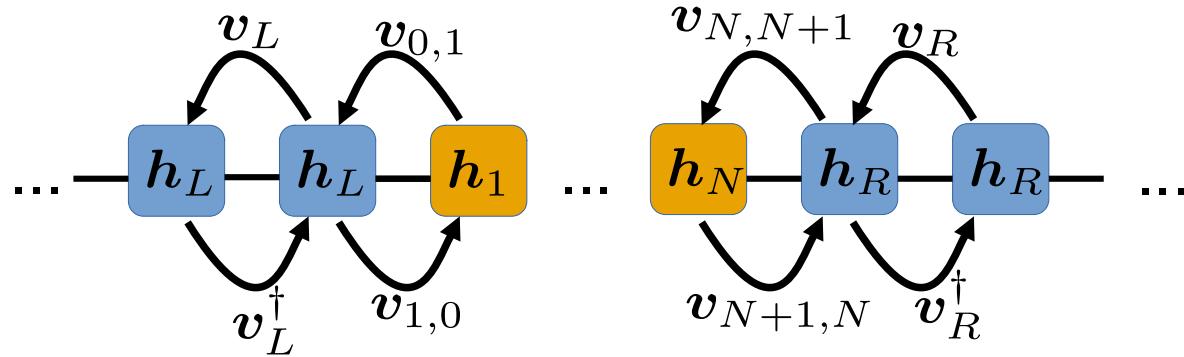


Contactos **semi-infinitos** e invariante de translação!

Hamiltoniano do sistema idealizado



Hamiltoniano do sistema idealizado



$$H = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & & & & \\ \ddots & h_L & v_L & & & \\ & v_L^\dagger & h_L & v_{0,1} & & \\ & v_{1,0} & h_1 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & h_N & v_{N,N+1} \\ & & & & v_{N+1,N} & h_R & v_R \\ & & & & & v_R^\dagger & h_R & \ddots \\ & & & & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

Estados propagantes dos contactos

Na região dos contactos, as funções de onda obdecem à equação:

$$h\Psi_n + v\Psi_{n+1} + v^\dagger\Psi_{n-1} = E\Psi_n$$

Estados propagantes dos contactos

Na região dos contactos, as funções de onda obdecem à equação:

$$h\Psi_n + v\Psi_{n+1} + v^\dagger\Psi_{n-1} = E\Psi_n$$

Pode ser escrita em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -v^\dagger & (E - h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n+1} \end{bmatrix}$$

Estados propagantes dos contactos

Na região dos contactos, as funções de onda obdecem à equação:

$$h\Psi_n + v\Psi_{n+1} + v^\dagger\Psi_{n-1} = E\Psi_n$$

Pode ser escrita em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & 1 \\ -v^\dagger & (E - h) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n+1} \end{bmatrix}$$

Invariância de translação permite escrever: $\Psi_{n+1} = \lambda\Psi_n$

Estados propagantes dos contactos

Na região dos contactos, as funções de onda obdecem à equação:

$$\hbar \Psi_n + v \Psi_{n+1} + v^\dagger \Psi_{n-1} = E \Psi_n$$

Pode ser escrita em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -v^\dagger & (E - \hbar) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n+1} \end{bmatrix}$$

Invariância de translação permite escrever: $\Psi_{n+1} = \lambda \Psi_n$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -v^\dagger & (E - \hbar) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix}$$

Estados propagantes dos contactos

Na região dos contactos, as funções de onda obdecem à equação:

$$\hbar\Psi_n + v\Psi_{n+1} + v^\dagger\Psi_{n-1} = E\Psi_n$$

Pode ser escrita em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & 1 \\ -v^\dagger & (E - \hbar) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n+1} \end{bmatrix}$$

Invariância de translação permite escrever: $\Psi_{n+1} = \lambda\Psi_n$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & 1 \\ -v^\dagger & (E - \hbar) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{n-1} \\ \Psi_n \end{bmatrix}$$

Notas:

- Problema de auto-valores generalizado de dimensão $2n \times 2n$
- n estados deslocam-se para direita e n estados para a esquerda
- Estados propagantes: $|\lambda| = 1, \lambda = e^{ika}$
- Estados evanescentes: $|\lambda| \neq 1$

Operador de corrente e estados propagantes

O operador de corrente é definido a partir da equação de continuidade:

$$\frac{d\rho_n}{dt} = i [H, \rho_n] = I_{n-1 \rightarrow n} - I_{n \rightarrow n+1}$$

Operador de corrente e estados propagantes

O operador de corrente é definido a partir da equação de continuidade:

$$\frac{d\rho_n}{dt} = i [H, \rho_n] = I_{n-1 \rightarrow n} - I_{n \rightarrow n+1}$$

De tal forma que: $I_{n \rightarrow n+1} = \begin{bmatrix} 0 & iv_{n,n+1} \\ -iv_{n+1,n} & 0 \end{bmatrix}$

Operador de corrente e estados propagantes

O operador de corrente é definido a partir da equação de continuidade:

$$\frac{d\rho_n}{dt} = i [H, \rho_n] = I_{n-1 \rightarrow n} - I_{n \rightarrow n+1}$$

De tal forma que: $I_{n \rightarrow n+1} = \begin{bmatrix} 0 & i\mathbf{v}_{n,n+1} \\ -i\mathbf{v}_{n+1,n} & 0 \end{bmatrix}$

Para dois estados propagantes:

$$\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = i \left(\Phi_n^\dagger \mathbf{v}_{n,n+1} \Psi_{n+1} - \Phi_{n+1}^\dagger \mathbf{v}_{n+1,n} \Psi_n \right)$$

Operador de corrente e estados propagantes

O operador de corrente é definido a partir da equação de continuidade:

$$\frac{d\rho_n}{dt} = i [H, \rho_n] = I_{n-1 \rightarrow n} - I_{n \rightarrow n+1}$$

De tal forma que: $I_{n \rightarrow n+1} = \begin{bmatrix} 0 & i\mathbf{v}_{n,n+1} \\ -i\mathbf{v}_{n+1,n} & 0 \end{bmatrix}$

Para dois estados propagantes:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle &= i \left(\Phi_n^\dagger \mathbf{v}_{n,n+1} \Psi_{n+1} - \Phi_{n+1}^\dagger \mathbf{v}_{n+1,n} \Psi_n \right) \\ &= i \Phi_n^\dagger (\mathbf{v}_{n,n+1} \lambda_\Psi - \lambda_\Phi^* \mathbf{v}_{n+1,n}) \Psi_n \end{aligned}$$

Ortogonalidade de estados propagantes

Estados propagantes diagonalizam operador corrente:

$$\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = i \Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L - \lambda_\Phi^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = v_\Psi \delta_{\Psi, \Phi}$$

Ortogonalidade de estados propagantes

Estados propagantes diagonalizam operador corrente:

$$\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = i \Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L - \lambda_\Phi^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = v_\Psi \delta_{\Psi, \Phi}$$

Prova: Consideremos dois estados propagantes:

$$\left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L + \lambda_\Psi^{-1} \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = (E - \mathbf{h}_L) \Psi_n$$

$$\left(\lambda_\Phi \mathbf{v}_L + \lambda_\Phi^{-1} \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Phi_n = (E - \mathbf{h}_L) \Phi_n$$

Ortogonalidade de estados propagantes

Estados propagantes diagonalizam operador corrente:

$$\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = i \Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L - \lambda_\Phi^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = v_\Psi \delta_{\Psi, \Phi}$$

Prova: Consideremos dois estados propagantes:

$$\left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L + \lambda_\Psi^{-1} \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = (E - \mathbf{h}_L) \Psi_n$$

$$\left(\lambda_\Phi \mathbf{v}_L + \lambda_\Phi^{-1} \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Phi_n = (E - \mathbf{h}_L) \Phi_n$$

Combinando as duas equações:

$$\Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Phi^* \mathbf{v}_L + (\lambda_\Phi^*)^{-1} \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = \Phi_n^\dagger (E - \mathbf{h}_L) \Psi_n = \Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L + \lambda_\Psi^{-1} \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n$$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}$

$$(1 - \lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_{\Psi} \mathbf{v}_L - \lambda_{\Phi}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}$

$$(1 - \lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_{\Psi} \mathbf{v}_L - \lambda_{\Phi}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Se $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi} \neq 1$, então: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}$

$$(1 - \lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_{\Psi} \mathbf{v}_L - \lambda_{\Phi}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Se $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi} \neq 1$, então: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Conclusões:

- Se Ψ é um estado evanescente: $\langle \Psi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}$

$$(1 - \lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_{\Psi} \mathbf{v}_L - \lambda_{\Phi}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Se $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi} \neq 1$, então: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Conclusões:

- Se Ψ é um estado evanescente: $\langle \Psi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
- Para dois estados propagantes com $\lambda_{\Psi} \neq \lambda_{\Phi}$: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}$

$$(1 - \lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_{\Psi} \mathbf{v}_L - \lambda_{\Phi}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Se $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi} \neq 1$, então: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Conclusões:

- Se Ψ é um estado evanescente: $\langle \Psi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
- Para dois estados propagantes com $\lambda_{\Psi} \neq \lambda_{\Phi}$: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
 - Se Ψ e Φ propagam-se em direções opostas: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}$

$$(1 - \lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi}) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_{\Psi} \mathbf{v}_L - \lambda_{\Phi}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Se $\lambda_{\Phi}^* \lambda_{\Psi} \neq 1$, então: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Conclusões:

- Se Ψ é um estado evanescente: $\langle \Psi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
- Para dois estados propagantes com $\lambda_{\Psi} \neq \lambda_{\Phi}$: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
 - Se Ψ e Φ propagam-se em direções opostas: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
- Para estados propagantes com $\lambda_{\Psi} = \lambda_{\Phi}$: podemos co-diagonalizar $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle$

Ortogonalidade de estados propagantes

Multiplicando por $\lambda_\Phi^* \lambda_\Psi$

$$(1 - \lambda_\Phi^* \lambda_\Psi) \Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L - \lambda_\Phi^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = 0$$

Se $\lambda_\Phi^* \lambda_\Psi \neq 1$, então: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$

Conclusões:

- Se Ψ é um estado evanescente: $\langle \Psi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
- Para dois estados propagantes com $\lambda_\Psi \neq \lambda_\Phi$: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
 - Se Ψ e Φ propagam-se em direções opostas: $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = 0$
- Para estados propagantes com $\lambda_\Psi = \lambda_\Phi$: podemos co-diagonalizar $\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle$

Temos então que:

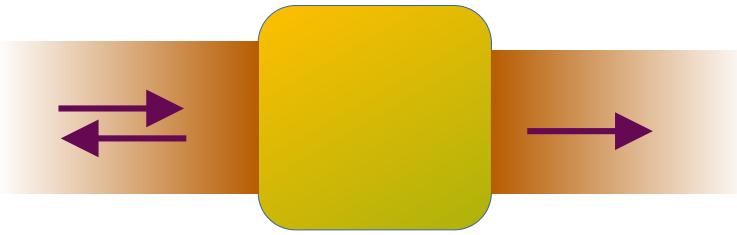
$$\langle \Phi | I_{n \rightarrow n+1} | \Psi \rangle = i \Phi_n^\dagger \left(\lambda_\Psi \mathbf{v}_L - \lambda_\Phi^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \Psi_n = v_\Psi \delta_{\Psi, \Phi}$$

Para estados normalizados, $\Psi^\dagger \cdot \Psi = 1$, v_Φ é a velocidade de grupo

Estados de espalhamento

Estados de espalhamento são construídos a partir de estados propagantes

$$|\Psi_{+,\alpha}\rangle = \begin{cases} |\Psi_{L,+,\alpha}\rangle + \sum_{\beta} r_{\beta\alpha}^{R\leftarrow L} |\Psi_{L,-,\beta}\rangle & , \text{contacto esquerdo} \\ ? & , \text{região central} \\ \sum_{\gamma} t_{\gamma\alpha}^{R\leftarrow L} |\Psi_{R,+,\gamma}\rangle & , \text{contacto direito} \end{cases}$$

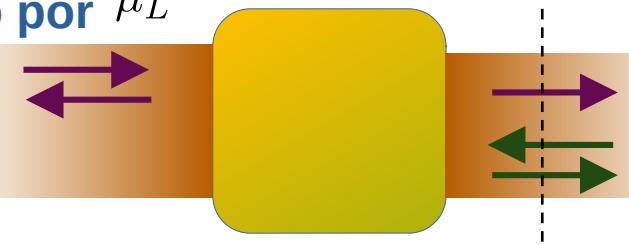


$$|\Psi_{-,\gamma}\rangle = \begin{cases} \sum_{\alpha} t_{\alpha\gamma}^{L\leftarrow R} |\Psi_{L,-,\alpha}\rangle & , \text{contacto esquerdo} \\ ? & , \text{região central} \\ |\Psi_{R,-,\gamma}\rangle + \sum_{\delta} r_{\delta\gamma}^{L\leftarrow R} |\Psi_{R,+,\delta}\rangle & , \text{contacto direito} \end{cases}$$



Cálculo da corrente

Assumimos que ocupação de estados $|\Psi_{+,\alpha}\rangle$ é controlado por μ_L

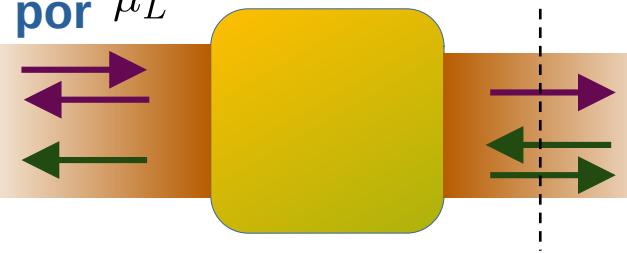


Cálculo da corrente

Assumimos que ocupação de estados $|\Psi_{+, \alpha}\rangle$ é controlado por μ_L

Corrente devido a estado $|\Psi_{+, \alpha}\rangle$

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{+, \alpha} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{+, \alpha} \rangle = \\ &= \sum_{\gamma, \delta} (t_{\gamma \alpha}^{R \leftarrow L})^* \langle \Psi_{R, +, \gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{R, +, \delta} \rangle t_{\delta \alpha}^{R \leftarrow L} \\ &= \sum_{\gamma} v_{R, \gamma} |t_{\gamma \alpha}^{R \leftarrow L}|^2 \end{aligned}$$



Cálculo da corrente

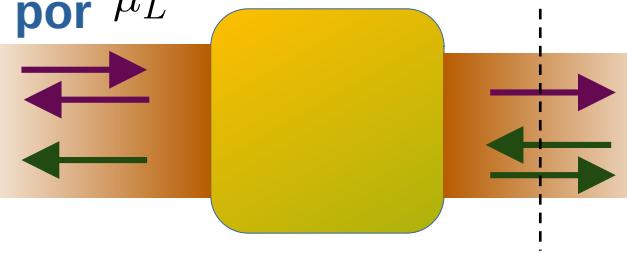
Assumimos que ocupação de estados $|\Psi_{+,\alpha}\rangle$ é controlado por μ_L

Corrente devido a estado $|\Psi_{+,\alpha}\rangle$

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{+,\alpha} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{+,\alpha} \rangle = \\ &= \sum_{\gamma,\delta} (t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L})^* \langle \Psi_{R,+,\gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{R,+\delta} \rangle t_{\delta\alpha}^{R \leftarrow L} \\ &= \sum_{\gamma} v_{R,\gamma} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 \end{aligned}$$

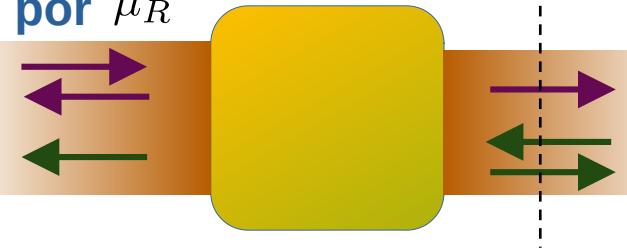
Somando sobre todos os estados $|\Psi_{+,\alpha}\rangle$:

$$\begin{aligned} I_{L \rightarrow R}^+ &= \sum_{\alpha} \int \frac{dk}{2\pi} f_L(E) \langle \Psi_{+,\alpha} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{+,\alpha} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \right)^{-1} f_L(E) \sum_{\gamma} v_{R,\gamma} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} f_L(E) \sum_{\alpha,\gamma} \frac{v_{R,\gamma}}{v_{L,\alpha}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 \end{aligned}$$



Cálculo da corrente

Assumimos que ocupação de estados $|\Psi_{-, \gamma}\rangle$ é controlado por μ_R



Cálculo da corrente

Assumimos que ocupação de estados $|\Psi_{-, \gamma}\rangle$ é controlado por μ_R

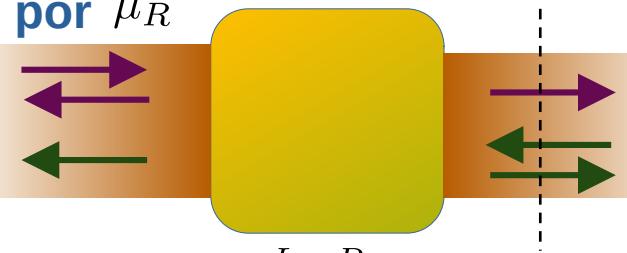
Corrente devido a estado $|\Psi_{-, \gamma}\rangle$

$$\langle \Psi_{-, \gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{-, \gamma} \rangle =$$

$$= \langle \Psi_{L, -, \gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{L, -, \gamma} \rangle + \sum_{\delta, \mu} (r_{\delta \gamma}^{L \leftarrow R})^* \langle \Psi_{R, +, \delta} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{R, +, \mu} \rangle r_{\mu \gamma}^{L \leftarrow R}$$

$$= -v_{R, \gamma} + \sum_{\delta} v_{R, \delta} |r_{\delta \gamma}^{L \leftarrow R}|^2$$

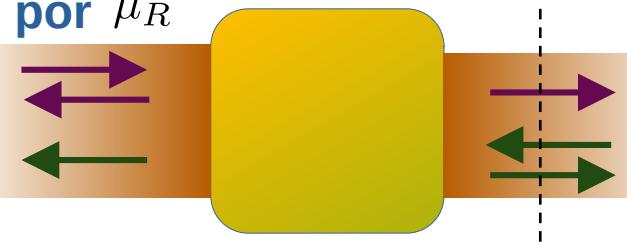
$$= - \sum_{\alpha} v_{L, \alpha} |t_{\alpha \gamma}^{L \leftarrow R}|^2$$



Cálculo da corrente

Assumimos que ocupação de estados $|\Psi_{-, \gamma}\rangle$ é controlado por μ_R

Corrente devido a estado $|\Psi_{-, \gamma}\rangle$



$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi_{-, \gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{-, \gamma} \rangle = \\
 &= \langle \Psi_{L, -, \gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{L, -, \gamma} \rangle + \sum_{\delta, \mu} (r_{\delta \gamma}^{L \leftarrow R})^* \langle \Psi_{R, +, \delta} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{R, +, \mu} \rangle r_{\mu \gamma}^{L \leftarrow R} \\
 &= -v_{R, \gamma} + \sum_{\delta} v_{R, \delta} |r_{\delta \gamma}^{L \leftarrow R}|^2 \\
 &= -\sum_{\alpha} v_{L, \alpha} |t_{\alpha \gamma}^{L \leftarrow R}|^2
 \end{aligned}$$

Somando sobre todos os estados $|\Psi_{-, \gamma}\rangle$:

$$\begin{aligned}
 I_{L \rightarrow R}^- &= \sum_{\gamma} \int \frac{dk}{2\pi} f_R(E) \langle \Psi_{-, \gamma} | I_{N+1 \rightarrow N+2} | \Psi_{-, \gamma} \rangle \\
 &= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} f_L(E) \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{L, \alpha}}{v_{R, \gamma}} |t_{\alpha \gamma}^{L \leftarrow R}|^2
 \end{aligned}$$

Fórmula de Landauer-Büttiker

A corrente total é então dada por

$$\begin{aligned} I_{L \rightarrow R}^e &= -\frac{e}{\hbar} (I_{L \rightarrow R}^+ + I_{L \rightarrow R}^-) \\ &= -\frac{e}{\hbar} \sum_{\alpha, \gamma} \int \frac{dE}{2\pi} \left(f_L(E) \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 - f_R(E) \frac{v_{\alpha, L}}{v_{\gamma, R}} |t_{\alpha\gamma}^{L \leftarrow R}|^2 \right) \end{aligned}$$

Fórmula de Landauer-Büttiker

A corrente total é então dada por

$$\begin{aligned} I_{L \rightarrow R}^e &= -\frac{e}{\hbar} (I_{L \rightarrow R}^+ + I_{L \rightarrow R}^-) \\ &= -\frac{e}{\hbar} \sum_{\alpha, \gamma} \int \frac{dE}{2\pi} \left(f_L(E) \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma \alpha}^{R \leftarrow L}|^2 - f_R(E) \frac{v_{\alpha, L}}{v_{\gamma, R}} |t_{\alpha \gamma}^{L \leftarrow R}|^2 \right) \end{aligned}$$

Notando que em equilíbrio, $f_L(E) = f_R(E)$, temos $I_{L \rightarrow R}^e = 0$, concluímos que:

$$\sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{R, \gamma}}{v_{L, \alpha}} |t_{\gamma \alpha}^{R \leftarrow L}|^2 = \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{L, \alpha}}{v_{R, \gamma}} |t_{\alpha \gamma}^{L \leftarrow R}|^2$$

Fórmula de Landauer-Büttiker

A corrente total é então dada por

$$\begin{aligned} I_{L \rightarrow R}^e &= -\frac{e}{\hbar} (I_{L \rightarrow R}^+ + I_{L \rightarrow R}^-) \\ &= -\frac{e}{\hbar} \sum_{\alpha, \gamma} \int \frac{dE}{2\pi} \left(f_L(E) \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 - f_R(E) \frac{v_{\alpha, L}}{v_{\gamma, R}} |t_{\alpha\gamma}^{L \leftarrow R}|^2 \right) \end{aligned}$$

Notando que em equilíbrio, $f_L(E) = f_R(E)$, temos $I_{L \rightarrow R}^e = 0$, concluímos que:

$$\sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{R, \gamma}}{v_{L, \alpha}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 = \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{L, \alpha}}{v_{R, \gamma}} |t_{\alpha\gamma}^{L \leftarrow R}|^2$$

Fórmula de Landauer-Büttiker:

$$I_{L \rightarrow R} = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} (f_L(E) - f_R(E)) \sum_{\alpha, \gamma} \frac{v_{\gamma, R}}{v_{\alpha, L}} |t_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2$$

Como calcular coeficientes de transmissão?

Para calcular estados de espalhamento temos de resolver a equação:

$$\left[\begin{array}{ccccccccc} \ddots & & \ddots & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & (\mathbf{h}_L - E) & \mathbf{v}_L & & & & & \\ & & \mathbf{v}_L^\dagger & (\mathbf{h}_L - E) & \mathbf{v}_{0,1} & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & \mathbf{v}_{1,0} & (\mathbf{h}_1 - E) & \ddots & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & (\mathbf{h}_N - E) & \mathbf{v}_{N,N+1} & \\ & & & & & & \mathbf{v}_{N+1,N} & (\mathbf{h}_R - E) & \mathbf{v}_R \\ & & & & & & & \mathbf{v}_R^\dagger & (\mathbf{h}_R - E) \\ & & & & & & & & \ddots \end{array} \right] \begin{bmatrix} \vdots \\ \Psi(-1) \\ \Psi(0) \\ \Psi(1) \\ \vdots \\ \Psi(N) \\ \Psi(N+1) \\ \Psi(N+2) \\ \vdots \end{bmatrix} = 0(0)$$

Matriz infinita!

Mas sabemos a forma que os estados têm nos contactos

Como calcular coefficients de transmissão?

No sítio $n=0$, escrevemos a função de onda = **onda incidente + onda reflectida**:

$$\Psi(0) = \Psi_{\text{in}}(0) + \Psi_{\text{out}}(0)$$

Como calcular coefficients de transmissão?

No sítio $n=0$, escrevemos a função de onda = **onda incidente + onda reflectida**:

$$\Psi(0) = \Psi_{\text{in}}(0) + \Psi_{\text{out}}(0)$$

Para outro sítio no contacto, sabemos qual a forma da função de onda

$$\begin{aligned}\Psi_s(n) &= \sum_{\alpha} \Psi_{L,s,\alpha} \lambda_{L,s,\alpha}^n \left(\Psi_{L,s,\alpha}^{-1} \cdot \Psi_s(0) \right) \\ &= \begin{bmatrix} \Psi_{L,s,1} & \Psi_{L,s,2} & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{L,s,1}^n & & & \\ & \lambda_{L,s,2}^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{L,s,1}^{-1} \\ \Psi_{L,s,2}^{-1} \\ \vdots \end{bmatrix} \Psi_s(0) \\ &= \mathbf{F}_{L,s}^n \cdot \Psi_s(0)\end{aligned}$$

$s = \text{in, out}$

Como calcular coefficients de transmissão?

No sítio $n=0$, escrevemos a função de onda = **onda incidente + onda reflectida**:

$$\Psi(0) = \Psi_{\text{in}}(0) + \Psi_{\text{out}}(0)$$

Para outro sítio no contacto, sabemos qual a forma da função de onda

$$\begin{aligned}\Psi_s(n) &= \sum_{\alpha} \Psi_{L,s,\alpha} \lambda_{L,s,\alpha}^n \left(\Psi_{L,s,\alpha}^{-1} \cdot \Psi_s(0) \right) \\ &= \begin{bmatrix} \Psi_{L,s,1} & \Psi_{L,s,2} & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{L,s,1}^n & & & \\ & \lambda_{L,s,2}^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{L,s,1}^{-1} \\ \Psi_{L,s,2}^{-1} \\ \vdots \end{bmatrix} \Psi_s(0) \\ &= \mathbf{F}_{L,s}^n \cdot \Psi_s(0)\end{aligned}\quad s = \text{in, out}$$

$$\mathbf{F}_{L,s}^n = \boldsymbol{\Psi}_{L,s} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,s}^n \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,s}^{-1}$$

Como calcular coeficientes de transmissão?

Olhemos para a equação para sítio n=0

$$(E - \mathbf{h}_L) \Psi(0) - \mathbf{v}_L \Psi(1) - \mathbf{v}_L^\dagger \Psi(-1) = 0$$

Como calcular coefficients de transmissão?

Olhemos para a equação para sítio n=0

$$(E - \mathbf{h}_L) \Psi(0) - \mathbf{v}_L \Psi(1) - \mathbf{v}_L^\dagger \Psi(-1) = 0$$

Usando o resultado anterior, podemos escrever:

$$\begin{aligned}\Psi(-1) &= \Psi_{\text{in}}(-1) + \Psi_{\text{out}}(-1) \\ &= \mathbf{F}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{\text{in}}(0) + \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} \cdot \Psi_{\text{out}}(0) \\ &= \mathbf{F}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{\text{in}}(0) + \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} \cdot [\Psi(0) - \Psi_{\text{in}}(0)]\end{aligned}$$

Como calcular coefficients de transmissão?

Olhemos para a equação para sítio n=0

$$(E - \mathbf{h}_L) \Psi(0) - \mathbf{v}_L \Psi(1) - \mathbf{v}_L^\dagger \Psi(-1) = 0$$

Usando o resultado anterior, podemos escrever:

$$\begin{aligned}\Psi(-1) &= \Psi_{\text{in}}(-1) + \Psi_{\text{out}}(-1) \\ &= \mathbf{F}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{\text{in}}(0) + \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} \cdot \Psi_{\text{out}}(0) \\ &= \mathbf{F}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{\text{in}}(0) + \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} \cdot [\Psi(0) - \Psi_{\text{in}}(0)]\end{aligned}$$

Inserindo na equação para n=0:

$$\left(E - \mathbf{h}_L - \mathbf{v}_L^\dagger \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} \right) \Psi(0) - \mathbf{v}_L \Psi(1) = \left[\mathbf{v}_L^\dagger \mathbf{F}_{L,\text{in}}^{-1} - \mathbf{v}_L^\dagger \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} \right] \cdot \Psi_{\text{in}}(0)$$

Como calcular coeficientes de transmissão?

Olhemos para a equação para sítio $n=N+1$

$$(E - \hbar_R) \Psi(N + 1) - v_R \Psi(N + 2) - v_R^\dagger \Psi(N) = 0$$

Como calcular coefficients de transmissão?

Olhemos para a equação para sítio $n=N+1$

$$(E - \hbar_R) \Psi(N + 1) - v_R \Psi(N + 2) - v_R^\dagger \Psi(N) = 0$$

No contacto direito, temos uma onda transmitida:

$$\Psi(N + 2) = \Psi_{\text{out}}(N + 2) = F_{R,\text{out}} \cdot \Psi(N + 1)$$

Como calcular coeficientes de transmissão?

Olhemos para a equação para sítio $n=N+1$

$$(E - \mathbf{h}_R) \Psi(N + 1) - \mathbf{v}_R \Psi(N + 2) - \mathbf{v}_R^\dagger \Psi(N) = 0$$

No contacto direito, temos uma onda transmitida:

$$\Psi(N + 2) = \Psi_{\text{out}}(N + 2) = \mathbf{F}_{R,\text{out}} \cdot \Psi(N + 1)$$

Inserindo na equação para $n=N+1$:

$$(E - \mathbf{h}_R - \mathbf{v}_R \mathbf{F}_{R,\text{out}}) \Psi(N + 1) - \mathbf{v}_R^\dagger \Psi(N) = 0$$

Como calcular coefficients de transmissão?

O problema fica reduzido a um sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} (E - \mathbf{h}_L - \Sigma_L^R) & -\mathbf{v}_{0,1} \\ -\mathbf{v}_{1,0} & (E - \mathbf{h}_1) & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & \ddots & (E - \mathbf{h}_N) & -\mathbf{v}_{N,N+1} \\ & -\mathbf{v}_{N+1,N} & & (E - \mathbf{h}_R - \Sigma_R^R) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi(0) \\ \Psi(1) \\ \vdots \\ \Psi(N) \\ \Psi(N+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i\Gamma_L \cdot \Psi_{\text{in}}(0) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Onde:

$$\Sigma_L^R = \mathbf{v}_L^\dagger \mathbf{F}_{L,\text{out}}^{-1} = \mathbf{v}_L^\dagger \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{out}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{out}}^{-1}$$

$$\Sigma_L^A = \mathbf{v}_L^\dagger \mathbf{F}_{L,\text{in}}^{-1} = \mathbf{v}_L^\dagger \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_L = i [\Sigma_L^R - \Sigma_L^A]$$

$$\Sigma_R^R = \mathbf{v}_R \mathbf{F}_{R,\text{out}} = \mathbf{v}_R \boldsymbol{\Psi}_{R,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{R,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{R,\text{out}}^{-1}$$

Como calcular coeficientes de transmissão?

Escolhendo a onda incidente como: $\Psi_{\text{in}}(0) = \Psi_{L,\text{in},\alpha}$

O coeficiente de transmissão é dado por:

$$\begin{aligned} t_{\gamma\alpha}^{R\leftarrow L} &= \Psi_{R,\text{out},\gamma}^{-1} \cdot \Psi(N+1) \\ &= i\Psi_{R,\text{out},\gamma}^{-1} \cdot \mathbf{G}^R(N+1, 0) \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \Psi_{L,\text{in},\alpha} \end{aligned}$$

Onde definimos:

$$\mathbf{G}^R = \begin{bmatrix} (E - \mathbf{h}_L - \boldsymbol{\Sigma}_L^R) & -\mathbf{v}_{0,1} & & & & \\ -\mathbf{v}_{1,0} & (E - \mathbf{h}_1) & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & (E - \mathbf{h}_N) & -\mathbf{v}_{N,N+1} & \\ & & & -\mathbf{v}_{N+1,N} & (E - \mathbf{h}_R - \boldsymbol{\Sigma}_R^R) & \end{bmatrix}^{-1}$$

Matriz Γ e operador de corrente

Vamos agora ver que a matriz Γ é na realidade o operador corrente.

Para isso vamos começar por verificar que $(\Sigma_L^R)^\dagger = \Sigma_L^A$

$$\begin{aligned} & (\Sigma_L^R)^\dagger - \Sigma_L^A = \\ &= [\Psi_{L,\text{out}}^\dagger]^\dagger [\Lambda_{L,\text{out}}^\dagger]^{-1} \Psi_{L,\text{out}}^\dagger \mathbf{v}_L - \mathbf{v}_L^\dagger \Psi_{L,\text{in}} \cdot \Lambda_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= [\Psi_{L,\text{out}}^\dagger]^\dagger [\Lambda_{L,\text{out}}^\dagger]^{-1} \left(\Psi_{L,\text{out}}^\dagger \cdot \mathbf{v}_L \cdot \Psi_{L,\text{in}} \cdot \Lambda_{L,\text{in}} - \Lambda_{L,\text{out}}^\dagger \cdot \Psi_{L,\text{out}}^\dagger \cdot \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \Psi_{L,\text{in}} \right) \Lambda_{L,\text{in}}^{-1} \Psi_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= -i [\Psi_{L,\text{out}}^\dagger]^\dagger \cdot [\Lambda_{L,\text{out}}^\dagger]^{-1} \cdot \mathbf{V}_{\text{out,in}} \cdot \Lambda_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{L,\text{in}}^{-1} \end{aligned}$$

Matriz Γ e operador de corrente

Vamos agora ver que a matriz Γ é na realidade o operador corrente.

Para isso vamos começar por verificar que $(\Sigma_L^R)^\dagger = \Sigma_L^A$

$$\begin{aligned} & (\Sigma_L^R)^\dagger - \Sigma_L^A = \\ &= [\Psi_{L,\text{out}}^\dagger]^\dagger [\Lambda_{L,\text{out}}^\dagger]^{-1} \Psi_{L,\text{out}}^\dagger \mathbf{v}_L - \mathbf{v}_L^\dagger \Psi_{L,\text{in}} \cdot \Lambda_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= [\Psi_{L,\text{out}}^\dagger]^\dagger [\Lambda_{L,\text{out}}^\dagger]^{-1} \left(\Psi_{L,\text{out}}^\dagger \cdot \mathbf{v}_L \cdot \Psi_{L,\text{in}} \cdot \Lambda_{L,\text{in}} - \Lambda_{L,\text{out}}^\dagger \cdot \Psi_{L,\text{out}}^\dagger \cdot \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \Psi_{L,\text{in}} \right) \Lambda_{L,\text{in}}^{-1} \Psi_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= -i [\Psi_{L,\text{out}}^\dagger]^\dagger \cdot [\Lambda_{L,\text{out}}^\dagger]^{-1} \cdot \mathbf{V}_{\text{out,in}} \cdot \Lambda_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \Psi_{L,\text{in}}^{-1} \end{aligned}$$

Onde:

$$V_{\text{out},\alpha;\text{in},\beta} = i \Psi_{L,\text{out},\alpha}^\dagger \cdot \left(\mathbf{v}_L \lambda_{L,\text{in},\beta} - \lambda_{L,\text{out},\alpha}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \cdot \Psi_{L,\text{in},\beta} = 0(0)$$

Elemento de matriz do operador corrente para estados contra-propagantes!

Matriz Γ e operador de corrente

Podemos então escrever:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Gamma}_L &= i [\boldsymbol{\Sigma}_L^R - \boldsymbol{\Sigma}_L^A] \\ &= i \left([\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L - \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} \right) \\ &= [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot i \left(\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}} - \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \right) \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \mathbf{V}_L \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1}\end{aligned}$$

Matriz Γ e operador de corrente

Podemos então escrever:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Gamma}_L &= i [\boldsymbol{\Sigma}_L^R - \boldsymbol{\Sigma}_L^A] \\ &= i \left([\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L - \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} \right) \\ &= [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot i \left(\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}} - \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \right) \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \mathbf{V}_L \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1}\end{aligned}$$

Identificamos os elementos de matriz do operador corrente:

$$\mathbf{V}_{L,\alpha\beta} = i \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in},\alpha}^\dagger \left(\mathbf{v}_L \lambda_{L,\text{in},\beta} - \lambda_{L,\text{in},\alpha}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in},\beta} = v_{L,\alpha} \delta_{\alpha\beta}$$

Matriz Γ e operador de corrente

Podemos então escrever:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Gamma}_L &= i [\boldsymbol{\Sigma}_L^R - \boldsymbol{\Sigma}_L^A] \\ &= i \left([\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L - \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} \right) \\ &= [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot i \left(\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}} - \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \mathbf{v}_L^\dagger \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}} \right) \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} \\ &= [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot [\boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \mathbf{V}_L \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{L,\text{in}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1}\end{aligned}$$

Identificamos os elementos de matriz do operador corrente:

$$\mathbf{V}_{L,\alpha\beta} = i \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in},\alpha}^\dagger \left(\mathbf{v}_L \lambda_{L,\text{in},\beta} - \lambda_{L,\text{in},\alpha}^* \mathbf{v}_L^\dagger \right) \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in},\beta} = v_{L,\alpha} \delta_{\alpha\beta}$$

Como para estados propagantes, $v_{L,\alpha} \neq 0$, temos que $|\lambda_{L,\text{in},\alpha}|^2 = 1$, podemos escrever:

$$\boldsymbol{\Gamma}_L = [\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger]^{-1} \cdot \mathbf{V}_L \cdot \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1}$$

$$\boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^{-1} = \mathbf{V}_L^{-1} \boldsymbol{\Psi}_{L,\text{in}}^\dagger \boldsymbol{\Gamma}_L$$

Relação de Fisher-Lee

De igual forma, podemos escrever:

$$\Psi_{R,\text{out}}^{-1} = V_R^{-1} \Psi_{R,\text{out}}^\dagger \Gamma_R$$

O que nos permite escrever o coeficiente the transmissão como:

$$\begin{aligned}\tilde{t}_{\gamma\alpha}^{R\leftarrow L} &= \sqrt{\frac{v_{R,\gamma}}{v_{L,\alpha}}} t_{\gamma\alpha}^{R\leftarrow L} \\ &= \sqrt{\frac{v_{R,\gamma}}{v_{L,\alpha}}} i \Psi_{R,\text{out},\gamma}^{-1} \cdot \mathbf{G}^R(N+1,0) \cdot \Gamma_L \cdot \Psi_{L,\text{in},\alpha} \\ &= \frac{i}{\sqrt{v_{R,\gamma} v_{L,\alpha}}} \Psi_{R,\text{out},\gamma}^\dagger \cdot \Gamma_R \cdot \mathbf{G}^R(N+1,0) \cdot \Gamma_L \cdot \Psi_{L,\text{in},\alpha}\end{aligned}$$

Transmitância usando a relação de Fisher-Lee

Usando a relação de Fisher-Lee

$$\tilde{t}_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L} = \frac{i}{\sqrt{v_{R,\gamma} v_{L,\alpha}}} \Psi_{R,\text{out},\gamma}^\dagger \cdot \Gamma_R \cdot \mathbf{G}^R(N+1,0) \cdot \Gamma_L \cdot \Psi_{L,\text{in},\alpha}$$

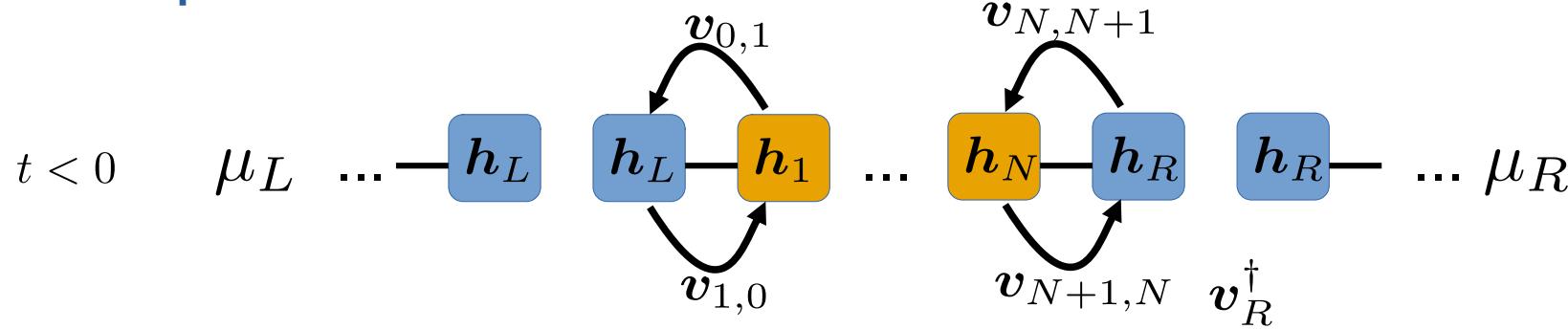
A transmitância no formalismo de Landauer-Büttiker, pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(E) &= \sum_{\gamma,\alpha} |\tilde{t}_{\gamma\alpha}^{R \leftarrow L}|^2 \\ &= \sum_{\gamma,\alpha} \left| \frac{i}{\sqrt{v_{R,\gamma} v_{L,\alpha}}} \Psi_{R,\text{out},\gamma}^\dagger \cdot \Gamma_R \cdot \mathbf{G}^R \cdot \Gamma_L \cdot \Psi_{L,\text{in},\alpha} \right|^2 \\ &= \sum_{\gamma,\alpha} \frac{1}{v_{R,\gamma} v_{L,\alpha}} \Psi_{R,\text{out},\gamma}^\dagger \cdot \Gamma_R \cdot \mathbf{G}^R \cdot \Gamma_L \cdot \Psi_{L,\text{in},\alpha} \Psi_{L,\text{in},\alpha}^\dagger \cdot \Gamma_L \cdot \mathbf{G}^A \cdot \Gamma_R \cdot \Psi_{R,\text{out},\gamma} \\ &= \text{Tr} \left[\Gamma_R \cdot \Psi_{R,\text{out}} \frac{1}{V_R} \Psi_{R,\text{out}}^\dagger \cdot \Gamma_R \cdot \mathbf{G}^R \cdot \Gamma_L \cdot \Psi_{L,\text{in}} \frac{1}{V_L} \Psi_{L,\text{in}}^\dagger \cdot \Gamma_L \cdot \mathbf{G}^A \right] \\ &= \text{Tr} [\Gamma_R \cdot \mathbf{G}^R \cdot \Gamma_L \cdot \mathbf{G}^A]\end{aligned}$$

Formalismo de Caroli

Queremos calcular a corrente após ligar os contactos ao dispositivo central

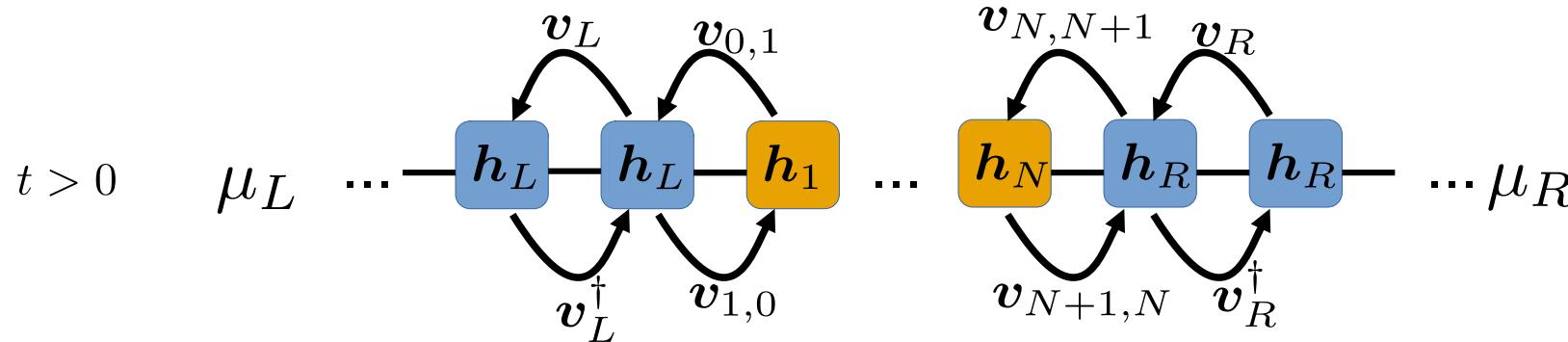
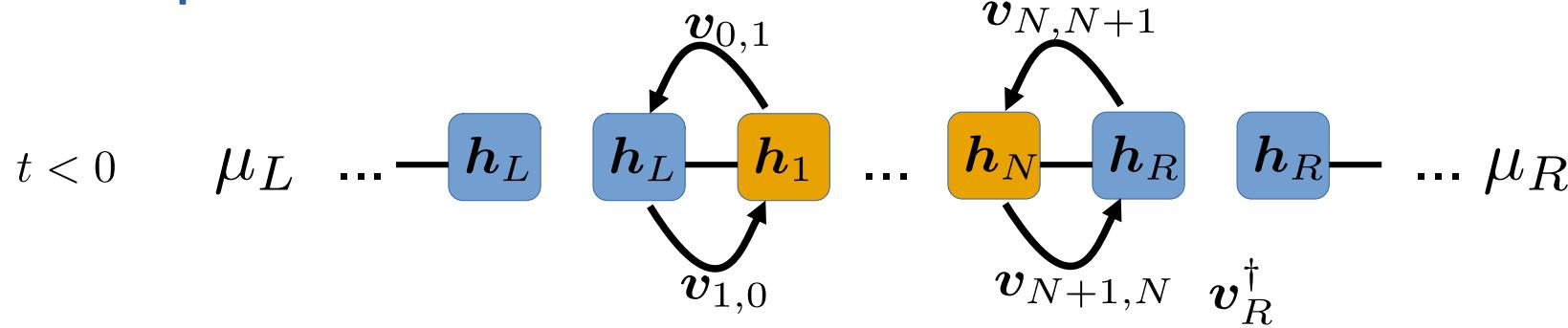
Sistema particionado:



Formalismo de Caroli

Queremos calcular a corrente após ligar os contactos ao dispositivo central

Sistema particionado:



Sistema particionado

Para $t < 0$, o sistema é governado pelo Hamiltoniano:

$$H_0 = \begin{bmatrix} H_L & 0 & 0 \\ 0 & H_C & 0 \\ 0 & 0 & H_R \end{bmatrix}$$

Sistema particionado

Para $t < 0$, o sistema é governado pelo Hamiltoniano:

$$H_0 = \begin{bmatrix} H_L & 0 & 0 \\ 0 & H_C & 0 \\ 0 & 0 & H_R \end{bmatrix}$$

E o **estado inicial** é descrito pela matriz de densidade:

$$\rho(0) = \rho_L(0) \otimes \rho_C(0) \otimes \rho_R(0)$$

Cada parte do sistema tri-partido está em **equilíbrio termodinâmico (local)**:

$$\rho_\ell(0) = \frac{e^{-\beta_\ell(H_\ell - \mu_\ell N_\ell)}}{\text{Tr} [e^{-\beta(H_\ell - \mu_\ell N_\ell)}]}$$

Sistema particionado

Para $t < 0$, o sistema é governado pelo Hamiltoniano:

$$\mathbf{H}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_L & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_C & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{H}_R \end{bmatrix}$$

E o **estado inicial** é descrito pela matriz de densidade:

$$\rho(0) = \rho_L(0) \otimes \rho_C(0) \otimes \rho_R(0)$$

Cada parte do sistema tri-partido está em **equilíbrio termodinâmico (local)**:

$$\rho_\ell(0) = \frac{e^{-\beta_\ell(H_\ell - \mu_\ell N_\ell)}}{\text{Tr} [e^{-\beta(H_\ell - \mu_\ell N_\ell)}]}$$

Para $t > 0$, os contactos são ligados e temos o Hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_L & \mathbf{V}_{L,C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{V}_{C,L} & \mathbf{H}_C & \mathbf{V}_{C,R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_{R,C} & \mathbf{H}_R \end{bmatrix}$$

Valor esperado do operador corrente

Em segunda quantização, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = [C_L^\dagger \quad C_C^\dagger \quad C_R^\dagger] \begin{bmatrix} \mathbf{H}_L & \mathbf{V}_{L,C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{V}_{C,L} & \mathbf{H}_C & \mathbf{V}_{C,R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_{R,C} & \mathbf{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_L \\ C_C \\ C_R \end{bmatrix}$$

Valor esperado do operador corrente

Em segunda quantização, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = [C_L^\dagger \quad C_C^\dagger \quad C_R^\dagger] \begin{bmatrix} \mathbf{H}_L & \mathbf{V}_{L,C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{V}_{C,L} & \mathbf{H}_C & \mathbf{V}_{C,R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_{R,C} & \mathbf{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_L \\ C_C \\ C_R \end{bmatrix}$$

E o operador de corrente é dado por

$$I_{C \rightarrow R} = \frac{i}{\hbar} \left(C_C^\dagger \cdot \mathbf{V}_{C,R} \cdot C_R - C_R^\dagger \cdot \mathbf{V}_{R,C} \cdot C_C \right)$$

Valor esperado do operador corrente

Em segunda quantização, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = [C_L^\dagger \quad C_C^\dagger \quad C_R^\dagger] \begin{bmatrix} \mathbf{H}_L & \mathbf{V}_{L,C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{V}_{C,L} & \mathbf{H}_C & \mathbf{V}_{C,R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_{R,C} & \mathbf{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_L \\ C_C \\ C_R \end{bmatrix}$$

E o operador de corrente é dado por

$$I_{C \rightarrow R} = \frac{i}{\hbar} \left(C_C^\dagger \cdot \mathbf{V}_{C,R} \cdot C_R - C_R^\dagger \cdot \mathbf{V}_{R,C} \cdot C_C \right)$$

O nosso **objectivo** é calcular:

$$\langle I_{C \rightarrow R} \rangle (t) = \frac{i}{\hbar} \left(\left\langle \hat{C}_C^\dagger(t) \cdot \mathbf{V}_{C,R} \cdot \hat{C}_R(t) \right\rangle - \left\langle \hat{C}_R^\dagger(t) \cdot \mathbf{V}_{R,C} \cdot \hat{C}_C(t) \right\rangle \right)$$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Queremos calcular o valor médio de um operador como função do tempo:

$$\langle O \rangle(t) = \text{Tr} [\rho(t)O] = \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)]$$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Queremos calcular o valor médio de um operador como função do tempo:

$$\langle O \rangle(t) = \text{Tr} [\rho(t)O] = \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)]$$

Onde o operador de evolução temporal obedece à equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,0) = H(t)U(t,0)$$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Queremos calcular o valor médio de um operador como função do tempo:

$$\langle O \rangle(t) = \text{Tr} [\rho(t)O] = \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)]$$

Onde o operador de evolução temporal obedece à equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,0) = H(t)U(t,0)$$

Vamos escrever $H(t) = H_0 + V(t)$ e tratar $V(t)$ como uma perturbação

Na representação de interação, escrevemos:

$$U(t,0) = U_0(t,0)S(t,0)$$

Operador de evolução livre: $U_0(t,0) = e^{-iH_0t/\hbar}$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Operador de evolução S obedece à equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, 0) = V_I(t)S(t, 0)$$

Operador na representação de interação: $V_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Operador de evolução S obedece à equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, 0) = V_I(t)S(t, 0)$$

Operador na representação de interação: $V_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}$

Solução formal: $S(t, 0) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 V_I(t_1)}$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n T [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)]$$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Operador de evolução S obedece à equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, 0) = V_I(t)S(t, 0)$$

Operador na representação de interação: $V_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}$

Solução formal: $S(t, 0) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 V_I(t_1)}$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n T [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)]$$

Para $S(0, t)$, temos que $S(0, t)S(t, 0) = 1$:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(0, t) = S(0, t)V_I(t)$$

Teoria de perturbações dependente do tempo

Operador de evolução S obedece à equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, 0) = V_I(t)S(t, 0)$$

Operador na representação de interação: $V_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}$

Solução formal: $S(t, 0) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 V_I(t_1)}$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n T [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)]$$

Para $S(0, t)$, temos que $S(0, t)S(t, 0) = 1$:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(0, t) = S(0, t)V_I(t)$$

Solução formal: $S(0, t) = \bar{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 V_I(t_1)}$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)]$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\langle O \rangle(t) = \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)]$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\begin{aligned}\langle O \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)U_0(0,t)OU_0(t,0)S(t,0)]\end{aligned}$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\begin{aligned}\langle O \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)U_0(0,t)OU_0(t,0)S(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)O_I(t)S(t,0)]\end{aligned}$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\begin{aligned}\langle O \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)U_0(0,t)OU_0(t,0)S(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)O_I(t)S(t,0)] \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{m!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_m \times \\ &\quad \times \langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0\end{aligned}$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\begin{aligned}\langle O \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)U_0(0,t)OU_0(t,0)S(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)O_I(t)S(t,0)] \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{m!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_m \times \\ &\quad \times \langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0\end{aligned}$$

Em 2^a quantização, todos os operadores são escritos à custa de operadores de **criação e destruição**.

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\begin{aligned}\langle O \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)U_0(0,t)OU_0(t,0)S(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)O_I(t)S(t,0)] \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{m!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_m \times \\ &\quad \times \langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0\end{aligned}$$

Em 2^a quantização, todos os operadores são escritos à custa de operadores de **criação e destruição**.

Para sistema não interactuante, valores médios podem ser calculados usando **Teorema de Wick/Gaudin**

Introdução ao formalismo de Keldysh

Voltanto ao cálculo do valor médio

$$\begin{aligned}\langle O \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(0)U(0,t)OU(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)U_0(0,t)OU_0(t,0)S(t,0)] \\ &= \text{Tr} [\rho(0)S(0,t)O_I(t)S(t,0)] \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{m!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_m \times \\ &\quad \times \langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0\end{aligned}$$

Em 2^a quantização, todos os operadores são escritos à custa de operadores de **criação e destruição**.

Para sistema não interactuante, valores médios podem ser calculados usando **Teorema de Wick/Gaudin**

Exemplo: $\langle c_1^\dagger c_2 c_3 c_4^\dagger \rangle_0 = \langle c_1^\dagger c_2 \rangle_0 \langle c_3 c_4^\dagger \rangle_0 - \langle c_1^\dagger c_3 \rangle_0 \langle c_2 c_4^\dagger \rangle_0$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Ao aplicar teorema de Wick/Gaudin a um dos termos:

$$\langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Ao aplicar teorema de Wick/Gaudin a um dos termos:

$$\langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0$$

Vamos dar origem a factores da forma:

$$\left\langle T \left[c_a(t_1) c_b^\dagger(t_2) \right] \right\rangle_0 \equiv i\hbar g_{ab}^T(t_1, t_2) \quad \text{FG ordenada no tempo}$$

$$\left\langle \bar{T} \left[c_a(t_1) c_b^\dagger(t_2) \right] \right\rangle_0 \equiv i\hbar g_{ab}^{\bar{T}}(t_1, t_2) \quad \text{FG anti-ordenada no tempo}$$

$$\left\langle c_a(t_1) c_b^\dagger(t_2) \right\rangle_0 \equiv i\hbar g_{ab}^>(t_1, t_2) \quad \text{FG maior}$$

$$\left\langle c_b^\dagger(t_2) c_a(t_1) \right\rangle_0 \equiv -i\hbar g_{ab}^<(t_1, t_2) \quad \text{FG menor}$$

Introdução ao formalismo de Keldysh

Ao aplicar teorema de Wick/Gaudin a um dos termos:

$$\langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0$$

Vamos dar origem a factores da forma:

$$\left\langle T \left[c_a(t_1) c_b^\dagger(t_2) \right] \right\rangle_0 \equiv i\hbar g_{ab}^T(t_1, t_2) \quad \text{FG ordenada no tempo}$$

$$\left\langle \bar{T} \left[c_a(t_1) c_b^\dagger(t_2) \right] \right\rangle_0 \equiv i\hbar g_{ab}^{\bar{T}}(t_1, t_2) \quad \text{FG anti-ordenada no tempo}$$

$$\left\langle c_a(t_1) c_b^\dagger(t_2) \right\rangle_0 \equiv i\hbar g_{ab}^>(t_1, t_2) \quad \text{FG maior}$$

$$\left\langle c_b^\dagger(t_2) c_a(t_1) \right\rangle_0 \equiv -i\hbar g_{ab}^<(t_1, t_2) \quad \text{FG menor}$$

O **formalismo de Keldysh** permite **organizar** os diferentes termos que surgem.

Contorno de Keldysh

Olhando novamente para o termo

$$\langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0$$

Contorno de Keldysh

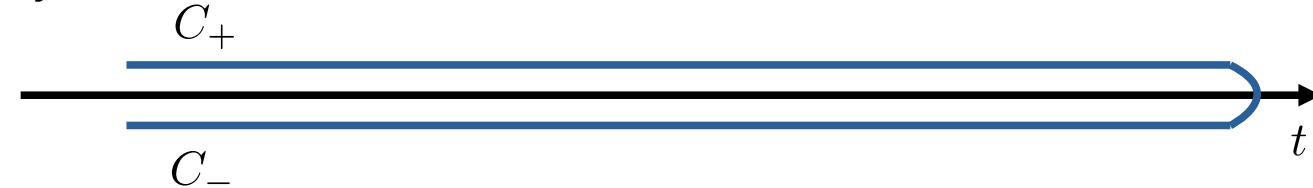


Contorno de Keldysh

Olhando novamente para o termo

$$\langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0$$

Contorno de Keldysh



Função de Green ordenada no contorno:

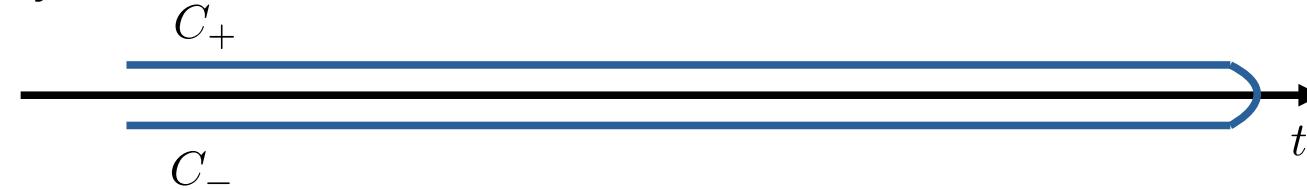
$$G_{ab}^C(s, s') = -\frac{i}{\hbar} \left\langle T_C \left[\hat{c}_a(s) \hat{c}_b^\dagger(s') \right] \right\rangle$$

Contorno de Keldysh

Olhando novamente para o termo

$$\langle \bar{T} [V_I(t_1) \dots V_I(t_n)] O_I(t) T [V_I(t_1) \dots V_I(t_m)] \rangle_0$$

Contorno de Keldysh



Função de Green ordenada no contorno:

$$G_{ab}^C(s, s') = -\frac{i}{\hbar} \left\langle T_C \left[\hat{c}_a(s) \hat{c}_b^\dagger(s') \right] \right\rangle$$

Contem todas as funções de Green introduzidas anteriormente:

$$G_{ab}^C(t_+, t'_+) = G_{ab}^T(t, t')$$

$$G_{ab}^C(t_-, t'_+) = G_{ab}^>(t, t')$$

$$G_{ab}^C(t_-, t'_-) = G_{ab}^{\bar{T}}(t, t')$$

$$G_{ab}^C(t_+, t'_-) = G_{ab}^<(t, t')$$

Teoria de perturbações no contorno

Se a perturbação é um operador de uma-partícula,
a FG obedece à **equação de Dyson** no contorno

$$G_{ab}^C(s, s') = g_{ab}^C(s, s') + \int_C ds_1 g_{ab}^C(s, s_1) V(s_1) g_{ab}^C(s_1, s')$$

Teoria de perturbações no contorno

Se a perturbação é um operador de uma-partícula,
a FG obedece à **equação de Dyson** no contorno

$$G_{ab}^C(s, s') = g_{ab}^C(s, s') + \int_C ds_1 g_{ab}^C(s, s_1) V(s_1) g_{ab}^C(s_1, s')$$

Notando que

$$\int_C ds_1 = \int_0^{+\infty} dt_{+,1} - \int_0^{+\infty} dt_{-,1}$$

E podemos escrever:

$$\begin{bmatrix} G_{ab}^T(t, t') & G_{ab}^<(t, t') \\ G_{ab}^>(t, t') & G_{ab}^T(t, t') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{ab}^T(t, t') & g_{ab}^<(t, t') \\ g_{ab}^>(t, t') & g_{ab}^T(t, t') \end{bmatrix} + \\ + \int dt_1 \begin{bmatrix} g_{ac}^T(t, t_1) & g_{ac}^<(t, t_1) \\ g_{ac}^>(t, t_1) & g_{ac}^T(t, t_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{cd}(t_1) & \\ & -V_{cd}(t_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{cb}^T(t_1, t') & G_{cb}^<(t_1, t') \\ G_{cb}^>(t_1, t') & G_{cb}^T(t_1, t') \end{bmatrix}$$

Regras de Langreth

Funções de Green não são todas independentes: $G^T + G^{\bar{T}} = G^> + G^<$

É útil introduzir novas funções de Green:

$$G_{ab}^R(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_a(t), \hat{c}_b^\dagger(t') \right\} \right\rangle = G^T - G^<$$

$$G_{ab}^A(t, t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t' - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_a(t), \hat{c}_b^\dagger(t') \right\} \right\rangle = G^T - G^>$$

Regras de Langreth

Funções de Green não são todas independentes: $G^T + G^{\bar{T}} = G^> + G^<$

É útil introduzir novas funções de Green:

$$G_{ab}^R(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_a(t), \hat{c}_b^\dagger(t') \right\} \right\rangle = G^T - G^<$$

$$G_{ab}^A(t, t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t' - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_a(t), \hat{c}_b^\dagger(t') \right\} \right\rangle = G^T - G^>$$

É possível reescrever equação de Dyson:

$$\begin{bmatrix} G_{ab}^R(t, t') & G_{ab}^<(t, t') \\ 0 & G_{ab}^A(t, t') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{ab}^R(t, t') & g_{ab}^<(t, t') \\ 0 & g_{ab}^A(t, t') \end{bmatrix} + \\ + \int dt_1 \begin{bmatrix} g_{ac}^R(t, t_1) & g_{ac}^<(t, t_1) \\ 0 & g_{ac}^A(t, t_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{cd}(t_1) & \\ & V_{cd}(t_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{cb}^R(t_1, t') & G_{cb}^<(t_1, t') \\ 0 & G_{cb}^A(t_1, t') \end{bmatrix}$$

Regras de Langreth

De onde obtemos:

$$\begin{aligned} G_{ab}^{R/A}(t, t') &= g_{ab}^{R/A}(t, t') + \int dt_1 g_{ac}^{R/A}(t, t_1) V_{cd}(t_1) G_{cb}^{R/A}(t_1, t') \\ G_{ab}^{\lessgtr}(t, t') &= g_{ab}^{\lessgtr}(t, t') + \int dt_1 g_{ac}^R(t, t_1) V_{cd}(t_1) G_{cb}^{\lessgtr}(t_1, t') \\ &\quad + \int dt_1 g_{ac}^{\lessgtr}(t, t_1) V_{cd}(t_1) G_{cb}^A(t_1, t') \end{aligned}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

O valor médio da corrente é dado por:

$$\begin{aligned}\langle I_{C \rightarrow R} \rangle(t) &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \hat{C}_C^\dagger(t) \cdot \mathbf{V}_{C,R} \cdot \hat{C}_R(t) \rangle - \langle \hat{C}_R^\dagger(t) \cdot \mathbf{V}_{R,C} \cdot \hat{C}_C(t) \rangle \right) \\ &= \text{tr} [\mathbf{V}_{C,R} \cdot \mathbf{G}_{R,C}^<(t,t)] - \text{tr} [\mathbf{V}_{R,C} \cdot \mathbf{G}_{C,R}^<(t,t)]\end{aligned}$$

Equação de Dyson:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{R,R} & \mathbf{G}_{R,C} & \mathbf{G}_{R,L} \\ \mathbf{G}_{C,R} & \mathbf{G}_{C,C} & \mathbf{G}_{C,L} \\ \mathbf{G}_{L,R} & \mathbf{G}_{L,C} & \mathbf{G}_{L,L} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{R,R} & & \\ & \mathbf{g}_{C,C} & \\ & & \mathbf{g}_{L,L} \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{R,R} & & \\ & \mathbf{g}_{C,C} & \\ & & \mathbf{g}_{L,L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{V}_{R,C} & 0 \\ \mathbf{V}_{C,R} & 0 & \mathbf{V}_{C,L} \\ 0 & \mathbf{V}_{L,C} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{R,R} & \mathbf{G}_{R,C} & \mathbf{G}_{R,L} \\ \mathbf{G}_{C,R} & \mathbf{G}_{C,C} & \mathbf{G}_{C,L} \\ \mathbf{G}_{L,R} & \mathbf{G}_{L,C} & \mathbf{G}_{L,L} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

Da equação de Dyson obtemos:

$$\mathbf{G}_{R,C} = \mathbf{g}_{R,R} \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}$$

$$\mathbf{G}_{L,C} = \mathbf{g}_{L,L} \mathbf{V}_{L,C} \mathbf{G}_{C,C}$$

$$\mathbf{G}_{C,C} = \mathbf{g}_{C,C} + \mathbf{g}_{C,C} \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{G}_{R,C} + \mathbf{g}_{C,C} \mathbf{V}_{C,L} \mathbf{G}_{L,C}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

Da equação de Dyson obtemos:

$$\mathbf{G}_{R,C} = \mathbf{g}_{R,R} \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}$$

$$\mathbf{G}_{L,C} = \mathbf{g}_{L,L} \mathbf{V}_{L,C} \mathbf{G}_{C,C}$$

$$\mathbf{G}_{C,C} = \mathbf{g}_{C,C} + \mathbf{g}_{C,C} \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{G}_{R,C} + \mathbf{g}_{C,C} \mathbf{V}_{C,L} \mathbf{G}_{L,C}$$

Combinando as 3 equações:

$$\mathbf{G}_{C,C} = \mathbf{g}_{C,C} + \mathbf{g}_{C,C} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{G}_{C,C}$$

Com a auto-energia:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}_R + \boldsymbol{\Sigma}_L$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_R = \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R} \mathbf{V}_{R,C}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_L = \mathbf{V}_{C,L} \mathbf{g}_{L,L} \mathbf{V}_{R,C}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

Da equação de Dyson obtemos:

$$\mathbf{G}_{R,C} = \mathbf{g}_{R,R} \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}$$

$$\mathbf{G}_{L,C} = \mathbf{g}_{L,L} \mathbf{V}_{L,C} \mathbf{G}_{C,C}$$

$$\mathbf{G}_{C,C} = \mathbf{g}_{C,C} + \mathbf{g}_{C,C} \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{G}_{R,C} + \mathbf{g}_{C,C} \mathbf{V}_{C,L} \mathbf{G}_{L,C}$$

Combinando as 3 equações:

$$\mathbf{G}_{C,C} = \mathbf{g}_{C,C} + \mathbf{g}_{C,C} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{G}_{C,C}$$

Com a auto-energia:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}_R + \boldsymbol{\Sigma}_L$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_R = \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R} \mathbf{V}_{R,C}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_L = \mathbf{V}_{C,L} \mathbf{g}_{L,L} \mathbf{V}_{R,C}$$

Uma equação de Dyson também permite escrever:

$$\mathbf{G}_{C,R} = \mathbf{G}_{C,C} \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

Usando as regras de Langreth:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{R,C}^< &= \mathbf{g}_{R,R}^R \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}^< + \mathbf{g}_{R,R}^< \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}^A \\ \mathbf{G}_{C,R}^< &= \mathbf{G}_{C,C}^R \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R}^< + \mathbf{G}_{C,C}^< \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R}^A\end{aligned}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

Usando as regras de Langreth:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{R,C}^< &= \mathbf{g}_{R,R}^R \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}^< + \mathbf{g}_{R,R}^< \mathbf{V}_{R,C} \mathbf{G}_{C,C}^A \\ \mathbf{G}_{C,R}^< &= \mathbf{G}_{C,C}^R \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R}^< + \mathbf{G}_{C,C}^< \mathbf{V}_{C,R} \mathbf{g}_{R,R}^A\end{aligned}$$

O que permite escrever:

$$\begin{aligned}\langle I_{C \rightarrow R} \rangle(t) &= \text{tr} [\mathbf{V}_{C,R} \cdot \mathbf{G}_{R,C}^<(t,t)] - \text{tr} [\mathbf{V}_{R,C} \cdot \mathbf{G}_{C,R}^<(t,t)] \\ &= \int dt_1 \text{Tr} [\boldsymbol{\Sigma}_R^R(t,t_1) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^<(t_1,t) + \boldsymbol{\Sigma}_R^<(t,t_1) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(t_1,t)] \\ &\quad - \int dt_1 \text{Tr} [\mathbf{G}_{C,C}^R(t,t_1) \cdot \boldsymbol{\Sigma}_R^<(t_1,t) + \mathbf{G}_{C,C}^<(t,t_1) \cdot \boldsymbol{\Sigma}_R^A(t_1,t)].\end{aligned}$$

Com as diferentes auto-energias:

$$\boldsymbol{\Sigma}_\ell^{R/A/<}(t,t') = \mathbf{V}_{C,\ell} \cdot \mathbf{g}_{\ell,\ell}^{R/A/<}(t,t') \cdot \mathbf{V}_{\ell,C}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

- No limite $t \rightarrow \infty$, e assumindo:
- perda de memória das condições iniciais
 - Regime estacionário é alcançado

Temos que: $G(t, t') \rightarrow G(t - t')$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

No limite $t \rightarrow \infty$, e assumindo:

- perda de memória das condições iniciais
- Regime estacionário é alcançado

Temos que: $G(t, t') \rightarrow G(t - t')$

Expressando todas as quantidades em termos de transformadas de Fourier:

$$\begin{aligned}\langle I_{C \rightarrow R} \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle I_{C \rightarrow R} \rangle (t) &= \frac{1}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} [\boldsymbol{\Sigma}_R^R(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^<(E) + \boldsymbol{\Sigma}_R^<(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(E)] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} [\mathbf{G}_{C,C}^R(E) \cdot \boldsymbol{\Sigma}_R^<(E) + \mathbf{G}_{C,C}^<(E) \cdot \boldsymbol{\Sigma}_R^A(E)]\end{aligned}$$

Formalismo de Keldysh aplicado ao cálculo de corrente

No limite $t \rightarrow \infty$, e assumindo:

- perda de memória das condições iniciais
- Regime estacionário é alcançado

Temos que: $G(t, t') \rightarrow G(t - t')$

Expressando todas as quantidades em termos de transformadas de Fourier:

$$\langle I_{C \rightarrow R} \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle I_{C \rightarrow R} \rangle (t) = \frac{1}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} [\Sigma_R^R(E) \cdot G_{C,C}^<(E) + \Sigma_R^<(E) \cdot G_{C,C}^A(E)] \\ - \frac{1}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} [G_{C,C}^R(E) \cdot \Sigma_R^<(E) + G_{C,C}^<(E) \cdot \Sigma_R^A(E)]$$

As diferentes funções de Green não perturbadas são dadas por:

$$g_{\ell,\ell}^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) e^{-i\mathbf{H}_\ell t/\hbar}$$

$$g_{\ell,\ell}^A(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(-t) e^{-i\mathbf{H}_\ell t/\hbar}$$

$$g_{\ell,\ell}^<(t) = \frac{i}{\hbar} f_\ell(\mathbf{H}_\ell) e^{-i\mathbf{H}_\ell t/\hbar}$$

$$g_{\ell,\ell}^>(t) = -\frac{i}{\hbar} [1 - f_\ell(\mathbf{H}_\ell)] e^{-i\mathbf{H}_\ell t/\hbar}$$



$$g_{\ell,\ell}^R(E) = [E + i0^+ - \mathbf{H}_\ell]^{-1}$$

$$g_{\ell,\ell}^A(E) = [E - i0^+ - \mathbf{H}_\ell]^{-1}$$

$$g_{\ell,\ell}^<(E) = i f_\ell(E) 2\pi \delta(E - \mathbf{H}_\ell)$$

$$g_{\ell,\ell}^>(E) = -i [1 - f_\ell(E)] 2\pi \delta(E - \mathbf{H}_\ell)$$

Fórmula de Caroli

Introduzindo: $\Gamma_\ell(E) = i [\Sigma_\ell^R(E) - \Sigma_\ell^A(E)] = 2\pi V_{C,\ell} \delta(E - H_\ell) V_{\ell,C}$

Fórmula de Caroli

Introduzindo: $\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E) = i [\boldsymbol{\Sigma}_\ell^R(E) - \boldsymbol{\Sigma}_\ell^A(E)] = 2\pi \mathbf{V}_{C,\ell} \delta(E - \mathbf{H}_\ell) \mathbf{V}_{\ell,C}$

E usando os seguintes resultados:

$$\boldsymbol{\Sigma}_\ell^<(E) = if(E)\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E)$$

$$\mathbf{G}_{C,C}^<(E) = \mathbf{G}_{C,C}^R(E) \cdot \boldsymbol{\Sigma}^<(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(E)$$

$$\mathbf{G}_{C,C}^{R/A}(E) = \left[\mathbf{g}_{C,C}^{R/A}(E) - \boldsymbol{\Sigma}^{R/A}(E) \right]^{-1}$$

$$i [\mathbf{G}_{C,C}^R(E) - \mathbf{G}_{C,C}^A(E)] = \mathbf{G}_{C,C}^R(E) \cdot \boldsymbol{\Gamma}(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(E)$$

Fórmula de Caroli

Introduzindo: $\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E) = i [\boldsymbol{\Sigma}_\ell^R(E) - \boldsymbol{\Sigma}_\ell^A(E)] = 2\pi \mathbf{V}_{C,\ell} \delta(E - \mathbf{H}_\ell) \mathbf{V}_{\ell,C}$

E usando os seguintes resultados:

$$\boldsymbol{\Sigma}_\ell^<(E) = if(E)\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E)$$

$$\mathbf{G}_{C,C}^<(E) = \mathbf{G}_{C,C}^R(E) \cdot \boldsymbol{\Sigma}^<(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(E)$$

$$\mathbf{G}_{C,C}^{R/A}(E) = \left[\mathbf{g}_{C,C}^{R/A}(E) - \boldsymbol{\Sigma}^{R/A}(E) \right]^{-1}$$

$$i [\mathbf{G}_{C,C}^R(E) - \mathbf{G}_{C,C}^A(E)] = \mathbf{G}_{C,C}^R(E) \cdot \boldsymbol{\Gamma}(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(E)$$

Obtemos a **Fórmula de Caroli**

$$I_{L \rightarrow R}^e = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} [f_L(E) - f_R(E)] \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^R(E) \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L(E) \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A(E)]$$

Landauer-Büttiker vs Caroli

Em ambos os formalismos:

$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R \cdot \mathbf{G}_{C,C}^R \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A]$$

Landauer-Büttiker vs Caroli

Em ambos os formalismos:

$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R \cdot \mathbf{G}_{C,C}^R \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A]$$

Com:

$$\mathbf{G}^{R/A}(E) = [E - \mathbf{H}_{C,C} - \boldsymbol{\Sigma}_L^{R/A}(E) - \boldsymbol{\Sigma}_R^{R/A}(E)]^{-1}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E) = i [\boldsymbol{\Sigma}_\ell^R(E) - \boldsymbol{\Sigma}_\ell^A(E)]$$

Landauer-Büttiker vs Caroli

Em ambos os formalismos:

$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R \cdot \mathbf{G}_{C,C}^R \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A]$$

Com:

$$\mathbf{G}^{R/A}(E) = [E - \mathbf{H}_{C,C} - \boldsymbol{\Sigma}_L^{R/A}(E) - \boldsymbol{\Sigma}_R^{R/A}(E)]^{-1}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E) = i [\boldsymbol{\Sigma}_\ell^R(E) - \boldsymbol{\Sigma}_\ell^A(E)]$$

Mas o significado das auto-energias é muito diferente!

Fórmula de Landauer-Büttiker

$$\boldsymbol{\Sigma}_R^R(E) = \mathbf{v}_R \boldsymbol{\Psi}_{R,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{R,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{R,\text{out}}^{-1}$$

Fórmula de Caroli

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}_R^R(E) &= \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{N+2,N+2}^R(E) \mathbf{v}_R^\dagger \\ &= \mathbf{v}_R \cdot [E + i0^+ - \mathbf{H}_R]^{-1} \cdot \mathbf{v}_R^\dagger\end{aligned}$$

Landauer-Büttiker vs Caroli

Em ambos os formalismos:

$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr} [\boldsymbol{\Gamma}_R \cdot \mathbf{G}_{C,C}^R \cdot \boldsymbol{\Gamma}_L \cdot \mathbf{G}_{C,C}^A]$$

Com:

$$\mathbf{G}^{R/A}(E) = [E - \mathbf{H}_{C,C} - \boldsymbol{\Sigma}_L^{R/A}(E) - \boldsymbol{\Sigma}_R^{R/A}(E)]^{-1}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_\ell(E) = i [\boldsymbol{\Sigma}_\ell^R(E) - \boldsymbol{\Sigma}_\ell^A(E)]$$

Mas o significado das auto-energias é muito diferente!

Fórmula de Landauer-Büttiker

?

Fórmula de Caroli

$$\boldsymbol{\Sigma}_R^R(E) = \mathbf{v}_R \boldsymbol{\Psi}_{R,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{R,\text{out}} \cdot \boldsymbol{\Psi}_{R,\text{out}}^{-1}$$

=

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}_R^R(E) &= \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{N+2,N+2}^R(E) \mathbf{v}_R^\dagger \\ &= \mathbf{v}_R \cdot [E + i0^+ - \mathbf{H}_R]^{-1} \cdot \mathbf{v}_R^\dagger\end{aligned}$$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Como calcular a entrada (1, 1) de

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}^{-1} ?$$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Como calcular a entrada (1, 1) de

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}^{-1} ?$$

Uma forma habitual é **recursão**. $\mathbf{g}_{1,1} = [E + i0^+ - \mathbf{h}_R - \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{1,1} \mathbf{v}_R^\dagger]^{-1}$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Como calcular a entrada (1, 1) de

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix}^{-1} ?$$

Uma forma habitual é **recursão**. $\mathbf{g}_{1,1} = [E + i0^+ - \mathbf{h}_R - \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{1,1} \mathbf{v}_R^\dagger]^{-1}$

Outra forma, é tentar resolver:

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^R & \mathbf{g}_{1,2}^R & \mathbf{g}_{1,3}^R & \cdots \\ \mathbf{g}_{2,1}^R & \mathbf{g}_{2,2}^R & \mathbf{g}_{2,3}^R & \cdots \\ \mathbf{g}_{3,1}^R & \mathbf{g}_{3,2}^R & \mathbf{g}_{3,3}^R & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Focando na coluna 1:

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^R \\ \mathbf{g}_{2,1}^R \\ \mathbf{g}_{3,1}^R \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Focando na coluna 1:

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^R \\ \mathbf{g}_{2,1}^R \\ \mathbf{g}_{3,1}^R \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Para $n > 1$, a equação é resolvida se escrevermos:

$$\mathbf{g}_{n,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \mathbf{U}$$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Focando na coluna 1:

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^R \\ \mathbf{g}_{2,1}^R \\ \mathbf{g}_{3,1}^R \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Para $n>1$, a equação é resolvida se escrevermos:

$$\mathbf{g}_{n,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \mathbf{U}$$

\mathbf{U} é determinado pela equação para $n=1$:

$$(E - \mathbf{h}_R) \mathbf{g}_{1,1}^R - \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{2,1}^R = 1$$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Focando na coluna 1:

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^R \\ \mathbf{g}_{2,1}^R \\ \mathbf{g}_{3,1}^R \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Para $n>1$, a equação é resolvida se escrevermos:

$$\mathbf{g}_{n,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \mathbf{U}$$

\mathbf{U} é determinado pela equação para $n=1$:

$$(E - \mathbf{h}_R) \mathbf{g}_{1,1}^R - \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{2,1}^R = \mathbf{1}$$

De onde obtemos: $[(E - \mathbf{h}_R) \Psi_{R,\text{out}} - \mathbf{v}_R \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}] \Lambda_{R,\text{out}} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{1}$

Cálculo de auto-energia no formalismo de Caroli

Focando na coluna 1:

$$\begin{bmatrix} E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v}_R & & \\ -\mathbf{v}_R^\dagger & E - \mathbf{h}_R & -\mathbf{v} & \\ & -\mathbf{v}_R^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^R \\ \mathbf{g}_{2,1}^R \\ \mathbf{g}_{3,1}^R \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Para $n>1$, a equação é resolvida se escrevermos:

$$\mathbf{g}_{n,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \mathbf{U}$$

\mathbf{U} é determinado pela equação para $n=1$:

$$(E - \mathbf{h}_R) \mathbf{g}_{1,1}^R - \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{2,1}^R = \mathbf{1}$$

De onde obtemos: $[(E - \mathbf{h}_R) \Psi_{R,\text{out}} - \mathbf{v}_R \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}] \Lambda_{R,\text{out}} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{1}$

$$\Rightarrow [\mathbf{v}_R^\dagger \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^{-1}] \Lambda_{R,\text{out}} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{1} \Rightarrow \mathbf{U} = \Psi_{R,\text{out}}^{-1} \cdot [\mathbf{v}_R^\dagger]^{-1}$$

Equivalência entre fórmulas de Landauer-Büttiker e Caroli

A função de Green é então dada por:

$$g_{1,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \Psi_{R,\text{out}}^{-1} \cdot [v_R^\dagger]^{-1}$$

Equivalência entre fórmulas de Landauer-Büttiker e Caroli

A função de Green é então dada por:

$$\mathbf{g}_{1,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \Psi_{R,\text{out}}^{-1} \cdot [\mathbf{v}_R^\dagger]^{-1}$$

E a auto-energia na fórmula de Caroli, pode ser expressa como:

$$\Sigma_R^R = \mathbf{v}_R \mathbf{g}_{1,1}^R \mathbf{v}_R^\dagger = \mathbf{v}_R \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \Psi_{R,\text{out}}^{-1}$$

Igual à auto-energia no formalismo de Landauer-Büttiker!

Equivalência entre fórmulas de Landauer-Büttiker e Caroli

A função de Green é então dada por:

$$g_{1,1}^R = \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \Psi_{R,\text{out}}^{-1} \cdot [v_R^\dagger]^{-1}$$

E a auto-energia na fórmula de Caroli, pode ser expressa como:

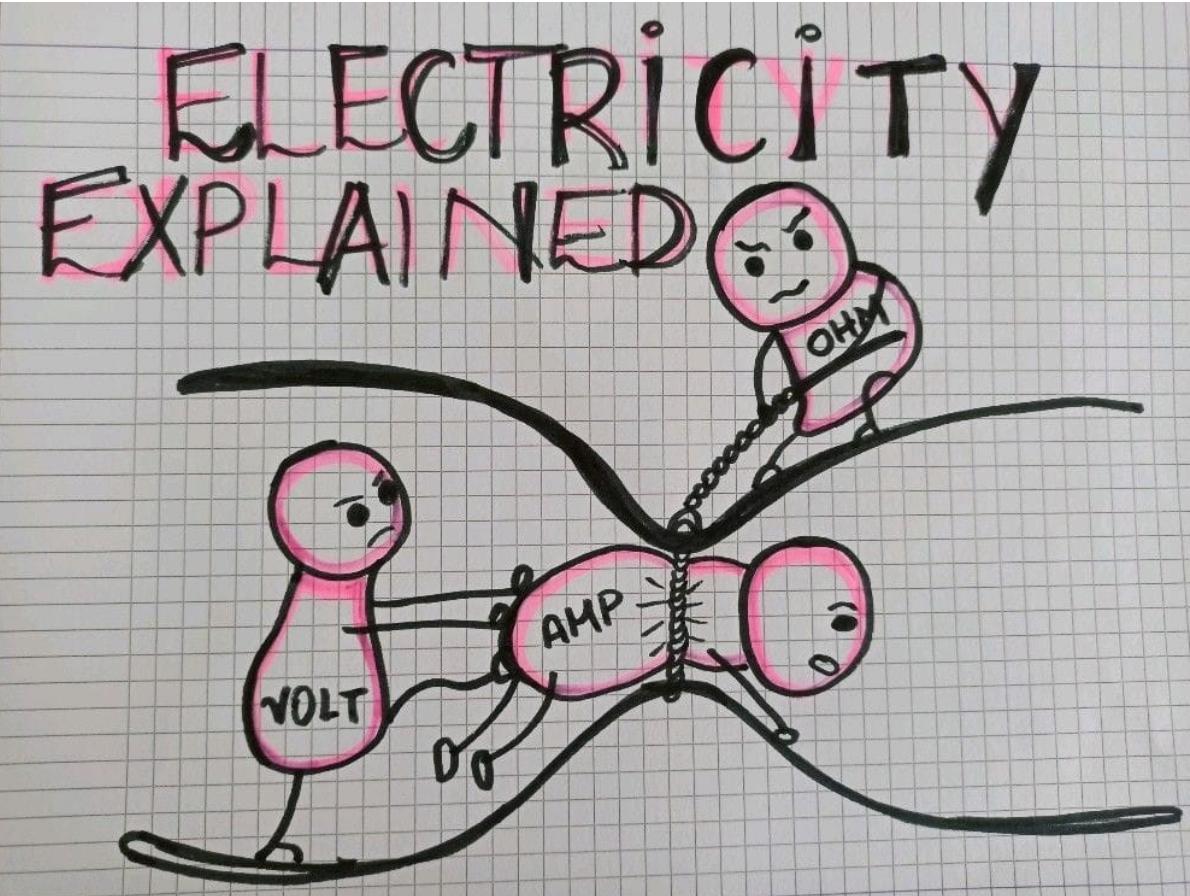
$$\Sigma_R^R = v_R g_{1,1}^R v_R^\dagger = v_R \Psi_{R,\text{out}} \cdot \Lambda_{R,\text{out}}^n \cdot \Psi_{R,\text{out}}^{-1}$$

Igual à auto-energia no formalismo de Landauer-Büttiker!

Fórmula de Landauer-Büttiker

=

Fórmula de Caroli



Obrigado pela atenção!