

Maryzaura de Oliveira Assunção

**Reflexão de Andreev Cruzada via dubleto de  
Autler-Townes em uma junção ponto  
quântico-supercondutor**

Uberlândia  
2017

Maryzaura de Oliveira Assunção

**Reflexão de Andreev Cruzada via dubleto de Autler-Townes  
em uma junção ponto quântico-supercondutor**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de doutor em Física.

Universidade Federal de Uberlândia  
Instituto de Física  
Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Fabrício Macedo de Souza

Uberlândia  
2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

---

A851r      Assunção, Maryzaura de Oliveira, 1987-  
2017      Reflexão de Andreev Cruzada via dubleto de Autler-Townes em  
uma junção ponto quântico-supercondutor / Maryzaura de Oliveira  
Assunção. - 2017.

Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.te.2018.3>  
138 f. : il.

Orientador: Fabrício Macedo de Souza.  
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa  
de Pós-Graduação em Física.  
Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Pontos quânticos - Teses. 3. Supercondutividade  
- Teses. I. Souza, Fabrício Macedo de. II. Universidade Federal de  
Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

MARYZAURA DE OLIVEIRA ASSUNÇÃO

**Reflexão de Andreev Cruzada via dubleto de Autler-Townes  
em uma junção ponto quântico-supercondutor**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de doutor em Física.

Trabalho aprovado. Uberlândia, 2017:

Fábio M. Souza

Prof. Dr. Fabrício Macedo de Souza - UFU  
(Orientador)

Antônio C. F. Seridônio

Prof. Dr. Antônio C. F. Seridônio - UNESP

Eduardo Costa Girão

Prof. Dr. Eduardo Costa Girão - UFPI

Ginetom de Souza Diniz

Prof. Dr. Ginetom de Souza Diniz - UFG

Gerson J. Ferreira

Prof. Dr. Gerson J. Ferreira - UFU

Marcel Novaes

Prof. Dr. Marcel Novaes - UFU

Uberlândia  
2017

*para Wellington*

# Agradecimentos

A Deus.

Ao meu orientador, Prof. Fabrício Macedo de Souza, pela confiança depositada e encorajamento.

Aos meus pais, Jarbas e Eni, e aos meus irmãos, Myller, Danielle e Daniel, pelo apoio e amizade.

Ao meu marido, Wellington, pela paciência, amor e companheirismo de tantos anos.

A todos os meus colegas do Grupo de Nanociências, de agora e de antigamente, por todo o companheirismo e incentivo, nesses quase 10 anos de pesquisa. Em especial quero agradecer ao meu colega doutorando Joelson Fernandes, pelas valiosas discussões e pela amizade. Aos professores do grupo, por todas as discussões, sugestões e convivência. Particularmente quero agradecer à professora Mariana Odashima pelo apoio profissional e pessoal. Também quero agradecer ao professor Ginetom Diniz, pelo grande auxílio com o trabalho e com meu crescimento profissional.

A todos os meus amigos, dentro e fora do Instituto de Física da UFU, por nunca deixarem de me encorajar. Em especial, minhas amigas Silésia, Laiz e Rosy, por sempre me motivarem.

A Universidade Federal de Uberlândia, por me oportunizar formação acadêmica de qualidade.

Ao Instituto de Física e ao Programa de Pós-Graduação em Física, seus professores, técnicos e secretários, pela empenho e dedicação para com a qualidade do Programa e por todo auxílio.

As agências de fomento: FAPEMIG e CAPES, pelo apoio financeiro.

*"Objective truths are established by evidence.  
Personal truths by faith.  
Political truths by incessant repetition."*  
(Neil deGrasse Tyson)

# Resumo

O conhecimento teórico e experimental acumulado nas últimas décadas sobre pontos quânticos semicondutores (PQs) impulsiona o surgimento de um grande número de propostas atuais de utilizá-los em sistemas híbridos. A habilidade de controlar suas propriedades optoeletrônicas, bem como o domínio de sofisticadas técnicas de fabricação, tornaram-os candidatos ideais para formar junções com supercondutores (SCs), cujas características individuais são também notáveis. Essas junções podem ser simples, com um único PQ acoplado a um SC, ou múltiplas: a conexão de dois terminais SCs através de um PQ (junção tipo Josephson) e a junção de dois PQs através de um SC. Esta última forma um separador de pares de Cooper, dispositivo sugerido como fonte de partículas emaranhadas, que depende fundamentalmente da ocorrência de reflexão de Andreev cruzada (CAR) nas interfaces da junção. Junções de PQs com SCs e com supercondutores topológicos também tem sido propostas em sistemas de dois níveis formando *qubits* para a computação quântica trivial e topológica. Embora o estudo das junções PQ-SC esteja em evidência atualmente, a revisão da literatura mostra que a análise do regime transiente foi pouco explorada. Por isso, abordamos neste trabalho o transporte de cargas em uma junção PQ-SC-PQ com resolução temporal. Utilizando técnicas de função de Green de não-equilíbrio, particularmente, o formalismo de Kadanoff-Baym, escrevemos um conjunto de equações diferenciais acopladas, solucionado numericamente. Analisando as oscilações de Rabi que surgem na evolução temporal da corrente elétrica e das ocupações dos PQs, fomos capazes de identificar assinaturas de mecanismos de espalhamento através da junção, isto é, o tunelamento direto e a CAR. Adicionalmente, propusemos a expansão deste sistema pela sua inserção na estrutura de um fotodíodo, aplicando luz laser sobre um dos PQs. Os resultados mostram que ocorre a separação dos níveis opticamente excitados em dubletos de Autler-Townes, para acoplamentos fracos entre os PQs. Consequentemente, é observada a ocorrência de CAR, mediada pelo laser aplicado, através dos níveis que compõe o dubleto. Os resultados tem dependência também com a tensão fonte-dreno aplicada ao dispositivo, que pode estar no limite de *bias* alta (HB) ou zero (ZB). Este é o primeiro trabalho a analisar a separação de pares de Cooper assistida por fôtons em uma junção PQ-SC-PQ, em regime de não-equilíbrio. Embora os resultados experimentais ainda sejam escassos, a inclusão de um SC em um fotodíodo de PQs híbrido permite novos mecanismos de formação de fotocorrente, abrindo novas possibilidades de aplicações desse sistema.

**Palavras-Chave:** pontos quânticos; supercondutividade; separador de pares de Cooper; reflexão de Andreev cruzada; fotocorrente; dubleto de Autler-Townes; funções de Green de não-equilíbrio.

# Abstract

The theoretical and experimental knowledge accumulated in the last decades on semiconductors quantum dots (QDs) impels the emergence of many current proposals for using them in hybrid systems. The ability to control their optoelectronic properties, as well as the control of fabrication techniques, made them the perfect candidates to compose junctions with superconductors (SCs), whose individual characteristics are also remarkable. These junctions can be simple, with a single QD coupled to a SC, or multiple: a connection of two superconducting terminals through a QD (a Josephson-like junction) and the junction of two QDs through a SC. The latter is known as a Cooper-pairs splitter, a device suggested as a source of entangled particles, for which is required the occurrence of crossed Andreev reflection (CAR) on the interfaces of the junction. Junctions of QDs with SCs and with topological SCs have also been proposed in two-level systems as qubits for both trivial and topological quantum computation. Despite the study of QD-SC junctions being currently in evidence, the literature review shows that the analysis of transient regime was little explored. Therefore, we address in this work the topic of time-dependent charge transport in a QD-SC-QD junction. By using non-equilibrium Green functions techniques, particularly, the Kadanoff-Baym formalism, we write down a set of coupled differential equations, which is numerically solved. Examining the Rabi oscillations that appears on the time evolution of electric current and QDs occupations, we were able to identify signatures of the scattering mechanisms through out the junction, i. e., direct tunnelling and CAR. Additionally, we propose to use this system as a photodiode, with the aid of a laser beam over one of the QDs. The results show the splitting of the optically excited states in Autler-Townes doublets, for a weak coupling between the QDs. Hence, CAR mediated by the applied laser was observed through the energy levels that compose the doublet. The results depend also with the source-drain potential applied to the device, which can be high bias (HB) or zero bias (ZB). The present work is the first to analyse the splitting of Cooper pairs assisted by photons in a QD-SC-QD junction, in nonequilibrium regime. Although the experimental results are still sparse, the inclusion of a SC in a QD hybrid photodiode allows new mechanisms of photocurrent formation, creating possibilities in future applications.

**Keywords:** quantum dots; superconductivity; Cooper-pairs splitter; crossed Andreev reflection; photocurrent; Autler-Townes doublet; nonequilibrium Green's functions.

# Lista de Figuras

Figura 1 – Exemplos de PQs realísticos e aplicações. . . . .	16
Figura 2 – Acoplamento de um único nanocristal de SiGe à eletrodos supercondutores. . . . .	19
Figura 3 – Exemplos de dispositivos reais com junções PQ-SC. . . . .	20
Figura 4 – Dois modelos propondo utilizar PQs para detectar MBSs. . . . .	25
Figura 5 – Sistema que propõe utilizar um rf-SQUID acoplado a um PQ para detectar MBSs. . . . .	25
Figura 6 – Fotocorrente obtida experimentalmente em um fotodiodo de PQ único. . . . .	32
Figura 7 – Observação do dubbleto Autler-Townes em um espectro de absorção óptica. . . . .	34
Figura 8 – Diagramas de energia mostrando a formação do dubbleto de Autler-Townes. . . . .	35
Figura 9 – Transporte de um par de Cooper por uma junção Josephson contendo um PQ duplo. . . . .	36
Figura 10 – Dois exemplos de sistemas com junções PQ-SC-PQ. . . . .	37
Figura 11 – Interferência de MBSs na evolução temporal das ocupações de um PQ duplo. . . . .	38
Figura 12 – Formação de um exciton em um PQ semicondutor pela aplicação de luz. . . . .	42
Figura 13 – Oscilações de Rabi em um gráfico de evolução temporal de probabilidades. . . . .	43
Figura 14 – Modelo de fotodiodo de um único PQ . . . . .	44
Figura 15 – Representação esquemática da reflexão de Andreev local. . . . .	45
Figura 16 – Representação esquemática do co-tunelamento elástico. . . . .	46
Figura 17 – Representação esquemática de Reflexão de Andreev Cruzada. . . . .	47
Figura 18 – Representação esquemática do sistema DPQ/SC. . . . .	48
Figura 19 – Autovalores de $H_s$ para o sistema DPQ/SC como função da energia $\varepsilon_2$ . . . . .	51
Figura 20 – Representação esquemática do sistema DPQ/SC/Luz. . . . .	52
Figura 21 – Autovalores de $H_s$ para o sistema DPQ/SC/Luz como função da energia $\varepsilon_2$ . . . . .	55
Figura 22 – Representação do contorno temporal de Keldysh. . . . .	60
Figura 23 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso $\Gamma = 0$ , configuração inicial $ 10\rangle$ , variação de $t_q$ e $\Delta$ . . . . .	75
Figura 24 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso $\Gamma = 0$ , configuração inicial $ 10\rangle$ , variação de $\varepsilon_1$ e $\varepsilon_2$ . . . . .	77
Figura 25 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso $\Gamma = 0$ , configuração inicial $ 00\rangle$ , variação de $t_q$ e $\Delta$ . . . . .	78
Figura 26 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso $\Gamma = 0$ , configuração inicial $ 00\rangle$ , variação de $\varepsilon_1$ e $\varepsilon_2$ . . . . .	79
Figura 27 – Sinais de $I_L$ e $I_R$ no regime de tensão alta (HB), de acordo com a energia dos níveis acoplados a cada reservatório. . . . .	81
Figura 28 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime HB, com $\Gamma_L = 0$ , variação de $t_q$ e $\Delta$ . . . . .	81

Figura 29 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime HB, comparação entre $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ e $\Gamma_L = \Gamma_R$ . . . . .	84
Figura 30 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime HB, com $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ , comparação $\Delta = 0$ e $\Delta = t_q$ . . . . .	84
Figura 31 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime ZB, com $\Gamma_L = 0$ e variação de $t_q$ e $\Delta$ . . . . .	86
Figura 32 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime ZB, com $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ e $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ . . . . .	87
Figura 33 – Evolução temporal de $n_1$ e $n_2$ no sistema DPQ/SC, regime ZB e $\varepsilon_1$ e $\varepsilon_2$ não-nulos. . . . .	88
Figura 34 – Evolução temporal de $I_L$ e $I_R$ no sistema DPQ/SC, regime ZB e $\varepsilon_1$ e $\varepsilon_2$ não-nulos. . . . .	88
Figura 35 – Sentidos das correntes $I_L$ e $I_R$ em tensão zero (ZB), de acordo com as energias dos níveis acoplados a cada reservatório. . . . .	90
Figura 36 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, caso $\Gamma = 0$ , estados iniciais variados. . . . .	92
Figura 37 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, caso $\Gamma = 0$ , com $ 000\rangle$ e $\Delta = 2$ , variação de $t_q$ e $\Omega$ . . . . .	93
Figura 38 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, caso $\Gamma = 0$ , com $t_q = \Delta = 2$ , $\Omega = 0,5$ e variação da configuração inicial. . . . .	94
Figura 39 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, regime HB, com $\Gamma_R = 0$ , $\Omega = 0,5$ e variação $t_q$ e $\Delta$ . . . . .	97
Figura 40 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, regime HB, com $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ , $\Omega = 0,5$ e variação de $t_q$ e $\Delta$ . . . . .	97
Figura 41 – Evolução temporal das correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regime HB, com $\Gamma_R = 0$ e $\Omega$ e $\Delta$ variáveis. . . . .	99
Figura 42 – Esquema detalhando a formação de platôs na evolução temporal da corrente $I_L$ no sistema DPQ/SC/Luz na Fig. 41. . . . .	100
Figura 43 – Evolução temporal das correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regime HB, comparação $t_q = 0$ e $t_q = 2$ , com variação de $\Delta$ . . . . .	101
Figura 44 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, regime ZB, com $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ e $\Omega = 0,5$ . . . . .	102
Figura 45 – Evolução temporal das correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regime ZB, comparação $t_q = 0$ e $t_q = 2$ , com variação de $\Delta$ . . . . .	104
Figura 46 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regimes HB e ZB, com $t_q = 0$ e $\Delta = \Omega = 2$ . . . . .	106
Figura 47 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regimes HB e ZB, com $t_q = \Delta = \Omega = 2$ . . . . .	106

Figura 48 – Ocupações no sistema DPQ/SC/Luz em função de $\varepsilon_2$ e do tempo, caso $\Gamma = 0$ , demonstrando interação com dubletos. . . . .	109
Figura 49 – DPQ/SC/Luz: Dubletos para $\varepsilon_1 = +1$ e interação com CAR e NT. . . . .	110
Figura 50 – Ocupações no sistema DPQ/SC/Luz em função de $\varepsilon_2$ e do tempo, regime HB, demonstrando interação com dubletos. . . . .	111
Figura 51 – Correntes no sistema DPQ/SC/Luz em função de $\varepsilon_2$ e do tempo, regime HB, demonstrando interação com dubletos. . . . .	112
Figura 52 – Ocupações no sistema DPQ/SC/Luz em função de $\varepsilon_2$ e do tempo, regime ZB, demonstrando interação com dubletos. . . . .	114
Figura 53 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando NT entre $\varepsilon_2$ e $\varepsilon_+$ para sistema em ZB. .	115
Figura 54 – Correntes no sistema DPQ/SC/Luz em função de $\varepsilon_2$ e do tempo, regime ZB, demonstrando interação com dubletos. . . . .	115
Figura 55 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando NT entre $\varepsilon_2$ e $\varepsilon_-$ para sistema em ZB. .	116
Figura 56 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando CAR entre $\varepsilon_2$ e $\varepsilon_-$ para sistema em ZB. . . . .	117
Figura 57 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando CAR entre $\varepsilon_2$ e $\varepsilon_+$ para sistema em ZB. . . . .	117

# Lista de abreviaturas e siglas

Eq.	Equação
Fig.	Figura
Ref.	Referência
CAR	<i>Crossed Andreev Reflection</i> (Reflexão de Andreev Cruzada)
DPQ	Duplo Ponto Quântico
FG	Função de Green
HB	<i>High Bias</i> (Tensão alta)
MBS	<i>Majorana Bound State</i> (Estado ligado de Majorana)
NT	<i>Normal Tunneling</i> (Tunelamento ressonante/normal)
OE	<i>Optical Excitation</i> (Excitação Óptica)
PQ	Ponto Quântico
SC	Supercondutor
ZB	<i>Zero Bias</i> (Tensão zero)

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>15</b>
1.1	Oscilações de Rabi e Fotocorrente . . . . .	41
1.2	Mecanismos de espalhamento nas junções Ponto Quântico-Supercondutor	45
<b>2</b>	<b>MODELOS ESTUDADOS . . . . .</b>	<b>48</b>
2.1	Ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor tipo-s . . . . .	48
2.2	Ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor tipo-s com aplicação de luz . . . . .	52
<b>3</b>	<b>FUNÇÕES DE GREEN DE NÃO-EQUILÍBRIO . . . . .</b>	<b>57</b>
3.1	Funções de Green . . . . .	57
3.1.1	Formalismos de Keldysh e Kadanoff-Baym . . . . .	60
3.2	Corrente elétrica . . . . .	61
3.3	Obtenção das funções de Green . . . . .	65
3.4	Considerações técnicas . . . . .	69
3.4.1	Funções de Green e regime de tensão . . . . .	69
3.4.2	Temperatura zero . . . . .	70
3.4.3	Método de Runge-Kutta . . . . .	71
3.4.4	Parâmetros e unidades . . . . .	73
<b>4</b>	<b>RESULTADOS: PONTO QUÂNTICO DUPLO ACOPLADO A UM SUPERCONDUTOR . . . . .</b>	<b>74</b>
4.1	Caso $\Gamma = 0$ . . . . .	74
4.2	Casos com $\Gamma \neq 0$ . . . . .	80
4.2.1	Tensão alta (HB) . . . . .	80
4.2.2	Tensão zero (ZB) . . . . .	85
<b>5</b>	<b>RESULTADOS: PONTO QUÂNTICO DUPLO ACOPLADO A UM SUPERCONDUTOR COM APLICAÇÃO DE LUZ . . . . .</b>	<b>91</b>
5.1	Caso $\Gamma = 0$ . . . . .	91
5.2	Casos com $\Gamma \neq 0$ . . . . .	95
5.2.1	Tensão alta . . . . .	95
5.2.2	Tensão zero . . . . .	102
<b>6</b>	<b>RESULTADOS: INTERAÇÃO COM DUBLETOS NO SISTEMA DUPLO PONTO QUÂNTICO-SUPERCONDUTOR COM APLICAÇÃO DE LUZ . . . . .</b>	<b>108</b>
6.1	Caso $\Gamma = 0$ . . . . .	108

6.2	Tensão alta	111
6.3	Tensão zero	113
7	CONCLUSÕES	119
	REFERÊNCIAS	121
	APÊNDICE A – DERIVAÇÃO DO HAMILTONIANO DA EQ. (2.1) A PARTIR DO MODELO DE MAJORANA	132
	APÊNDICE B – TRANSFORMAÇÃO UNITÁRIA SOBRE O HAMILTONIANO DA EQ. (2.5)	135

# 1 Introdução

## Pontos Quânticos

Em mais de 30 anos desde a sua descoberta (1), *Pontos Quânticos Semicondutores* (PQs) nunca deixaram de ser um tópico relevante. PQs são estruturas semicondutoras de dimensões nanoscópicas ( $\approx 0 - 100$  nm), assim chamados pela sua capacidade de confinar partículas nas três direções espaciais. O confinamento quântico em todas as dimensões, em contraposição aos poços (2D) e fios (1D) quânticos, dá origem a uma distribuição discreta dos níveis de energia (2) nos PQs. Suas propriedades ópticas e eletrônicas estão diretamente relacionadas ao seu tamanho, de modo que PQs de um mesmo material podem absorver e emitir luz em diversas faixas de frequências (3).

PQs são excelentes para se estudar diversos tipos de fenômenos quânticos, dentre os quais podemos exemplificar: a interação elétron-elétron (4), o efeito Kondo (5), a interação elétron-fônôn (6), o acoplamento spin-órbita (7) e o emaranhamento quântico (8).

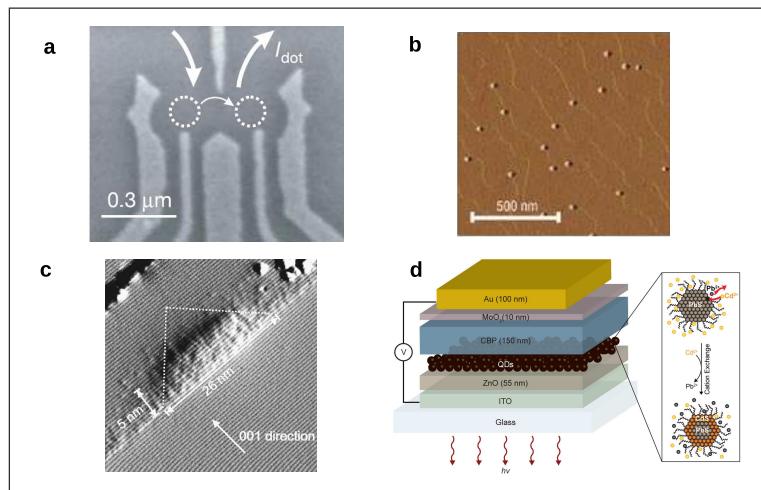
Conforme a pesquisa teórica e as técnicas de fabricação evoluíram, o enorme potencial para aplicações práticas dos PQs se aproximou cada vez mais da realidade. O controle preciso das propriedades de absorção e emissão os tornaram candidatos ideais para confecção de vários tipos de células solares, diodos emissores de luz (*Light Emitting Diodes* - LEDs), entre outras aplicações optoeletrônicas e em medicina.

Na Fig. 1 podem ser vistas imagens de microscopia de PQs em diferentes materiais e ainda uma proposta de construção de LEDs de PQs.

No caso das células solares, PQs são considerados co-responsáveis pelo desenvolvimento de células solares de alta-eficiência junto com novos processos que vêm sendo estudados, como a geração de excitons múltiplos e efeitos plasmônicos (13). Dessa forma, PQs são incluídos como material absorvedor nessa nova geração de células solares, em substituição ao Si, CdTe e outros materiais *bulk*. Como exemplo de arquiteturas destas células de alta-eficiência temos células fotovoltaicas de junção metal/semitrizador (PQ), células híbridas de polímeros/semitrizadores e células solares sensibilizadas por PQs (em analogia às células solares sensibilizadas por corante). O fato de os gaps de energia poderem ser controlados pelo tamanho dos PQs fornece uma enorme vantagem sobre os materiais *bulk*, de gap fixo, permitindo um melhor controle das eficiências da resposta óptica (*photoresponse*) e de fotoconversão (14). Em resultado recente, células híbridas de PQs e material orgânico chegaram a uma eficiência 91% maior que das células de multicamadas puramente orgânicas (15). Um outro resultado (16) mostra que a inclusão de PQs de carbono em células solares de heterojunções com peroviskitas foi determinante para que estas chegassem a uma eficiência real de 19%.

Por sua vez, a utilização de PQs em dispositivos emissores de luz avançou de tal maneira

Figura 1 – Exemplos de PQs realísticos e aplicações.



Fonte: **a** F. Koppens et al. (2006) (9). **b** P. Atkinson et al. (2006) (10). **c** D. Bruls et al. (2002) (11). **d** G. Supran et al. (2013) (12).

**a** Imagem de SEM de terminais de Ti/Au depositados sobre uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs contendo um gás de elétrons 2D. As setas indicam o fluxo de corrente através de PQs acoplados. **b** Imagem de AFM de PQs auto-organizados de GaAs (40 nm de diâmetro e 8 nm de altura). **c** Imagem de X-STM um PQ de InAs. **d** Arquitetura de um LED de PQs em infravermelho próximo (NIR QD-LED) híbrido orgânico-PQs-inorgânico.

que eles podem ser encontrados compondo telas de alta definição em aparelhos de TV<sup>1</sup>. LEDs de PQs se apresentam na indústria de displays como alternativa aos LEDs usuais e aos OLEDs<sup>2</sup>. Em relação aos OLEDs especificamente, é sugerido que LEDs de PQs produzem cores de maior pureza, maior vida útil (a degradação dos materiais orgânicos em contato com o oxigênio é sempre uma grande questão) e custos menores. Estas qualidades se devem principalmente a algumas características próprias dos PQs como espectro de emissão mais estreito, melhor estabilidade (degradação mais lenta dos materiais que os compõe) e matérias-primas mais baratas, conforme apontado na Ref. (17). No desenvolvimento deste tipo de tecnologia, a manipulação do gap de energia dos PQs através do controle de seu tamanho é uma vantagem ímpar no momento, sendo ela responsável pela obtenção de cores mais puras.

No campo das ciências médicas, PQs também são apontados como grande esperança no tratamento de doenças. No diagnóstico, podem atuar como marcadores biológicos, encontrando moléculas de determinadas substâncias no corpo, que poderão ser identificadas externamente por luminescência, por exemplo (18). Existem propostas, porém, de se utilizar PQs no tratamento propriamente dito, como agente fotossensibilizante em terapia fotodinâmica (19). Neste segundo caso, luz, oxigênio e o agente fotossensibilizante são combinados para destruir um tecido-alvo específico. Apenas tecidos expostos simultaneamente ao fotossensibilizante e a

<sup>1</sup> TVs com telas de LEDs de PQs já são comercializadas pela Samsung Electronics: <<http://www.samsung.com/br/tvs/suhd-tv/>>.

<sup>2</sup> OLEDs são diodos emissores de luz nos quais a parte eletroluminescente é composta de filmes finos de material orgânico. Os principais apelos dos LEDs orgânicos são a flexibilidade e o baixo custo das matérias-primas.

luz, na presença de oxigênio, estarão sujeitos à reações citotóxicas (que poderiam efetivamente causar a morte de células cancerígenas). PQs cumprem determinados critérios para serem identificados como bons fotossensibilizantes, por exemplo, por apresentarem uma composição constante. Além disso, sem a presença de luz direcionada são pouco citotóxicos, embora apresentem o potencial necessário para induzir citotoxicidade sob ação da radiação UV.

Com todas essas aplicações mencionadas e o surgimento de diversas empresas especializadas em fabricação e comercialização de PQs, fica claro que essas nanoestruturas já não são um sistema apenas para estudo de propriedades quânticas fundamentais, limitados à esfera acadêmica. Ainda cabe mencionar o potencial dos PQs para aplicação na eletrônica baseada em spin, campo mais conhecido por *spintrônica* (20), (21). Como abordaremos adiante, PQs também são tema de discussão no que compete ao desenvolvimento da computação quântica, com propostas extremamente diversificadas de aplicação dos mesmos nesse contexto.

## Supercondutores

Além dos PQs, de fundamental importância neste trabalho são os *supercondutores* (SCs), materiais cuja resistência elétrica é nula para temperaturas menores que uma temperatura crítica  $T_c$ . Em 1911, H. Kamerlingh Onnes descobriu a supercondutividade (22), poucos anos após ter conseguido produzir He líquido (1908), o qual tornou possível atingirem-se temperaturas tão baixas quanto fossem necessárias. Especificamente, Kamerlingh Onnes observou que quando o mercúrio (Hg) é resfriado abaixo de 4,2 K, sua resistividade é reduzida bruscamente para um valor próximo de zero. Acima dessa temperatura, a resistividade do mercúrio volta a se comportar como na maioria dos metais, sendo menor quanto menor a temperatura. Uma outra característica importante a cerca dos SCs é o diamagnetismo perfeito, com a repulsão de campos magnéticos fortes. O diamagnetismo perfeito implica que o campo magnético dentro do SC é praticamente nulo. Neste contexto devemos mencionar ainda o efeito *Meissner*, caracterizado pela expulsão do campo magnético em um material que sofre uma transição para a fase supercondutora ao ser resfriado abaixo de  $T_c$  (23).

A supercondutividade em metais e ligas metálicas<sup>3</sup> foi descrita microscopicamente com sucesso por J. Bardeen, L. Cooper e J. Schrieffer em 1957 (24). Em termos gerais, a teoria descreve como os fenômenos de supercondutividade estão relacionados à formação de um condensado de pares de elétrons ligados (pares de Cooper) - que permanecem dessa forma apesar da repulsão Coulombiana, devido à uma interação fraca mediada por fônon (excitações associadas com vibrações da rede cristalina). Além disso, essa teoria descreve a formação de um gap supercondutor, onde as excitações que conhecemos como quasipartículas, apenas podem existir no material fora desta faixa de energia. Os pares de Cooper, por outro lado, são encontrados exatamente na metade deste gap.

<sup>3</sup> Materiais que podemos tratar basicamente como supercondutores do tipo I, onde em geral a teoria BCS é válida, sabendo que há exceções.

Em 1986, no entanto, Johannes Bednorz e Karl Müller (25) observaram que um determinado composto de óxido de cobre apresentava uma temperatura de transição supercondutora da ordem de 35 K, sendo que o maior valor de  $T_c$  encontrado até aquele momento era de 23,2 K para o composto Nb<sub>3</sub>Ge. Após essa descoberta pode-se dizer que foi iniciada uma verdadeira corrida para se encontrar materiais com maiores temperaturas de transição. Assim, a supercondutividade foi observada em outros materiais e as temperaturas de transição atingem atualmente valores próximos de 140 K (26). Esses valores de  $T_c$  aumentam as possibilidades de aplicações práticas da supercondutividade, pois estes novos materiais não farão necessária a utilização de He líquido para resfriamento (23) <sup>4</sup>.

Apesar de propostas promissoras, décadas após a descoberta dos SCs de altas temperaturas de transição (chamados *high T<sub>c</sub>*), ainda não existe consenso sobre o mecanismo físico que permite a supercondutividade nessas temperaturas, mesmo com a descoberta de diversos outros SCs e de todos os avanços em termos de materiais e métodos <sup>5</sup>. Sabe-se, no entanto, que a teoria BCS sozinha não é capaz de fazê-lo. Esse é um dos motivos pelos quais a supercondutividade continua, após tantos anos de sua descoberta, um assunto de enorme interesse. Além disso, os SCs *high T<sub>c</sub>* são ainda complexos de se obter, o que cria uma necessidade de mais estudos experimentais e teóricos.

As aplicações tecnológicas da supercondutividade são variadas, algumas com grande apelo popular, como os *Maglevs*, trens de passageiros que utilizam levitação magnética para se deslocar com o mínimo de atrito possível, atingindo altas velocidades. Uma das tecnologias propostas para o sistema de levitação/propulsão é a suspensão eletrodinâmica, que se utiliza de eletroímãs supercondutores <sup>6</sup>. Outras aplicações de SCs são amplamente utilizadas, entregando grandes benefícios à pesquisa científica e à população em geral. No primeiro caso, eletroímãs SCs nos aceleradores de partícula, como no caso do LHC<sup>7</sup>, que utiliza uma rede destes dispositivos para curvar as trajetórias e manter os feixes de partículas estáveis e alinhados. No segundo caso, eletroímãs são utilizados em aparelhos de ressonância magnética nuclear (um tema recebedor de dois prêmios Nobel de Física). Os campos magnéticos utilizados na técnica de ressonância são gerados por uma corrente atravessando fios que compõe um solenoide ou bobina. Para que sejam atingidas as correntes supercondutoras neste fio, a bobina é mantida resfriada por um banho de He líquido. Nesse tipo de dispositivo o campo magnético pode ser maior que 1 T <sup>8</sup>. Em todas essas aplicações, apenas supercondutores do tipo II são utilizados. Os supercondutores do tipo-I, por outro lado, podem induzir supercondutividade tipo-p (artificial) para a formação de estados topológicos da matéria e, como veremos no decorrer deste capítulo,

<sup>4</sup> A partir de 77 K é possível utilizar nitrogênio líquido. A obtenção de He líquido é bem mais complexa que a de N<sub>2</sub>, não somente pela temperatura de condensação do He - muito menor que a do N<sub>2</sub> - mas também pelo fato de que, enquanto o N<sub>2</sub> é abundante na atmosfera terrestre, o He é escasso, encontrado apenas em alguns depósitos naturais de gás. Setor de Criogenia do IFSC-USP.

<sup>5</sup> Coleção da American Physical Society nesse contexto: Collection: Heating up Superconductors.

<sup>6</sup> Um pouco mais sobre Maglevs em <<https://goo.gl/OhKt9N>> e <<https://goo.gl/1ouQtW>>.

<sup>7</sup> Detalhes em <<https://goo.gl/C278nD>>.

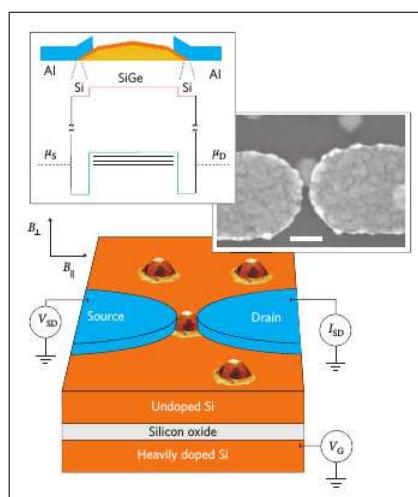
<sup>8</sup> Sobre imageamento por ressonância magnética <<http://mri-q.com/complete-list-of-questions.html>>.

estes estados apresentam enorme potencial para o desenvolvimento da computação quântica.

## Junções de Pontos Quânticos e Supercondutores

A enorme potencialidade demonstrada por estes sistemas em separado, certamente projeta aplicações formidáveis em sua utilização conjunta. Para formar junções entre PQs e SCs deve-se considerar primordialmente a questão de que a supercondutividade se manifesta macroscopicamente, com um grande número de portadores envolvidos, enquanto nos PQs os fenômenos estão ocorrendo na escala nanoscópica, contando inclusive com transporte de um único elétron através do sistema. A Fig. 2, reproduzida a partir do trabalho de G. Katsaros *et al.* (27), demonstra que as técnicas experimentais permitem a construção deste tipo de dispositivo há alguns anos. Na figura citada, um nanocristal de SiGe é conectado à eletrodos de alumínio, que resfriados abaixo de 15 mK passam à fase supercondutora. Note como na imagem de SEM<sup>9</sup> os contatos são muito maiores que os nanocristais de SiGe.

Figura 2 – Acoplamento de um único nanocristal de SiGe à eletrodos supercondutores.



Fonte: G. Katsaros *et. al* (2010) (27).

Esquema de um dispositivo SC-PQ-SC, obtido pela criação de um contato entre um nanocristal de SiGe e eletrodos de alumínio. Também é mostrada uma imagem de SEM desta junção. No alto está representada uma seção lateral da junção e as bandas de energia associadas.

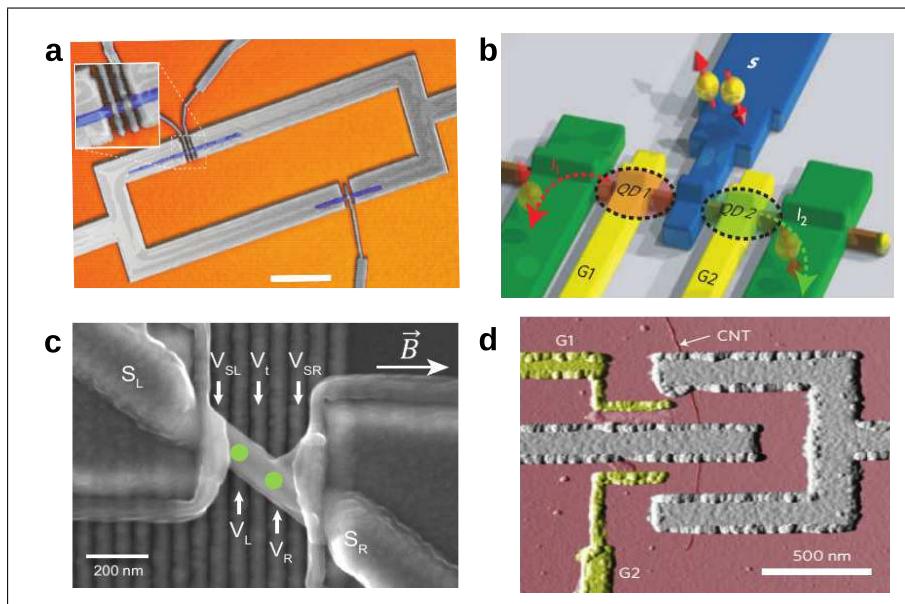
Inicialmente, C. Beenakker publicou em 1992 (28) um trabalho teórico no qual deriva uma fórmula para a condutância de uma micro-junção entre um metal normal e um supercondutor comum, inclusive aplicando seu resultado para casos em que o papel do metal normal é feito por um *quantum point contact*, por um PQ e em uma junção desordenada. Como ressaltado pelo próprio autor, trabalhos teóricos anteriores consideravam junções macroscópicas e, por isso, a

<sup>9</sup> Scanning Electron Microscopy ou Microscopia Eletrônica de Varredura.

abordagem utilizada era semiclássica. Em sistemas mesoscópicos, por outro lado, o tamanho do material normal acoplado ao SC é menor que o comprimento de coerência de fase e, neste caso, os efeitos de interferência quântica estão presentes. Certamente, foi um dos primeiros passos no estudo de junções com SC e sistemas mesoscópicos, motivado por alguns trabalhos da época que buscavam interagir um filme supercondutor e um gás de elétrons bidimensional, sobre o qual ele estava depositado (29). Diversos anos após esse trabalho, a junção de sistemas nanoscópicos e SCs se tornou um procedimento muito mais comum e com promessas mais ambiciosas.

Um ótimo trabalho de revisão sobre junções de PQs e SCs foi publicado em 2010 por De Franceschi e colaboradores (30). Alguns dos dispositivos destacados naquela revisão estão representados na Fig. 3.

Figura 3 – Exemplos de dispositivos reais com junções PQ-SC.



Fonte: **a** J. Dam et. al (2006) (31). **b** L. Hofstetter et al. (2009) (32). **c** Z. Su et al. (2016) (33). **d** J.-P. Cleuziou (2006) (34).

**a** Imagem SEM de um SQUID com junções formadas por nanofios de InAs. **b** Concepção artística de uma junção PQ-SC-PQ: pares de Cooper em S são separados nos PQs (QD1 e QD2) e transferidos aos eletrodos ( $l_1$  e  $l_2$ ). **c** Micrografia de um nanofio de InSb, onde os círculos identificam dois PQs formados pela aplicação de tensões elétricas indicadas na imagem. **d** Imagem de AFM de um nanoSQUID: duas junções do tipo Josephson são formadas com um nanotubo de carbono (na figura, CNT) nos pontos onde o SC (anel) é interrompido. G1 e G2 são contatos metálicos que ajustam o acoplamento nas junções.

No painel **a** da Fig. 3 está reproduzida uma imagem de SEM de um SQUID<sup>10</sup> feito de

<sup>10</sup> Superconducting Quantum Interference Device (SQUID) ou dispositivo de interferência quântica supercondutor são medidores de campos magnéticos pequenos, que podem conter uma (RF-SQUID (35)) ou duas (DC-SQUID (36)) junções do tipo Josephson. As junções são formadas em um anel supercondutor ou espira e seu funcionamento combina o efeito Josephson e a quantização do fluxo magnético. Os SQUIDs mais comuns são

Ti/Al, que é SC abaixo de 1 K. O anel possui duas quebras que contém pontes formadas por um nanofio de InAs. O painel interno (*inset*) detalha um par de eletrodos (*gates*) de alumínio utilizado para definir um PQ em um dos nanofios.

No painel **b** da Fig. 3 é mostrada a concepção artística de um dispositivo composto de uma junção PQ-SC-PQ, comumente conhecido como separador de pares de Cooper<sup>11</sup>. Na imagem **c**, Ref. (33), temos a imagem de micrografia de um dispositivo formado por uma junção SC-Normal-SC, onde os SCs são Ni (nióbio) e o material intermediário é um nanofio de InSb. PQs formados neste nanofio estão representados por dois círculos cheios. Neste caso, a junção formada é, de fato, do tipo SC-PQ-PQ-SC, isto é, utiliza uma estrutura de duplo PQ (DPQ). No item **d** da Fig. 3, é mostrada uma imagem de AFM de um dispositivo que conta novamente com uma junção SC-Normal-SC, onde o material intermediário é um nanotubo de carbono. Aplicando-se uma tensão de porta apropriada (contatos indicados por G1 e G2), o nanotubo adquire características de PQ de carbono, formando duas junções do tipo SC-PQ-SC.

Os autores da Ref. (30) ressaltam como experimentos iniciais em sistemas híbridos de SCs-PQ (grânulos metálicos) eram realizados somente em um regime de acoplamento fraco, que não permitia observação de supercorrente. Apenas com a introdução de novos materiais como nanotubos de carbono, nanofios semicondutores, PQs auto-organizados e algumas moléculas é que os regimes de acoplamento intermediário e forte tornaram-se acessíveis em experimentos. A realização experimental da versão nanoscópica de um SQUID (o nanoSQUID) e do separador de pares de Cooper, casos **d** e **b** da Fig. 3, demonstram o grande avanço alcançado nas técnicas de fabricação de junções PQ-SC.

Com os exemplos demonstrados anteriormente, podemos listar três formas de se acoplar um SC a um material normal (onde consideraremos os PQs como o material não-supercondutor):

1. uma junção simples (PQ-SC);
2. multijunção com dois supercondutores (SC-PQ-SC), identificada como uma junção do tipo Josephson;
3. multijunção com um único supercondutor (PQ-SC-PQ), que identificaremos como separador de pares de Cooper.

compostos por nióbio ou ligas de Pb e só operam a temperaturas muito baixas. No entanto, a pesquisa com SQUIDs formados por SCs high- $T_c$  apresenta resultados promissores, que podem reduzir a necessidade de He líquido (37), (38). A alta sensibilidade os tornaram fundamentais para medir interferências com campos muito pequenos, como no caso da atividade cerebral (magneto-encefalografia) e da cardiológica. Também são propostos novos microscópios que utilizam os SQUIDs como mecanismo de leitura. Podem ser utilizados ainda na busca por petróleo, exploração mineral e em pesquisa geológica (terremotos e atividade geotermal). Sem contarmos, é claro, com as aplicações em laboratório, como detector de campos magnéticos em experimentos, podendo até mesmo detectar moléculas magnéticas individuais - proposta do nanoSQUID de nanotubos de carbono, mostrado no painel **d** da Fig. 3. Por último, mas não menos importante, SQUIDs são apontados como uma das peças-chave para o desenvolvimento da computação quântica, surgindo em variadas propostas.

<sup>11</sup> *Cooper-pairs splitter* ou separador de pares de Cooper é um dispositivo construído a partir de uma junção Normal-SC-Normal (onde normal é um material não-SC). Dispositivos como este foram propostos como uma forma de separar os pares de Cooper em estados eletrônicos emaranhados (32). Seu funcionamento se baseia na ocorrência de reflexão de Andreev cruzada.

No caso da junção simples, PQ-SC, apenas um PQ semicondutor se acopla diretamente a um SC convencional. Nesta situação, a transformação da corrente normal em corrente supercondutora se dá por um processo de espalhamento chamado reflexão de Andreev, em função do trabalho de A. Andreev de 1964 (39). A reflexão de Andreev local é a transferência de dois elétrons do material normal para o SC, pela formação de um par de Cooper no SC e reflexão de um buraco no material normal. Esse mecanismo é descrito com maiores detalhes na seção 1.2.

Se um PQ é colocado entre dois eletrodos SCs temos uma junção do tipo Josephson. Originalmente, o efeito Josephson ocorre numa junção SC-I-SC, isto é, com um material isolante colocado entre dois SCs. Uma supercorrente pode fluir pela estrutura devido ao tunelamento coerente (com preservação da fase) dos pares de Cooper de um SC a outro, através do material isolante. Ocorre que a interferência coerente entre as fases dos elétrons que sofrem Reflexão de Andreev local (em cada uma das duas interfaces SC/PQ) cria uma onda estacionária quantizada no material intermediário, caracterizando a formação de um estado ligado de Andreev (*Andreev Bound States*), e causando efetivamente a transferência dos pares de Cooper em um determinado sentido (40). Em trabalho recente, J. Silva e E. Vernek (41) utilizaram uma junção de um ponto quântico duplo com um SC convencional e um SC topológico para investigar o surgimento dos estados ligados de Andreev, como função da relação entre os parâmetros de acoplamento da junção. Ainda, devido à presença do SC topológico, investigaram o surgimento dos estados ligados de Majorana e a possibilidade de observação simultânea destes com os estados ligados de Andreev. As referências (42) e (43) são trabalhos que devem ser mencionados no contexto de junções PQ-SC tipo-Josephson: relacionam os estados ligados de Andreev com a observação de supercorrentes, com os materiais intermediários sendo nanotubos de carbono no primeiro caso e, no segundo, um PQ de grafeno. Entre os diversos tipos de aplicação de junções Josephson, como destacamos anteriormente sua presença nos interferômetros conhecidos como SQUIDs, elas são consideradas também na composição de transistores supercondutores.

Se, por outro lado, colocamos um único supercondutor entre dois materiais normais, PQs incluídos, vamos formar um *Cooper-pairs splitter*, isto é, um separador de pares de Cooper. O mecanismo de transporte neste caso passa a ser a *Crossed Andreev Reflection* (CAR), ou Reflexão de Andreev Cruzada<sup>12</sup>, com cada um dos elétrons que formam o par de Cooper no SC sendo transferidos para um dos PQs. Junções em forma de Y, com os PQs diretamente acoplados, ao invés de fisicamente separados pelo SC, são equivalentes como mostrado na Ref. (44). Essa junção híbrida de PQ-SC-PQ foi proposta como uma maneira de se obter pares de partículas emaranhadas em estado sólido (32), uma de suas possíveis aplicações. Através de análises de condutância, Herrmann e colaboradores (45), em 2010, demonstraram experimentalmente a CAR nestas junções, colocando dois PQs de nanotubos de carbono conectados a um SC. Em 2011, B. Hiltscher et al. (46) investigaram a relação entre o bombeamento adiabático

<sup>12</sup> A reflexão de Andreev Cruzada é processo de formação de um par de Cooper em um SC comum, a partir de elétrons oriundos de materiais distintos, ocorrendo apenas em junções múltiplas. O processo de separação de pares, com a distribuição dos elétrons que formam o par de Cooper entre dois materiais distintos também é identificado como CAR. O mecanismo é explicado com mais detalhes na seção 1.2, a partir da página 47.

de cargas e a CAR em um sistema de dois PQs conectados a um reservatório SC. O trabalho demonstra que a posição média dos níveis eletrônicos dos PQs e a assimetria dos parâmetros de acoplamento são os principais fatores que permitem distinguir partículas separadas a partir do par de Cooper das quasipartículas que entram no sistema pelo bombeamento. Este tipo de junção (PQ-SC-PQ) é o que exploraremos nesta tese e, por esse motivo, destacamos também a proposta de M. Leijnse e K. Flensberg (47), de 2012, que utilizamos como ponto de partida para o trabalho. Tal sistema foi sugerido para detecção de férmiões de Majorana em estado sólido, assunto que introduziremos na próxima seção.

## Junções PQ-Supercondutor e a busca pelos estados de Majorana

De maior destaque nos últimos anos têm sido o estudo de junções entre PQs semicondutores e materiais topológicos<sup>13</sup>. Uma das principais razões para se estudar esse tipo de junção é que determinados SCs topológicos podem abrigar *Majorana Bound States* (MBSs), que em português são conhecidos como estados ligados de Majorana. O controle sobre as propriedades físicas e de transporte nos PQs os fazem excelentes candidatos para auxiliar nessa busca.

MBSs são a manifestação em estado sólido dos *Férmions de Majorana*, partículas que seriam idênticas às suas antipartículas, cuja existência foi prevista pelo físico italiano E. Majorana em 1937 (50), como uma solução possível para a equação de Dirac. O próprio Majorana sugeriu que os neutrinos poderiam ser identificados dentro desta classe de partículas, hipótese que não foi ainda confirmada ou descartada. Os sólidos, no entanto, são compostos unicamente por elétrons e íons e, dessa forma, os férmiões de Majorana poderiam se manifestar em sistemas de matéria condensada não como partículas, mas como excitações de quasipartículas<sup>14</sup>.

Além do interesse que tal objeto desperta do ponto de vista da física básica, no sentido de se descobrir suas propriedades fundamentais, obtê-lo e manipulá-lo experimentalmente, os MBSs também são apontados como peças importantes no desenvolvimento da *computação quântica topológica*.

Os MBSs, também chamados de *Majorana Zero Modes* (52), foram previstos como excitações exóticas em supercondutores do tipo-p (1D) e p+ip (2D) que conseguem acessar a fase topológica da matéria. Como resume J. Alicea na Ref. (53): SCs topológicos 2D e redes de SCs topológicos 1D podem ser apropriadamente relacionados às fases não-Abelianas da matéria. As quasipartículas que surgem nesses materiais não podem ser descritas pela estatística de Fermi-Dirac, nem pela de Bose-Einstein: sua distribuição estatística é também chamada não-Abeliana (54), de forma que os MBSs são ânions não-Abelianos. Algumas das propriedades responsáveis por distingui-los de férmiões e bôsons comuns, fazem com que estes ânions sejam protegidos de diversos processos de decoerência. Essa proteção (chamada de proteção topológica de es-

<sup>13</sup> Sobre isolantes e supercondutores topológicos ver (48) e (49). As manifestações das fases topológicas da matéria e suas transições foram em 2016, o tema vencedor do prêmio Nobel de Física, como pode ser visto em <[https://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/2016/](https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2016/)>.

<sup>14</sup> Partícula “fictícia” formada pela partícula e as interações provocadas pela sua movimentação na rede (51)

tados), ao menos do ponto de vista teórico, torna os MBSs candidatos ideais para utilização em computação quântica, como já mencionado. Dessa forma os férmiões de Majorana em física da matéria condensada se tornaram um tópico extraordinariamente produtivo e amplo, com variadas propostas teóricas e experimentais para detecção destas partículas.

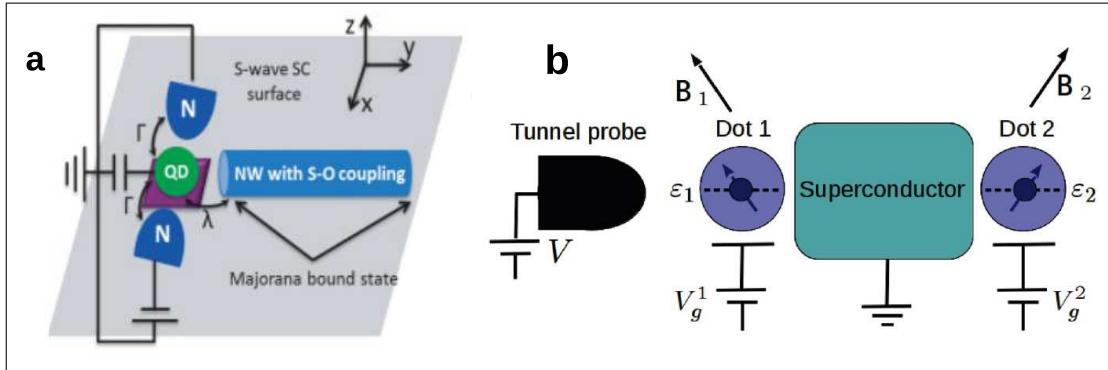
Em 2001, A. Kitaev (55) fez um estudo teórico, no contexto da computação quântica topológica, demonstrando que sistemas unidimensionais (fios quânticos) supercondutores, em condições específicas, podem abrigar MBSs desemparelhados nas extremidades dos mesmos. O pareamento dos MBSs ao longo do fio, a princípio, requer supercondutividade do tipo-p. Esse modelo teórico (*toy-model*) motivou diversos trabalhos em que os pesquisadores visualizaram maneiras de construir “fios” que possam abrigar os MBSs. Uma das principais propostas é a obtenção de um SC tipo-p unidimensional por um nanofio semicondutor com forte interação spin-órbita do tipo Rashba, com aplicação de um campo magnético, conjuntamente com um pareamento tipo-s, induzido por efeito de proximidade. A Ref. (52), faz uma revisão detalhada da questão dos MBSs em nanofios semicondutores, considerando estas e outras propostas.

Os PQs surgem neste contexto como uma maneira de fazer a detecção e a manipulação dos MBSs que são encontrados nos SCs topológicos (em especial os nanofios). K. Flensberg demonstrou em 2011 (56) que operações (computacionais) com um conjunto de férmiões de Majorana podem ser realizadas pela adição ou remoção de elétrons. Ele propôs que as operações seriam processos de tunelamento adiabáticos de um elétron individual de um PQ, no regime de bloqueio de Coulomb, acoplado a um ou dois MBSs. Sugerindo ainda que os PQs poderiam também ser usados para leitura do estado do sistema (ausência ou presença dos MBSs) por medidas de carga. Em 2012, Sau e Das Sarma (57), também propuseram utilizar PQs conectados por SCs tipo-s para reproduzir condições da cadeia de Kitaev (como ficou conhecido o modelo da Ref. (55)) e observar MBSs.

Em um trabalho publicado em 2011, D. Liu e H. Baranger (58) propuseram medir a condutância de um PQ semicondutor *spinless*, acoplado à extremidade de um nanofio SC do tipo-p, conforme mostrado na Fig. 4 a, como uma maneira de averiguar a presença dos MBSs no nanofio. A análise teórica da condutância do PQ, acoplado a reservatórios de carga comuns, mostrou que aquela era alterada em metade de seu valor quando o nanofio passava pela transição de fase topológica, quando os MBSs podem ser observados. Recentemente, no entanto, foi demonstrado por E. Vernek et al. (59) que essa alteração na condutância unicamente não pode ser considerada uma prova definitiva da presença dos MBSs, considerando-se que demonstraram a mesma queda na condutância quando o nanofio se encontrava na fase trivial (não-topológica). Ainda assim, o sistema PQ-nanofio (SC topológico) é um modelo amplamente utilizado para se estudar propriedades básicas das junções PQ-MBSs, motivando diversos outros trabalhos.

Na Ref. (47), M. Leijnse e K. Flensberg propuseram uma junção PQ-SC-PQ, isto é, um PQ duplo (DPQ) conectado através de um terminal SC comum, que poderia ser ajustada para hospedar MBSs nos PQs. Esse ajuste seria feito através do controle do ângulo formado pelas direções de campos magnéticos externos individualmente aplicados a cada PQ. O sistema des-

Figura 4 – Dois modelos propõendo utilizar PQs para detectar MBSs.



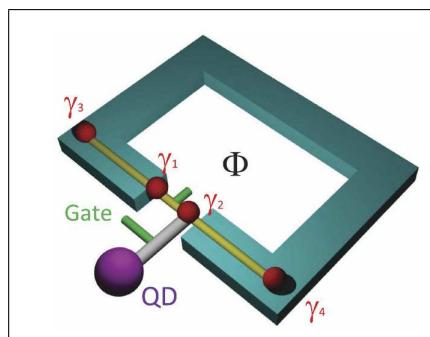
Fonte: **a** D. Liu e H. Baranger (2011) (58). **b** M. Leijnse e K. Flensberg (2012) (47).

**a** Um PQ semicondutor acoplado a uma das extremidades de um nanofio SC tipo-p. Variações na condutância do PQ são medidas através de reservatórios acoplados ao PQ. **b** Dois PQs são acoplados através de um SC tipo-s.  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  são as energias dos PQs, próximas ao potencial químico do SC, e controladas pelas tensões  $V_g^1$  e  $V_g^2$ . Campos magnéticos aplicados ( $B_1$  e  $B_2$ ) polarizam os spins nos PQs. Uma ponta de prova (*probe*) acoplada ao PQ 1 detectaria o MBS por tunelamento.

rito no artigo está reproduzido na Fig. 4 **b** e é utilizado como base para os modelos teóricos desenvolvidos nesta tese. Apesar deste sistema formar uma junção do tipo separador de pares de Cooper (ver página 21), os elétrons separados a partir do SC não são emaranhados, devido à polarização de spin provocada pelos campos magnéticos aplicados.

Por outro lado, na Ref. (30) é ressaltada a utilização de dispositivos com junções do tipo Josephson, os SQUIDs (ver nota de rodapé na p. 20) na detecção dos Majoranas. O sistema poderia ser utilizado para este fim uma vez que produziria oscilações no SQUID (que forma uma espira) com periodicidade diferente da usual. Por exemplo, no trabalho teórico de Zhi Wang e colaboradores, de 2015 (35), é proposta a utilização de um rf-SQUID (uma única junção tipo Josephson), para detectar os MBSs, conforme esquematizado na Fig. 5.

Figura 5 – Sistema que propõe utilizar um rf-SQUID acoplado a um PQ para detectar MBSs.



Fonte: Z. Wang *et al.* (2015) (35).

Sistema híbrido formado por um PQ (QD) acoplado a um MBS ( $\gamma_2$ ) presente na junção SC-N-SC de um rf-SQUID topológico. O acoplamento do MBS com o PQ é controlado por uma tensão de porta (*Gate*).

A proposta para o sistema da Fig. 5 é de utilizar as oscilações de Rabi<sup>15</sup> entre os estados de Majorana (indicados por  $\gamma_i$  na figura) para visualizar o efeito Josephson fracionário. Quando uma tensão alternada (ac) é aplicada ao terminal de *gate* para ajustar periodicamente o acoplamento entre o PQ e um dos MBS, o fluxo magnético através do SQUID modula a diferença de fase entre os dois MBSs na junção.

Outras propostas de utilização de PQs na detecção de MBSs ainda valem ser mencionadas. W.-J. Gong et al. (60) calcularam propriedades universais de transporte, tanto para o sistema formado por um único PQ acoplado a um MBS, como para o caso com dois PQs acoplados (DPQ-MBS). Em 2015, Chen e Zhu (61) propõe utilização de técnicas ópticas (*pump-probe*) para detectar assinaturas dos MBSs possivelmente presentes em um nanofio SC topológico. Neste caso, um PQ único é acoplado simultaneamente ao nanofio SC topológico e a um nanoresonador. No mesmo ano, estes autores publicaram um outro trabalho, Ref. (62), em que o PQ surge simultaneamente acoplado ao nanofio SC topológico, contendo MBSs, e a uma nanopartícula metálica, que produz plásmons. Os plásmons geram campos eletromagnéticos fortemente aumentados que interferem no campo elétrico sentido pelo PQ, aparentemente tornando a leitura dos MBSs mais sensível. Nos dois casos os autores afirmam que os espectros de absorção do PQ mostram uma separação que seria devida aos MBSs. Xia, Duan e Zhang propuseram também em 2015 (63) um esquema para se detectar MBSs por ressonância Fano em nanoestruturas híbridas feitas de PQs semicondutores e um fio quântico em proximidade a um supercondutor comum. Segundo os autores foi identificada uma relação entre o fator de Fano e o acoplamento entre os MBSs no fio (comumente chamado  $\varepsilon_M$ ), que poderia ser utilizada para medição de comprimentos na escala nanométrica em função da geometria proposta. Como detecção de MBSs, apenas concluíram que o método de medição seria robusto à perturbações externas e ao ruído.

As discussões de resultados propostas pelos autores em diversos desses trabalhos demonstram que a observação incontestável dos MBSs é uma tarefa complexa, principalmente no ramo experimental. Mas também indicam que todas essas propostas para se investigar os MBSs resultam na discussão de fenômenos físicos básicos, por vias não-tradicionais, com a utilização de SCs topológicos, junções PQ-SC de diversos tipos, etc. Toda essa multiplicidade de abordagens pode acabar por conduzir os pesquisadores a descobertas e aplicações além da questão dos MBSs e da computação quântica topológica.

## Motivação: Computação Quântica

A miniaturização dos transistores a cada dia caminha para seu ponto de saturação, indicado por G. Moore em 1965 (64). Não somente pela limitação espacial, mas também pelo maior gasto energético causado pelo grande número de transistores colocados nos chips. Por isso, as empresas de tecnologia buscam alternativas ao silício e algumas propostas, como a utilização

<sup>15</sup> Ver discussões na subseção 1.1.

de nanotubos de carbono, surgem promissoras (65). Entretanto, mesmo que essas alternativas consigam propiciar computadores tradicionais extremamente velozes e com consumo de energia reduzido, a realização de algumas tarefas por estes sistemas pode estar ainda fora de alcance.

A computação quântica - termo compreendido no âmbito do processamento de informação quântica (66) - surge nesse contexto como uma grande promessa, que seria capaz de provocar uma revolução no processamento de grandes conjuntos de dados, na criptografia e na pesquisa científica em geral. Em 1982, R. P. Feynman (67) apresentou suas ideias acerca do computador quântico, uma máquina que poderia simular sistemas quânticos (ver também (68)).

Um dos maiores responsáveis pelo desenvolvimento da computação quântica foi Peter Shor (69), que em 1994 apresentou o primeiro algoritmo para um computador quântico, o qual realiza a fatoração de um número inteiro em primos. Dependendo da quantidade de dígitos do número em questão, a tarefa pode ser tão complexa para um computador comum ao ponto de ser impraticável. Por esse motivo, a fatoração em primos é a operação chave das principais formas de criptografia atuais. A fatoração é hoje considerada uma operação básica para um computador quântico e dessa forma constitui um teste fundamental para estes dispositivos. Em 2001, L. Vandersypen e colaboradores demonstraram experimentalmente a fatoração do número 15 (70) em um sistema molecular, utilizando ressonância magnética nuclear para leitura do resultado. Através de uma abordagem chamada *Adiabatic Quantum Computation*, alternativa ao algoritmo de Shor, N. Xu et al. (71) conseguiram apenas recentemente (2012) fatorar o número 143<sup>16</sup>.

Além do algoritmo de fatoração, P. Shor também ajudou a pavimentar o estágio atual de desenvolvimento da computação quântica através da publicação de outros trabalhos nos anos seguintes (com colaborações diversas), em que demonstra que é possível escrever códigos de correção de erros para este tipo de computadores (ver, por exemplo, (73), (74) e (75)). Essas demonstrações foram uma motivação a mais para que a comunidade científica de fato concentrasse esforços no assunto.

Outro exemplo de problema clássico que pode ser resolvido com uma eficiência muito maior pela computação quântica é o da pesquisa em bancos de dados. Em um computador comum todas as informações armazenadas tem que ser acessadas uma de cada vez. Com o algoritmo proposto por L. Grover em 1996 (demonstrado experimentalmente em 1998 por J. Jones, M. Mosca e R. Hansen (76)), um computador quântico poderia buscar um resultado num tempo muito menor, por se utilizar do princípio de superposição para acessar diversas entradas simultaneamente. Essa tarefa evidencia a propriedade de paralelismo dos computadores quânticos.

Apesar de todos esses avanços, de dispositivos como memórias quânticas serem reais (77) e de empresas como a *D-Wave Systems*<sup>17</sup> inclusive afirmarem que já possuem computadores quânticos em funcionamento, a computação quântica está longe de ser um tópico esgotado, muito pelo contrário. Muito ainda se discute sobre as capacidades reais destes dispositivos,

<sup>16</sup> Os fatores encontrados são (11 e 13). Aparentemente, como indicado na Ref. (72), essa mesma abordagem tornou possível fatorar números maiores, chegando até mesmo a 56153, cujos fatores primos seriam 241 e 233.

<sup>17</sup> Página da empresa: <<https://goo.gl/p5F2WG>>. Questionamentos sobre este computador quântico, a base de supercondutores, podem ser vistos em (78).

que problemas podem ser solucionados apenas pela computação quântica, se sua relação custo-benefício poderia ultrapassar a dos computadores atuais e a escrita de novos algoritmos. O principal questionamento ainda reside na discussão sobre quais sistemas físicos utilizar para realizá-la.

Em um computador quântico, a unidade básica de informação (bit) deixa de ser binária para revelar o caráter quântico que lhe é próprio, assumindo não somente estes valores (0 ou 1), mas combinações (superposições) dos estados ortogonais  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Essa descrição delimita nossa concepção básica do que seria um quantum bit, ou *qubit*, termo cunhado por B. Schumacher em 1995. Assim, um *qubit* é um sistema quântico de dois estados, ou ainda, um objeto físico que pode ocupar diferentes combinações de dois estados quânticos (79).

A busca por sistemas quânticos que possam ser utilizados como *qubits* é abordada largamente por G. Popkin na Ref. (80) de 2016. O autor apresenta diversas propostas existentes e quão distante cada uma delas estaria da aplicabilidade. Discute também como as principais empresas do ramo de tecnologia da informação (Google, IBM, Intel, Microsoft, etc) estão trabalhando no desenvolvimento de propostas distintas de *qubits*, demonstrando que nenhum sistema seria preferível a outro neste momento. Inclusive, a hipótese de que diversos tipos de *qubits* poderão atuar em conjunto, executando diferentes tarefas, não pode ser descartada.

Os sistemas escolhidos para realização de *qubits* devem satisfazer simultaneamente a necessidade de controle coerente rápido, tempos de coerência longos e escalabilidade para milhares de *qubits* acoplados. Entre os sistemas físicos propostos para a implementação de *qubits* podemos mencionar: os estados de spin do elétron em um PQ único (81), (82), os estados de spin do buraco em um PQ duplo (molécula) (83); as polarizações de um fóton, os estados de spin de éxciton em PQs isolados (84); íons aprisionados em armadilhas ópticas (85) e *qubits* de paridade (47).

Outro sistema que concentra grande interesse é o de circuitos integrados quânticos (em analogia aos circuitos integrados (CI's) da eletrônica convencional). Esses circuitos são formados por diversos elementos diferentes como indutores e capacitores, e por junções tipo Josephson, geralmente compondo SQUIDs (ver página 20). Devido à utilização dos SQUIDs, convencionou-se chamar estes *qubits* de *qubits supercondutores*. São propostas três arquiteturas diferentes de acordo com as grandezas físicas que armazenam a informação: *qubits* supercondutores de carga (86), de fluxo (87) ou de fase (88). Na Ref. (89) entendemos a grande diferença que esta opção de *qubit* guarda em relação às demais: diferente de entidades microscópicas como átomos, íons e fótons, nos quais outros *qubits* são baseados, circuitos quânticos supercondutores são baseados no oscilador elétrico LC<sup>18</sup> e são sistemas macroscópicos com um grande número de átomos (geralmente alumínio) agregados na forma de fios ou chapas metálicas. A operação dos *qubits* SCs está baseada em dois fenômenos robustos: supercondutividade, que é o fluxo de fluído elétrico sem atrito através de um metal à baixa temperatura (abaixo da transição de fase supercondutora), e o efeito Josephson, que dota o circuito de não-linearidade,

<sup>18</sup> Um oscilador LC é composto por um indutor e um capacitor em paralelo.

sem introduzir dissipação ou *dephasing*.

A computação quântica é uma tarefa que exige o controle preciso das operações sob sistemas quânticos de dois níveis, que devem estar bem definidos, com um alto grau de coerência quântica. Como destacado nas referências (53), (90) e (91), em um computador quântico topológico, as informações armazenadas nos *qubits* e as operações realizadas sobre elas estão intrinsecamente protegidas de erros, devido à não-localidade dos ânions não-Abelianos que formam os *qubits* topológicos (os MBSs). Para a computação quântica não-topológica, por outro lado, deve-se lidar com a correção de erros manualmente, por assim dizer. Como destacamos anteriormente, o próprio Shor (73) desenvolveu algoritmos de correção de erros para um computador quântico trivial (sinônimo de não-topológico). No entanto, o próprio processo de correção de erros pode gerar certa quantidade de ruído, acabando por questionar a eficiência do processo como um todo. Dada essa enorme vantagem é que muitos esforços se voltam para a manipulação de *qubits* formados por MBSs.

De um modo geral percebe-se que as propostas mais atuais para a computação quântica estão cada vez mais complexas, com o surgimento de diversas propostas de sistemas híbridos. São encontrados muitos trabalhos propondo a utilização de *qubits* supercondutores na leitura de estados topológicos ou de MBSs ((62), (87), (92), (93), (94)). Na Ref. (95) é proposto um conjunto de portas lógicas universais que agem em um *qubit* híbrido, formado pelo acoplamento de um *qubit* de spin de um PQ e um *qubit* de MBSs. Estas propostas demonstram que a separação entre computação quântica trivial e topológica não é tão rigorosa, e que é provável que o futuro da computação quântica seja combinar efeitos para produzir os melhores resultados.

Independente das propostas que sejam desenvolvidas, a manipulação coerente dos estados quânticos que compõe os *qubits* é uma tarefa crítica para o desenvolvimento do processamento da informação quântica.

## Manipulação Coerente de Estados Quânticos

Uma das questões centrais no desenvolvimento da computação quântica é que a informação armazenada nos estados quânticos que compõem os *qubits* não se perca durante o processamento. As interações do sistema com o ambiente, através de processos de espalhamento, acabam provocando a perda da informação quânticamente armazenada. Este evento é tratado generalizadamente como decoerência, por ser a própria definição de perda da coerência <sup>19</sup>.

<sup>19</sup> Outra forma de entender erros: Um estado quântico genérico de um *qubit* pode ser representado como um vetor unitário  $\vec{S}$  apontando em uma esfera - a chamada esfera de Bloch. Duas classes de erro amplas podem ser distinguidas. A primeira corresponde à ponta do vetor de Bloch sendo espalhada na direção da latitude, ou seja, ao longo do arco que une os dois polos da esfera. Este processo é chamado de relaxação de energia ou mistura de estados. A segunda classe corresponde à ponta do vetor de Bloch sofrendo espalhamento na direção longitudinal, perpendicularmente à linha que une os dois polos. Este processo é chamado *dephasing* (perda de fase) ou decoerência (96)

A coerência é definida por sua relação com a propagação da função de onda:

A dinâmica de uma onda plana clássica, com dado vetor de onda e frequência, é determinada pela solução da equação de onda relevante. Em geral, a onda é descrita por um campo variando no tempo e no espaço  $\Psi(r, t)$ . A propagação desta função de onda é chamada **coerente** se, sabendo a amplitude e a fase em um dado ponto no espaço em certo tempo, podemos imediatamente dizer as amplitudes e as fases de todos os outros pontos no tempo e espaço. (Torsten Meier; Peter Thomas; Stephan W. Koch, 2007, p.4, tradução nossa, (97).)

Dessa forma, quando discutimos a manutenção da coerência de um sistema, estamos de fato nos perguntando como preservar a fase com que a função de onda se propaga. Em contraste com dispositivos de processamento de informação convencionais, com sistemas descritos por estados incoerentes, cuja manipulação requer apenas alterações de intensidades de correntes elétricas e excitações ópticas, os estados que compõe o *qubit* são um estado de superposição que carrega amplitude e fase. Sendo assim, “o objetivo do controle coerente é utilizar um campo de controle, personalizado na fase e na amplitude, para navegar o espaço de Hilbert de um sistema, sem destruir o frágil estado quântico” (A. J. Ramsay, 2010, tradução nossa, p.1, (98)).

A maneira mais imediata de se identificar a propagação coerente de um estado quântico (ou sua manipulação coerente) é pela observação das oscilações de Rabi: um comportamento manifestado por oscilações suaves de perfil senoidal, que preservam frequência e amplitude, enquanto os estados quânticos permanecerem bem isolados do ambiente<sup>20</sup>.

Por esse motivo, em geral, a definição matemática é colocada em segundo plano, substituída pela busca de se observar oscilações que apresentem maior duração e amplitude possíveis. Enquanto durarem as oscilações de Rabi, o sistema permanece coerente e é possível a realização de operações lógicas sobre ele. Essas operações lógicas na realidade são sequências de operações unitárias de rotação realizadas sobre os *qubits* - as chamadas portas lógicas - e elas devem ocorrer num tempo suficientemente menor que o tempo de decoerência (99).

A manipulação coerente de estados envolve a habilidade de preparar, controlar e detectar estados quânticos isolados. Para cada uma dessas habilidades muito progresso foi feito desde a proposta de Feynman (67) ou da proposição dos algoritmos de Shor (69). No que diz respeito à manipulação de estados de PQs isolados, temos o trabalho pioneiro de N. H. Bonadeo et al. (100), em 1998, onde foi demonstrado pela primeira vez o controle coerente de um exciton neutro em um único PQ, utilizando uma excitação óptica na escala de picossegundos. Nesta técnica de interferometria, incidem-se sobre o PQ dois pulsos ópticos sequenciais, cujas fases são controladas pelo tempo de interação e pela sua polarização, numa escala de tempo menor que o tempo de decoerência conhecido para o exciton. De acordo com a técnica experimental utilizada para fazer o controle<sup>21</sup>, as oscilações de Rabi, que garantem a coerência na manipulação do estado de exciton, se manifestam em medidas de luminescência integrada no tempo,

<sup>20</sup> Detalhes na seção 1.1.

<sup>21</sup> Ver ‘p-shell control with PL detection of s-shell’ na Ref. (98).

como função do tempo de *delay* entre os dois pulsos aplicados. A partir deste resultado, os autores conseguiram estimar um tempo de coerência para o sistema excitônico de 40ps.

Após este trabalho, diversos outros buscaram formas alternativas de se manipular, não somente os estados de exciton neutro (101), (102), mas também o spin do elétron (103) e do buraco em um PQ isolado (104). Inclusive com métodos experimentais distintos, como as técnicas *pump-probe* (105) e *fluorescência por ressonância* (106).

A Ref. (102) ressalta que PQs semicondutores são viáveis para o controle coerente pois, "uma vez que o confinamento espacial do exciton conduz à observação de níveis de energia discretos, os eventos de espalhamento são suprimidos fazendo com que os tempos de coerência sejam maiores que no material *bulk*".

Na Ref. (9), Koppens e colaboradores mostraram em 2006 a capacidade de se controlar coerentemente o estado de spin de um único elétron, confinado em um ponto quântico duplo, através de medidas de ressonância de spin eletrônico (*ESR - Electron Spin Resonance*). Além disso, observaram que poderiam realizar rotações coerentes com o spin eletrônico neste sistema, ao aplicar pulsos de radiofrequência de duração diferentes. O gráfico da corrente em um PQ como função da duração dos pulsos, apresentou oscilações periódicas que são identificadas como oscilações de Rabi, garantindo a coerência da operação.

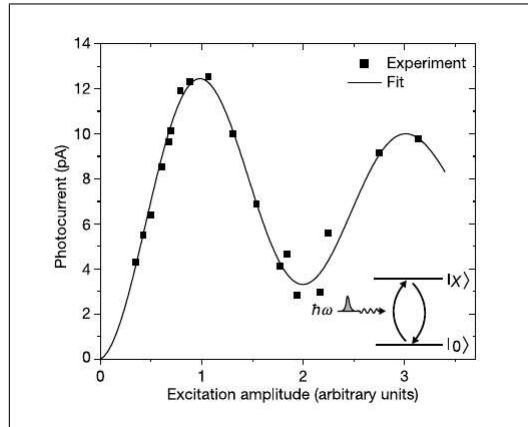
De 1999, Nakamura e colaboradores (86) demonstraram controle coerente de estados, via pulsos elétricos, em uma Cooper-pair box, que seria um *qubit* SC de carga (baseados em junções SC-PQ-SC ou Josephson). Os autores observaram oscilações quânticas (de Rabi) através da aplicação de pulsos de tensão curtos por um eletrodo de *gate*. O pulso modifica a energia dos estados de carga não-adiabaticamente, criando um estado ressonante, superposição dos dois estados de carga, que é detectado por uma corrente de tunelamento através de uma ponta de prova. Este resultado é importante porque demonstra o controle coerente de objetos macroscópicos (*qubit* supercondutores).

Apesar de podermos utilizar diversos tipos de excitações para manipular coerentemente estados quânticos, a utilização de luz laser muitas vezes é mais adequada ou preferível. A coerência de semicondutores *bulk* tende a ser destruída numa escala de tempo entre 0,1 e 10 ps, devido à estrutura de bandas complexa, que provoca rápida perda de fase. Em sistemas com quantização de grandezas, (por exemplo, PQs) os tempos de coerência são mais longos, caso dos tempos de coerência dos spins, que são da ordem de microssegundos. Sendo assim, a geração de elétrons, buracos e excitons, seu controle e leitura, quando realizadas com técnicas que trabalhem em escalas de tempo ultra-rápidas, não garantir um grande tempo de coerência, com várias operações lógicas realizadas num curto período de tempo (82), (97).

Para um sistema formado por um PQ semicondutor sobre o qual é incidida uma luz coerente (laser), é possível fazer a leitura da corrente gerada pela excitação óptica, através do tunelamento de portadores a eletrodos acoplados ao PQ. O sinal de corrente obtido nesta situação é chamado *fotocorrente*. Em 2002, A. Zrenner et al. (107) demonstraram experimentalmente a leitura deste sinal. As oscilações coerentes no sistema de dois níveis formado por um PQ de

InGaAs, excitado opticamente, foram observadas no gráfico da fotocorrente como função da amplitude da excitação. O resultado principal deste trabalho está reproduzido na Fig. 6.

Figura 6 – Fotocorrente obtida experimentalmente em um fotodiodo de PQ único.



Fonte: A. Zrenner et al. (2002) (107).

Oscilações de Rabi na fotocorrente em função do aumento da amplitude de excitação.

O controle coerente do sistema através da fotocorrente tem como principal vantagem a eficiência na detecção: todos os portadores que tunelam a partir do PQ contribuem para o sinal da fotocorrente, formando um sinal consistente.

Em 2004, J. M. Villas-Bôas et al. (108) demonstraram teoricamente que é possível utilizar oscilações de Rabi para controlar coerentemente o tunelamento eletrônico em uma molécula de PQs. Variando a intensidade do pulso óptico aplicado sobre um dos PQs, o tunelamento entre eles pode ser suprimido ou incrementado. Neste trabalho os autores propõem teoricamente a verificação de tunelamento fóton-assistido entre os PQs através de medição da fotocorrente, utilizando para isso uma estrutura de fotodiodo tal como a da Ref. (107), porém com PQ duplo, ao invés de um PQ isolado, na região opticamente ativa.

Ressaltamos também a Ref. (109) de 2011, em que A. Greilich e colaboradores demonstram o controle óptico ultra-rápido do spin de um buraco em um diodo tipo p-i-Schottky com dois PQs acoplados de InAs/GaAs, carregados com um número controlado de buracos. Embora não meçam a fotocorrente, outras medidas como a fotoluminescência, demonstram o controle óptico dos spins de buracos interagindo em PQs separados.

Os exemplos apresentados demonstram como a observação das oscilações de Rabi na fotocorrente pode ser utilizada em sistemas de PQs simples e duplos para manipulação coerente dos estados quânticos.

## Dubletos de Autler-Townes

No contexto do controle coerente de estados quânticos com lasers, é importante compreender como a interação radiação-matéria pode interferir na estrutura de bandas do material. Dentre os fenômenos ópticos possíveis, o de maior interesse neste trabalho é o *efeito de Autler-Townes*. O efeito é caracterizado em espectroscopia, por exemplo, quando um sistema de dois níveis é exposto a um laser com frequência próxima da transição. Em seu espectro de absorção é possível observar a separação dos picos em dois conforme aumenta a intensidade do laser aplicado. Este perfil é o que se reconhece como dubletos de Autler-Townes. Teoricamente estes dubletos são caracterizados na representação de estados vestidos (*dressed states*) como um desdobramento dos estados despidos (*bare states*), estes, autoestados do Hamiltoniano do sistema de dois níveis antes da exposição ao laser (110). Ao longo dessa seção, buscamos ampliar a compreensão do tema a partir dos pontos de vista experimental e teórico.

Consideremos então um sistema de dois níveis ou *qubit*, por exemplo, o estado de um elétron em um PQ semicondutor (sem considerar o spin). O elétron pode estar no estado fundamental, ocupando um nível energético da banda de valência, ou no estado excitado, onde passa a ocupar um nível na banda de condução. Uma transição eletrônica entre estes níveis pode acontecer pela aplicação de um laser sobre o PQ<sup>22</sup>, com absorção de fótons no material. Consideramos que o valor da frequência do laser é em torno da frequência de transição valência  $\leftrightarrow$  condução (ressonância) e que a intensidade do laser é alta. Adicionemos a este quadro um terceiro nível eletrônico, por exemplo, um nível na banda de condução de outro PQ, que se acopla exclusivamente ao nível de condução do primeiro PQ. Temos então, uma transição valência  $\leftrightarrow$  condução no primeiro PQ, e uma transição condução  $\leftrightarrow$  condução, entre o primeiro e o segundo PQ.

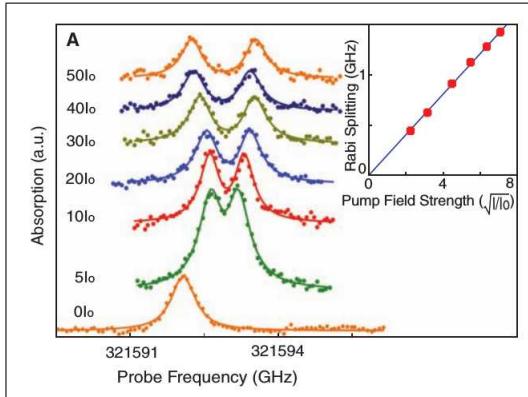
Do ponto de vista experimental é preciso considerar a aplicação de um segundo laser ao sistema. Este segundo laser, conhecido como laser de prova<sup>23</sup>, é aplicado sobre a transição condução  $\leftrightarrow$  condução e sua intensidade é baixa. A análise do espectro de absorção do laser de prova mostra que, conforme aumenta a intensidade do laser de bombeio aplicado sobre a transição valência  $\leftrightarrow$  condução, o pico de absorção do laser de prova se separa em dois, formando o perfil conhecido como *dubleto de Autler-Townes*. Para uma visualização inicial do fenômeno, apresentamos na Fig. 7 o espectro de absorção de um laser de prova aplicado a um sistema formado por um PQ semicondutor de InAs, embebido na estrutura de um diodo Schottky, que é excitado previamente por um laser contínuo (cw) de forte intensidade. Essa figura é reproduzida do trabalho de X. Xu e colaboradores, de 2007 (111).

Quando a intensidade do laser de acionamento é baixa, os picos do dubleto podem ser indistinguíveis. Como consequência pode ocorrer interferência destrutiva e a leitura da absorção do laser de prova ser nula (112). Isso pode ser verificado pelo resultado do *inset* da Fig. 7, que

<sup>22</sup> O chamado laser de *pump*, bombeio ou acionamento. Técnicas do tipo *pump- probe* são utilizadas frequentemente no estudo de fenômenos ultra-rápidos. Um laser de *pump* excita a amostra e, após um tempo de delay ajustável, um laser *probe* é utilizado para verificar a resposta da amostra à excitação <[https://www.rp-photonics.com/pump\\_probe\\_measurements.html](https://www.rp-photonics.com/pump_probe_measurements.html)>.

<sup>23</sup> Também chamado *probe*, laser de leitura ou sonda.

Figura 7 – Observação do dubleto Autler-Townes em um espectro de absorção óptica.



Fonte: X. Xu et al. (2007) (111).

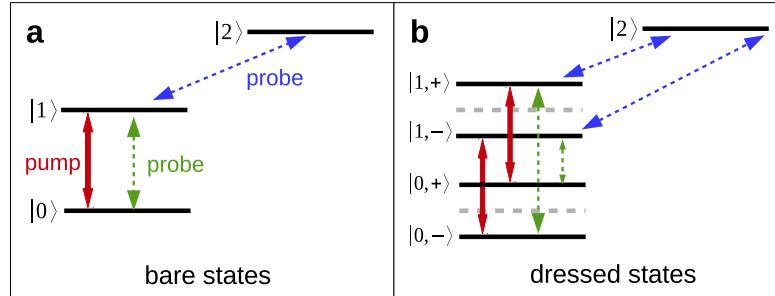
Espectro de absorção do laser de prova (*probe*) para diferentes intensidades de uma laser de bombeio (*pump*) aplicado sobre um PQ de InAs. O gráfico interno mostra a separação do dubleto (*Rabi splitting*) como função da raiz quadrada da intensidade do laser de *pump*.

mostra a separação do dubleto (*Rabi Splitting*) como função da intensidade do laser de *pump*. O gráfico mostra uma relação de dependência entre os dois parâmetros, sendo igual a zero na ausência do campo aplicado. Existe uma forte dependência também entre a separação do dubleto e a frequência de oscilação do elétron entre os níveis excitados pelo laser de *pump*, a frequência de Rabi. Na Ref. (113), os autores obtêm a frequência de Rabi do sistema a partir da relação entre a separação do dubleto e a (raiz quadrada da) intensidade do campo aplicado, obtida pela análise de um gráfico como o *inset* da Fig. 7. Esse valor é confrontado com medidas em resolução temporal das oscilações de Rabi, onde é possível obter a frequência diretamente. Os valores encontrados possuem boa concordância, demonstrando que o dubleto de Autler-Townes pode ser relacionado a processos coerentes (oscilações de Rabi).

O nome do efeito é devido ao trabalho de S. Autler e C. Townes de 1955 (114), onde os autores mostraram a divisão das linhas de absorção em duas componentes para o caso de uma molécula sob ação de uma radiação de micro-ondas. A separação das linhas de absorção é verificada pela interação entre um dos dois níveis da transição principal e um terceiro nível.

A formação do dubleto de Autler-Townes também pode ser observada do ponto de vista teórico. Conforme abordado na Ref. (110), o tratamento teórico do efeito pode ser semiclássico ou quântico. Para uma excitação coerente - caso dos lasers - a descrição semiclássica é suficiente. A descrição quântica das excitações, por sua vez, permite observar algumas características distintas do efeito de Autler-Townes, como anticruzamentos de níveis nos diagramas de energia, chegando a ser indispensável no tratamento de alguns sistemas, como as cavidades quânticas eletrodinâmicas. Não faz parte de nossos objetivos neste texto adentrar essa demonstração teórica dos dubletos de Autler-Townes, semiclássica ou quântica. Porém, convém rapidamente abordar a questão do desdobramento dos níveis eletrônicos (*Rabi splitting*) dentro da representação de estados vestidos (*dressed states*).

Figura 8 – Diagramas de energia mostrando a formação do dubletos de Autler-Townes.



Fonte: Autores (2017).

**a** Diagrama de energia de um sistema de três níveis, independentemente da interação óptica (bare states). Um laser intenso (*pump*) provoca uma transição eletrônica entre  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Lasers de prova (*probe*) de baixa intensidade podem ser usados para averiguar a resposta do sistema à excitação, tanto entre os níveis  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  como entre  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$ . **b** Diagrama de energia dos estados vestidos (dressed states), quando se considera o sistema total, níveis + interações ópticas. Os níveis  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  que considerávamos para estados despidos em **a** foram separados em dois novos níveis, de índices  $|0, \pm\rangle$  e  $|1, \pm\rangle$ . Note que, para o laser de *pump* existem duas transições possíveis, bem como para o laser de prova. Especialmente para o laser de prova entre  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$ , as duas leituras possíveis são exatamente a causa dos dois picos de absorção vistos no resultado experimental mostrado na Figura 7.

Na Fig. 8 são mostrados diagramas de energia de um sistema de três níveis, os quais poderiam ser perfeitamente adaptados para nosso exemplo com dois PQs. No painel **a** estão representados os estados despidos ou *bare states*. São os três níveis de energia que compõe o sistema, independentemente do campo óptico que será aplicado. No painel **b**, por outro lado, estão representados os estados vestidos ou *dressed states*, que surgem quando se considera o hamiltoniano níveis+radiação<sup>24</sup>.

Conforme detalhamos na legenda da Fig. 8, a representação de estados vestidos nos permite visualizar a origem dos dois picos de absorção do resultado experimental na Fig. 7. O desdobramento dos níveis, causado pelo forte acoplamento do material com o laser de bombeio, é verificado pelo laser de prova, que acopla fracamente um dos níveis excitados a um terceiro nível de referência.

No âmbito de junções PQ-SC, a quantidade de trabalhos abordando a ocorrência de dubletos de Autler-Townes é limitada. Exclusivamente para PQs semicondutores, além da Ref. (111), podemos mencionar o trabalho de H. Kamada et al. de 2001 (102), em que os autores observaram uma separação no espectro de luminescência do éxciton de um PQ semicondutor para diferentes intensidades do laser aplicado. A observação de dubletos também foi observada experimentalmente em PQs isolados em (115) e (116). Na Ref. (117) é feita uma revisão sobre a ocorrência do dubletos de Autler-Townes em PQ auto-organizados.

O efeito de Autler-Townes é observado com frequência em *qubits* SCs [(88), (89), (118), (119), (120)], nos quais estão presentes junções do tipo Josephson. Esses trabalhos demonstram

<sup>24</sup> Para detalhes sobre a obtenção da descrição teórica do efeito de Autler-Townes utilizando a abordagem de estados vestidos pode-se consultar a Ref. (110).

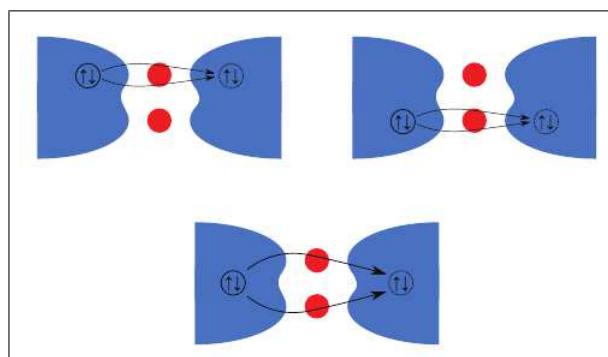
que a formação do dbleto é altamente presente no contexto de controle coerente em sistemas com supercondutividade e não somente em sistemas de PQs. Até o momento, não há na literatura trabalhos que analisem este fenômeno em sistemas tipo separador de pares de Cooper, de junções PQ-SC-PQ, seja no contexto de medições espectroscópicas ou em resolução temporal.

## Estudo proposto e alguns trabalhos relacionados

Com tudo que foi exposto até aqui, poderíamos ainda citar diversos trabalhos sobre propriedades de transporte ou manipulação coerente de estados quânticos em junções PQ-SC, pois são tópicos bastante atuais. De forma similar acontece com as conexões de PQs e SCs topológicos e com as propostas de *qubits* híbridos para o desenvolvimento da computação quântica, com grande quantidade de trabalhos publicados nos últimos anos, também em função da busca pelos férmons de Majorana em estado sólido. Grande parte dos trabalhos encontrados atualmente tratam de propostas com junções do tipo Josephson (SC-PQ-SC) pois estas, a princípio, oferecerem uma gama maior de aplicações em comparação às junções do tipo separador de pares de Cooper (PQ-SC-PQ). Com relação a resultados em resolução temporal, a amostragem se reduz ainda mais, para ambos os modelos de multijunção. Parece seguro dizer que, até o presente momento, a análise do regime transiente em sistemas compostos por junções múltiplas de PQs e SCs permanece inexplorada. Por isso, terminamos essa revisão ressaltando alguns trabalhos que possuem conexões relevantes com o modelo que proporemos a seguir.

Primeiramente, vamos tornar mais clara a diferenciação que fazemos entre junções Josephson e junções PQ-SC-PQ. A separação de pares de Cooper, por si só, não garante que as junções são diferentes, aja visto que em junções SC-PQ-SC também pode ocorrer separação de pares de Cooper, como pode ser visto na Fig. 9, reproduzida a partir da Ref. (121).

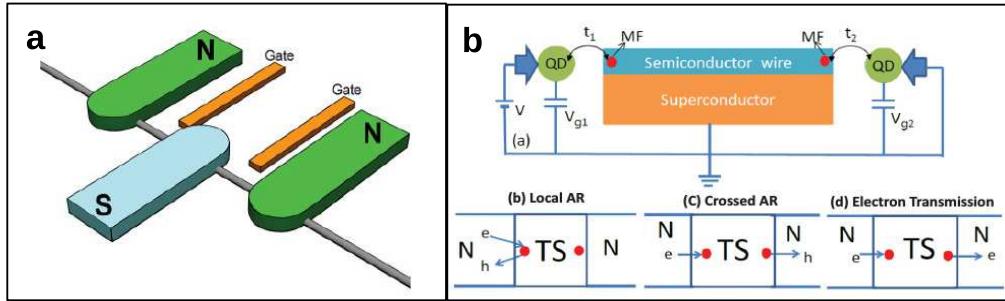
Figura 9 – Transporte de um par de Cooper por uma junção Josephson contendo um PQ duplo.



Fonte: R. Jacquet et al. (2015) (121).

Mecanismos de transporte por um dispositivo composto de dois SCs separados por um DPQ (dois PQs interagentes em paralelo). A transmissão do par de Cooper de um SC para o outro pode ocorrer diretamente pelo PQ superior (no alto à esquerda), pelo PQ inferior (no alto, à direita) ou com a separação do par, e cada elétron sendo transmitido através de um PQ.

Figura 10 – Dois exemplos de sistemas com junções PQ-SC-PQ.



Fonte: **a** D. Chevallier et al. (2011) (123). **2** Liu; Wang e Zhang (2014) (124).

**a** Junção DPQ-SC acoplada a reservatórios comuns (N). Os PQs são definidos no nanofio (cinza) pela ação dos eletrodos (*gate*). **b** Sistema com uma junção PQ-SC topológico-PQ. Na parte inferior, esquemas demonstram os processos de espalhamento que podem ocorrer nas interfaces entre os materiais (reflexão de Andreev local (AR), reflexão de Andreev cruzada (CAR) e transmissão do elétron (ET)).

Comparando as três situações da Fig. 9, concluímos que, mesmo se o par de Cooper se separar para ser transmitido pelo material não-supercondutor (PQ duplo), ele se combinará novamente no segundo SC. Sendo assim, o que diferencia a junção que chamamos separador de pares de Cooper, ou PQ-SC-PQ, é o estado final dos pares de Cooper, que permanecem separados uma vez que saem do SC para os PQs (e/ou reservatórios).

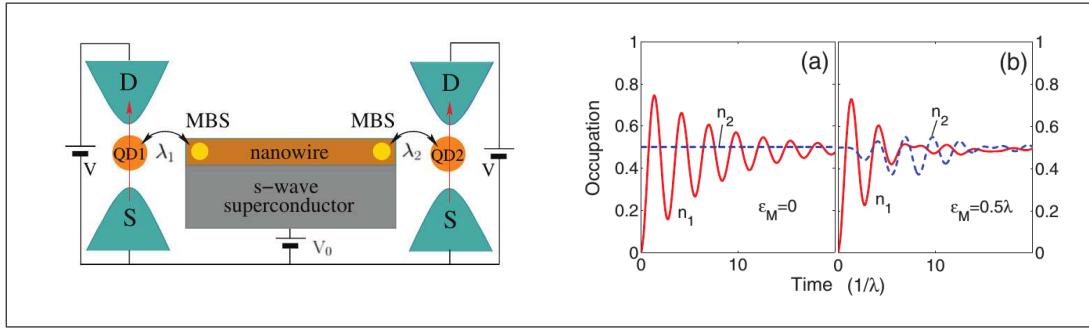
Em sua tese de doutoramento de 2010, E. C. Siqueira (122) estuda a influência da CAR no transporte de sistemas de PQs duplos acoplados a eletrodos SCs e ferromagnéticos, abordando também efeitos dependentes de spin. Utilizando o formalismo de funções de Green de não-equilíbrio, demonstra alguns fenômenos interessantes, como o controle da corrente elétrica pela reflexão de Andreev Cruzada. O trabalho é uma boa referência sobre a utilização do formalismo de funções de Green no estudo de junções PQ-SC.

Em 2011, D. Chevallier e colaboradores (123) estudaram teoricamente o sistema esquematizado na Fig. 10 **a**, com um PQ duplo acoplado através de um terminal SC comum. No painel **b** está representado o sistema estudado pelos autores da Ref. (124), que contém um nanofio formando uma junção com dois PQs. De fato, o nanofio pode abrigar estados ligados de Majorana nas suas extremidades (indicados por *MF* na figura) devido à supercondutividade do tipo-p induzida no mesmo<sup>25</sup>

Os sistemas mostrados na Fig. 10, relativos aos estudos das Ref. (123) e (124), estão agrupados devido às conclusões similares que resultam de ambos. Os resultados do primeiro trabalho, painel **a**, foram obtidos pela análise teórica de corrente elétrica e ruído no sistema, como função das variações de tensão nos eletrodos (N). Os resultados indicam a influência determinante dos valores de energia dos PQs sobre o comportamento das correntes elétricas no sistema. Por sua vez, para o sistema mostrado no painel **b**, foram feitas análises de transmitância para elétrons e buracos. Novamente, a configuração energética dos PQs demonstra grande influência sobre

<sup>25</sup> Esse modelo foi apresentado anteriormente - ver p. 24.

Figura 11 – Interferência de MBSs na evolução temporal das ocupações de um PQ duplo.



Fonte: P. Wang et al. (2013) (125).

Esquerda: sistema formado por uma junção DPQ-MBSs, onde cada PQ se acopla a dois eletrodos co-muns. Direita: evolução temporal da ocupação do PQ QD2 ( $n_2$ ) em resposta a um elétron que salta do PQ QD1 para o reservatório D acoplado a ele. com base no estado estacionário do PQ da esquerda.

os processos de espalhamento na junção (reflexão de Andreev local (AR), reflexão de Andreev cruzada (CAR) e transmissão do elétron (ET)). Nestes resultados também é dado destaque necessário para atuação do acoplamento entre os MBSs,  $\varepsilon_M$ , que também pode ser determinante sobre a dinâmica observada na junção, bloqueando ou permitindo esses processos de espalhamento conforme seu valor é alterado. Para ambos os sistemas (a e b), fica claro que o controle do posicionamento dos níveis eletrônicos nos PQs através das tensões de porta (gate), permite determinar como (e quais) cargas serão transmitidas através da junção.

No trabalho de P. Wang et al. (125), de 2013, o sistema estudado é similar ao da Fig. 10 b, porém cada PQ se acopla a dois reservatórios normais, ao invés de um. Uma representação esquemática deste sistema é exibida na Fig. 11 à esquerda. Para demonstrar a interferência dos MBSs no transporte através da junção, esses autores produziram um dos poucos resultados em resolução temporal que encontramos na literatura para uma junção do tipo PQ-SC-PQ. Um gráfico das ocupações dos PQs em função do tempo é reproduzido também na Fig. 11, à direita. Nos gráficos são analisadas as ocupações dos PQs em duas situações: na ausência (a) e na presença (b) do parâmetro de acoplamento entre os dois MBSs, a energia  $\varepsilon_M$ . A comparação dos resultados mostra que a ativação deste parâmetro provoca o surgimento de oscilações na ocupação  $n_2$ , do PQ 2 (QD2), que já estava com seu valor estacionário definido para  $t = 0$ .

Listamos resumidamente outros trabalhos teóricos relevantes envolvendo junções PQ-SC-PQ. Na Ref. (46) se verifica como a aplicação de potenciais elétricos dependentes do tempo aos PQs (bombeamento adiabático) afeta a ocorrência de reflexão de Andreev Cruzada através da junção. Em (126) é abordada a manipulação coerente de *qubits* de spins formados em dois PQs separados por um SC comum. A Ref. (127) faz um estudo teórico considerando interação de Coulomb nos PQs, com foco no emaranhamento dos elétrons que serão separados na junção a partir dos pares de Cooper. Na Ref. (128), de 2010, os autores também consideraram interação Coulombiana nos PQs. Neste trabalho os autores encontram um regime para o qual ocorre o bloqueio do transporte na junção, em função de características da tensão aplicada ao sistema,

que popula os PQs em um estado tripleto que desacopla os PQs do SC (de maneira efetiva).

Experimentalmente, temos o trabalho da Ref. (45), de 2010, em que L. G. Herrmann et al. medem a condutância em um sistema de dois PQs formados a partir de um nanotubo de carbono, conectado a dois eletrodos normais e um eletrodo supercondutor central. Estes autores conseguiram mensurar a corrente fluindo do supercondutor para os eletrodos normais, através dos PQs, demonstrando a separação de pares de Cooper por CAR. No trabalho de A. Das e colaboradores, de 2012, (129), é realizada experimentalmente a análise dos efeitos da interação Coulombiana sobre os processos na junção PQ-SC-PQ. O dispositivo foi construído a partir de um nanofio semicondutor de InAs, onde são induzidos PQs pela atuação de tensões de *gate*. O fio é acoplado a um SC central de Al e a contatos normais de Au. Medidas de condutância demonstraram bloqueio de Coulomb nos PQs, impedindo a separação dos pares de Cooper. Quando o bloqueio de Coulomb não acontece, o dispositivo mostra alta eficiência na separação de pares. Na Ref. (130), de 2012, Schindele, Baumgartner e Schönenberger também estudam a eficiência da separação de pares por medidas da condutância. Em seu sistema, porém, os PQs que compõe o sistema DPQ-SC, são formados a partir de nanotubos de carbono, acoplados a um SC de alumínio. O método de funções de Green de não-equilíbrio é utilizado nas Ref. (131) e (63), ambos no tratamento do transporte através de junções PQ-nanofio SC-PQ.

Por fim, no trabalho experimental publicado por I. V. Borzenets et al. em 2016 (132), os autores afirmam ter construído um dispositivo de separação de pares de Cooper otimizado em relação à propostas anteriores, utilizando um sistema totalmente composto de grafeno crescido por deposição química de vapor (CVD). A supercondutividade é induzida por proximidade em uma região do grafeno, pela deposição de Pb. Com este sistema conseguem demonstrar uma eficiência na separação dos pares de Cooper, pela medição das correntes individuais através de cada PQ de grafeno, de até 62%.

A partir desta revisão da literatura sobre junções PQ-SC-PQ, percebe-se que a análise do transporte em regime transiente não foi realizada até o momento (considerando-se ou não os SCs topológicos e os MBSs). No que diz respeito às interações ópticas nestas junções, a revisão também deixa claro que a formação dos dubletos de Autler-Townes e sua influência sobre o transporte não foi abordada (embora este tópico seja ligeiramente melhor abordado no contexto das junções Josephson ou SC-PQ-SC).

Por tudo que foi exposto é que o principal problema abordado nesta tese é o transporte quântico de carga em uma junção PQ-SC-PQ, sob incidência de uma luz laser coerente. Acreditamos que este é o primeiro trabalho a analisar a separação de pares de Cooper assistida por fôtons nesta junção, em regime de não-equilíbrio.

O sistema que utilizamos ao longo desta tese baseia-se no modelo de K. Flensberg e M. Leijnse descrito na Ref. (47), inicialmente proposto para a detecção de MBSs. Neste sistema um PQ duplo se acopla através de um SC comum, para também formar uma junção PQ-SC-PQ. De forma efetiva, o modelo é composto por um sistema de dois níveis com um único índice de spin (modelo *spinless*), associado a um terminal SC, a partir do qual os pares de Cooper são

formados ou separados.

Para considerar a atuação de uma excitação óptica, o sistema foi adaptado para uma combinação entre a arquitetura de DPQ-SC proposta na Ref. (47) e aquela vista na Ref. (107), de um PQ semicondutor embutido na estrutura de um diodo de barreira Schottky, sob o qual é aplicado um pulso de laser. O conhecimento prévio da estrutura e dos mecanismos de transporte em fotodiodos de PQs, necessário para a construção desta proposta com junções PQ-SC, foi obtido a partir de um trabalho anterior nosso (M. O. Assuncao et al, 2013 (133)), onde foram analisados efeitos térmicos sobre a fotocorrente gerada em um fotodiodo de PQ tal qual o da Ref. (107).

Os resultados encontrados são compreendidos em dois momentos. Primeiramente, estudamos o transporte dependente do tempo na junção PQ-SC-PQ sem considerar interações ópticas. Tratamos este sistema apenas como DPQ/SC. Para este sistema fomos capazes de identificar, na evolução temporal da corrente elétrica e das ocupações eletrônicas, assinaturas dos mecanismos de transporte através da junção, explicitamente, o tunelamento direto e a reflexão de Andreev cruzada. As condições para o transporte em junções PQ-SC-PQ identificadas em diversas referências citadas também foram encontradas na análise das oscilações de Rabi em resolução temporal. É o que acontece, por exemplo, com a definição do mecanismo de espalhamento nas interfaces da junção de acordo com a configuração energética dos PQs.

Adicionalmente, a análise fora do equilíbrio é feita para dois regimes de tensão distintos (alta e zero). Em um segundo momento incluímos a interação óptica, acompanhada de uma pequena alteração nos acoplamentos com os reservatórios, e a partir deste ponto o sistema considerado é tratado por DPQ/SC/Luz. Além de resultados equivalentes aos observados para o sistema simples (sem aplicação de luz), a análise do transiente em regime de forte acoplamento radiação-matéria mostrou a formação de dubletos de Autler-Townes no PQ excitado opticamente. Para tanto, os acoplamentos entre os níveis de condução dos PQs devem ser fracos. Como um resultado importante para o estudo de física básica em junções PQ-SC-PQ, pudemos observar, nas ocupações e correntes dependentes do tempo, a ocorrência de reflexão de Andreev cruzada (CAR) mediada pelo laser aplicado, através dos níveis que compõe o dubleto de Autler-Townes<sup>26</sup>.

Por fim, podemos destacar a potencialidade do sistema para aplicações práticas, pois este compõe um fotodiodo híbrido DPQ-SC, em que a participação do SC aumenta as funcionalidades de um dispositivo real, permitindo novos mecanismos de geração de fotocorrente, até então não investigados na literatura.

## Divisão do conteúdo desta tese

Na continuação deste capítulo introdutório, apresentamos com um pouco mais de detalhe as oscilações de Rabi e sua relação com a fotocorrente. Também contamos com uma seção sobre os mecanismos de espalhamento nas junções PQ-SC, visando tornar mais claro o entendimento

<sup>26</sup> ASSUNCAO, M. O.; SOUZA, F. M. Crossed Andreev reflection via Autler-Townes doublet in a quantum dot-superconductor junction. Em elaboração.

de fenômenos como a reflexão de Andreev cruzada. No capítulo 2 são apresentados os modelos que descrevem os sistemas físicos estudados. As técnicas e cálculos teóricos utilizados na obtenção dos resultados estão apresentadas no capítulo 3, onde destacamos a utilização da equação cinética de Kadanoff-Baym. Os resultados estão separados em dois capítulos: capítulo 4, com discussão de resultados para o sistema DPQ/SC sem considerar a interação óptica o capítulo 5, para o sistema completo, onde pode ser observada a formação dos dubletos de Autler-Townes. Nossas conclusões e perspectivas futuras são apresentadas no capítulo 7.

## 1.1 Oscilações de Rabi e Fotocorrente

Como destacado anteriormente, a fotocorrente é um mecanismo vantajoso para se operar o controle coerente de estados quânticos pois tem uma eficiência de detecção alta, propiciando gráficos de oscilações de Rabi mais refinados. No artigo de revisão da Ref. (98) são discutidas brevemente outras vantagens e desvantagens de se utilizar a fotocorrente como um método de observação e manipulação coerente. No trabalho desenvolvido nesta tese, propomos um modelo em que um sistema formado a partir de uma junção PQ-SC-PQ seria construído em uma estrutura de fotodiodo, com um dos PQs sendo excitado opticamente.

Para aplicações não computacionais, isto é, sem a preocupação pela manutenção da coerência, fotodiodos de PQs tem potencial para serem utilizados em spintrônica (pode-se induzir a formação de excitons com resolução de spin se a luz aplicada for circularmente polarizada, por exemplo) e na composição de células solares fotovoltaicas (134).

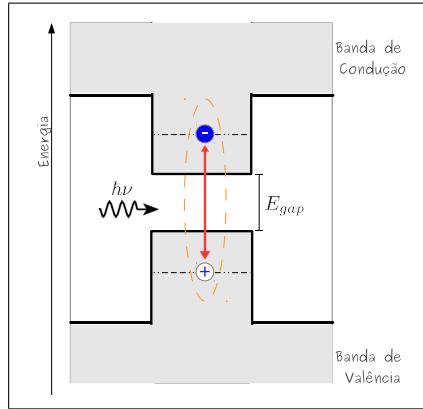
Na Fig. 12 está representado o potencial de confinamento vertical de um PQ semicondutor, com determinado gap de energia entre o topo da banda de valência e a base de condução  $E_{gap}$ . Um elétron inicialmente ocupando um nível da banda de valência pode ser excitado para um nível na banda de condução, formando assim um exciton, se for incidido sobre este PQ uma luz monocromática de frequência  $\nu \simeq (E_c - E_v)/\hbar$ , isto é, (aproximadamente ou) em ressonância com a frequência excitônica deste PQ.

Este problema é análogo ao problema estudado por I. Rabi em 1937 (135), em que ele calculou probabilidades de transição entre  $m = +1/2$  e  $m = -1/2$  para um sistema com momento angular  $J = 1/2$  que é submetido a um campo magnético que sofre precessão em relação à direção z. O próprio Rabi deixa clara a generalidade de sua fórmula afirmando que o modelo poderia ser utilizado para mensurar o momento magnético e o sinal de qualquer sistema.

Dessa forma apresentamos uma versão geral da equação de probabilidades encontrada por Rabi e, para tanto, utilizamos a abordagem dado no livro-texto de Mecânica Quântica de J. J. Sakurai (136), adaptada.

Modelando o potencial sinusoidal aplicado como  $V(t)$ , e as energias dos estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$

Figura 12 – Formação de um éxciton em um PQ semicondutor pela aplicação de luz.



Fonte: Autores (2012).

Representação da formação de um éxciton em um PQ semicondutor através da incidência de uma radiação monocromática de frequência  $\nu = (E_c - E_v)/\hbar$ , ressonante com o gap entre níveis eletrônicos presentes em cada banda.

em  $H_0$  temos:

$$H_0 = E_0|0\rangle\langle 0| + E_1|1\rangle\langle 1|, \\ V(t) = \gamma e^{+i\omega t}|0\rangle\langle 1| + \gamma e^{-i\omega t}|1\rangle\langle 0|, \quad (1.1)$$

em que  $\gamma$  é a intensidade do potencial aplicado e  $\omega$  é a frequência de oscilação, ambos reais e positivos.

Consideramos ainda  $E_1 > E_0$  e definimos  $(E_1 - E_0)/\hbar = \omega_{10}$ . Nesse contexto, a fórmula de Rabi seria:

$$|c_1(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{10})^2/4} \sin^2 \left( [\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{10})^2/4]^{1/2} t \right), \\ |c_0(t)|^2 = 1 - |c_1(t)|^2. \quad (1.2)$$

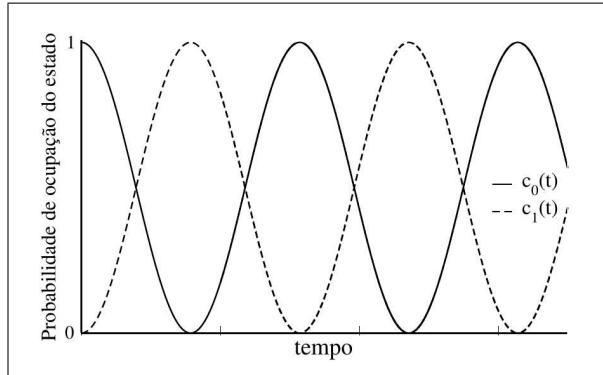
Para obter essa solução foi necessário definir condições iniciais para o problema. Neste caso, o nível inferior está populado em  $t = 0$  e o superior não, de modo que  $c_0(0) = 1$  e  $c_1(0) = 0$ . Um gráfico das probabilidades em função do tempo é mostrado na Fig. 13.

O gráfico da Fig. 13 mostra a evolução da população do estado fundamental  $|0\rangle$  para o estado excitado  $|1\rangle$  e de volta ao estado fundamental. Esse processo é o que efetivamente chamamos *oscilações de Rabi* (ou ciclo de Rabi). Essa oscilação tem uma frequência, a frequência de Rabi, dada pelo argumento da função  $\sin^2(\Omega_R t)$ , de modo que:

$$\Omega_R = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{10})^2}{4}}. \quad (1.3)$$

A amplitude da oscilação por sua vez, é dada pelo termo que multiplica toda a função seno na equação (1.2). Uma análise rápida mostra que amplitude máxima acontece quando  $\omega \simeq \omega_{10}$ ,

Figura 13 – Oscilações de Rabi em um gráfico de evolução temporal de probabilidades.



Fonte: Autores (2012).

Evolução temporal das probabilidades de ocupação  $|c_0(t)|^2$  e  $|c_1(t)|^2$  de acordo com as expressões da Eq. (1.2). Esse padrão é observado quando um potencial oscilatório de frequência  $\omega = \omega_{10} = (E_1 - E_0)\hbar$  é aplicado a um sistema de dois estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , sendo as energias dos estados fundamental e excitado,  $E_0$  e  $E_1$ , respectivamente.

Isto é, quando a frequência angular do potencial aplicado externamente é aproximadamente igual à frequência característica do sistema de dois níveis, a chamada condição de ressonância (136). Nessa situação a frequência de Rabi  $\Omega_R$  passa a depender diretamente da intensidade do campo aplicado  $\gamma$ .

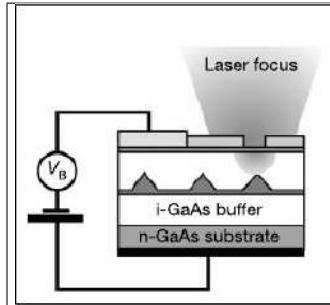
O resultado demonstrado genericamente para dois estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  pode ser adaptado para o problema da formação do exciton na Fig. 12, onde associamos o nível  $|0\rangle$  com  $|v\rangle$ , na banda de valência e  $|c\rangle$  com  $|1\rangle$ , na banda de condução. Desse modo,  $|c_0(t)|^2$  poderia ser aplicada para o nível  $E_v$  e  $|c_1(t)|^2$  para  $E_c$ . As oscilações de Rabi observadas na Fig. 13 seriam exatamente as mesmas para a evolução das populações dos estados  $|v\rangle$  e  $|c\rangle$  do PQ, se é incidida sobre ele uma luz monocromática.

Oscilações de Rabi são, dessa forma, identificadas por um perfil oscilatório senoidal na evolução temporal de populações em sistemas quânticos de dois estados. É importante ressaltar que este comportamento é observado apenas em sistemas quânticos, sendo uma assinatura da coerência quântica da evolução do sistema. Obviamente, para uma situação ideal como esta, em que o sistema está isolado do ambiente, as oscilações não perdem amplitude - o que sinalizaria a perda de coerência. Em geral não é possível, no entanto, que os sistemas estejam tão protegidos das fontes de ruído e perda de informação. Mais ainda, operações sobre os estados requerem alguma interação com medidores ou canais de tunelamento, que possam receber e enviar informações. Na presença destes mecanismos vamos, em geral, observar a diminuição da amplitude das oscilações de Rabi.

A Fig. 14 mostra um esquema do dispositivo utilizado para obter o resultado mostrado na Fig. 6, que mostra como as oscilações de Rabi também se manifestam em medidas da corrente elétrica gerada coerentemente por interação do PQ com uma luz incidida.

Um **diodo** é um dispositivo que compõe circuitos eletrônicos e delimita o fluxo de corrente

Figura 14 – Modelo de fotodiodo de um único PQ



Fonte: A. Zrenner *et al.* (2002) (107).

Representação do fotodiodo com um PQ único. A figura demonstra a heteroestrutura utilizada na confecção do diodo tipo Schottky, com a camada de PQs auto-organizados na região intrínseca, sendo acessada opticamente com a utilização de uma máscara, a qual permite o acesso a um único PQ. A estrutura de diodo é que permite a separação dos portadores que surgem devido à excitação óptica em diferentes eletrodos, localizados na base e no topo do dispositivo, e que fornecem a leitura da corrente elétrica.

elétrica em um único sentido. O princípio de funcionamento de um diodo é a presença de uma barreira de potencial na junção entre materiais semicondutores com diferentes dopagens.

Em semicondutores tipo n, o excesso de elétrons livres no material faz o nível de Fermi se aproximar da banda de condução enquanto nos semicondutores tipo p, o número maior de buracos aproxima o nível de Fermi da banda de valência. Quando se forma uma heterojunção, apenas um nível de Fermi é esperado. Por isso ocorre a difusão de portadores em excesso entre os dois lados da junção. A difusão é interrompida pela formação de camadas carregadas em ambos os lados da junção, a partir do campo elétrico direcionado de n para p, criado pela própria difusão. A região em que as cargas negativas e positivas se acumulam é chamada de camada de depleção, onde existe uma diferença de potencial associada ao campo elétrico criado, formando efetivamente uma barreira de potencial, que impede as cargas de se deslocarem nos dois sentidos (137).

**Fotodiodos** são estruturas que detectam uma luz aplicada pela sua conversão em corrente elétrica. Esses dispositivos são baseados na criação de pares elétron-buraco (éxitons). Em fotodiodos de junção p-n, a excitação ressonante de uma transição eletrônica resulta na absorção de um fóton, o que provoca a criação de par elétron-buraco na região próxima à camada de depleção. O próprio campo elétrico formado em uma junção p-n promove a separação dos portadores em sentidos diferentes. Um campo elétrico externo (tensão) aplicado faz os portadores se deslocarem em sentido opostos.

Depois que uma excitação é aplicada, o par elétron-buraco pode recombinar radiativamente, produzindo um espectro fotoluminescente ou é possível gerar uma fotocorrente no sistema. Para tanto, dois reservatórios de carga são acoplados à heteroestrutura utilizando um contato Schottky. Uma tensão de *bias* (fonte-dreno) aplicada provoca uma deformação no perfil de potencial da barreira, o que força elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência

do PQ a tunelar para eletrodos diferentes. Dessa forma é gerada uma corrente que, por ser foto-gerada, chamamos **fotocorrente**.

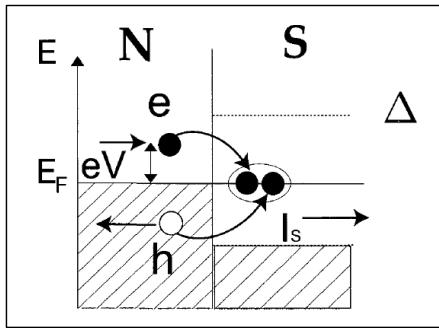
Em 2013, em conjunto com outros colaboradores (133), estudamos teoricamente efeitos de temperatura sobre a fotocorrente neste modelo de dispositivo, utilizando funções de Green de não-equilíbrio e técnicas numéricas para abordar o problema em resolução temporal.

## 1.2 Mecanismos de espalhamento nas junções Ponto Quântico-Supercondutor

Quando estudamos junções de materiais normais (N) (isolantes, semicondutores e metais) e SCs, é fundamental conhecer os fenômenos de espalhamento que interferem no transporte de carga (e spin) através destas estruturas. Conforme a sequência de interfaces, podem surgir mecanismos diferentes. Vamos abordar os principais nesta seção.

**Reflexão de Andreev Local (AR):** Fundamentalmente, podemos acoplar um material N a um SC, de modo que exista apenas uma interface pela qual os portadores de carga vão ser transportados. Um exemplo do processo de espalhamento que ocorre nessa situação pode ser visualizado no esquema da Fig. 15 (reproduzido de S. Russo, de 2007 (40)).

Figura 15 – Representação esquemática da reflexão de Andreev local.



Fonte: S. Russo (2007) (40).

Na AR, um elétron de condução  $e$ , que se desloca em direção à interface N/SC, com energia  $eV$  (menor que o gap do SC,  $\Delta$ ) e momento  $\vec{k}$ , se acoplando a um segundo elétron de N na banda de valência, com energia  $-eV$  e momento  $-\vec{k}$ . Juntos eles formam um par de Cooper no SC, provocando a reflexão de um buraco  $h$  em N na direção oposta à direção de propagação da corrente supercondutora  $I_{SC}$ .

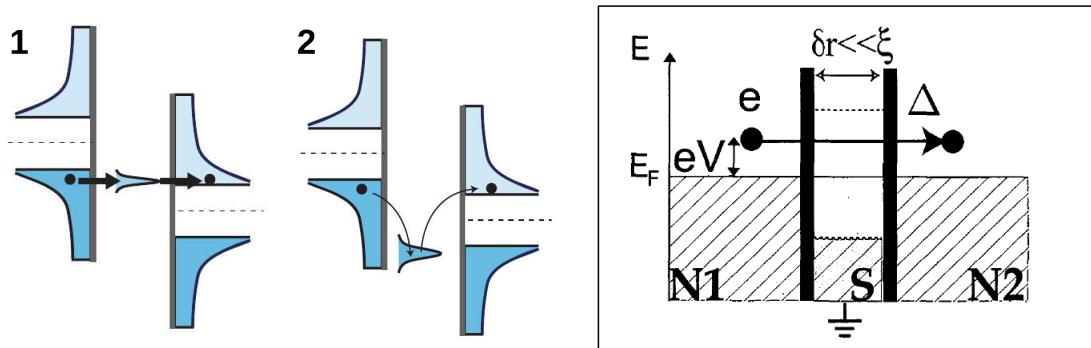
Na AR, um elétron que atinge a interface entre os dois materiais a partir de N, com energia inferior a do gap SC, se une a um outro elétron, também de N, com momento e energia de sinais opostos que o primeiro elétron, para serem transferidos ao SC na forma de um par de Cooper (28). A AR é o mecanismo microscópico que explica a conversão da corrente elétrica dissipativa

tiva em um material comum, em corrente supercondutora, para a qual não ocorre dissipação.

**Co-tunelamento Elástico (EC):** Existem processos de tunelamento de diversas ordens. O tunelamento comum, com estados iniciais e finais de mesma energia é um processo de primeira ordem. Por outro lado, o co-tunelamento elástico é um processo de segunda ordem. Nele as partículas tunelam de um estado inicial a um estado final por um estado virtual. Os estados inicial e final devem ter a mesma energia para o processo de co-tunelamento ser considerado elástico. Embora os níveis virtuais utilizados no co-tunelamento possam ter qualquer energia, a probabilidade de transporte diminui com o aumento da diferença de energia entre os níveis virtuais e reais (30). Ilustrando o que foi exposto temos a Fig. 16, que mostra os processos de tunelamento **1** e co-tunelamento **2** em uma junção SC-PQ-SC.

Em uma junção N-SC-N, por outro lado, o co-tunelamento acontece entre dois materiais N. Os níveis virtuais utilizados são estados de quasipartícula do SC, não envolvendo, portanto, a criação ou aniquilação de pares de Cooper. Na Fig. 16, à direita, está demonstrado um esquema da transferência de quasipartículas na junção em questão por co-tunelamento.

Figura 16 – Representação esquemática do co-tunelamento elástico.



Fonte: Esquerda **1-2**: S. De Franceschi *et al.* (2010) (30). Direita: S. Russo (2007) (40).

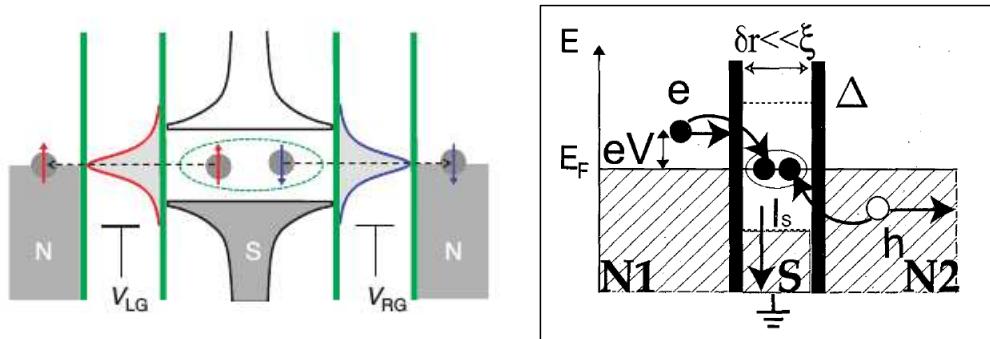
**1** Tunelamento e **2** co-tunelamento elástico de quasipartículas em uma junção SC-PQ-SC. Direita: Representação gráfica de transporte por co-tunelamento elástico em uma junção N-SC-N. Neste caso, a separação entre os materiais normais deve ser bem menor que o comprimento de coerência do SC, caso contrário, tal processo não poderá ocorrer.

**Reflexão de Andreev Cruzada (CAR):** Na reflexão de Andreev cruzada, dois materiais normais são conectados através de um SC (N-SC-N). Na Fig. 17 à esquerda, é ilustrada a CAR do SC para os materiais normais e, à direita, dos reservatórios normais para o SC.

No primeiro caso, o fenômeno acontece em uma junção PQ-SC-PQ, com cada PQ (representado por uma largura de linha) se acopla a um reservatório normal. A figura corresponde a um *Cooper-pairs Splitting*: um par de Cooper no centro do gap SC é separado em duas quasipartículas (elétrons), que são deslocados em direções opostas, por potenciais aplicados aos

eletrodos, por exemplo. No caso da direita, a ocorrência de CAR depende fortemente da separação entre os materiais normais, que não pode ultrapassar o comprimento de coerência do SC, já que o processo depende de que os elétrons se "enxerguem" através do SC.

Figura 17 – Representação esquemática de Reflexão de Andreev Cruzada.



Fonte: Esquerda: A. Das *et al.* (2012) (129). Direita: S. Russo (2007) (40).

Esquerda: Separação de pares de Cooper por CAR em uma junção PQ-SC-PQ, com resolução de spin. Direita: em uma junção N-SC-N, com uma separação entre os materiais normais muito menor que o comprimento de coerência SC ( $\delta r \ll \xi$ ), um elétron se aproximando da primeira interface ( $N1 - S$ ) se acopla com um elétron em  $N2$  para formar um par de Cooper no SC. Com isso, um elétron é refletido na segunda interface ( $S - N2$ ) e uma corrente  $I_S$  de pares de Cooper se forma devido ao aterrramento.

É válido ressaltar que tanto CAR como EC podem acontecer na mesma junção (N-SC-N). O que determina qual processo vai ocorrer, no sentido de formar um par de Cooper, depende da geometria da junção, que afeta o overlap entre as funções de onda evanescentes de uma partícula.

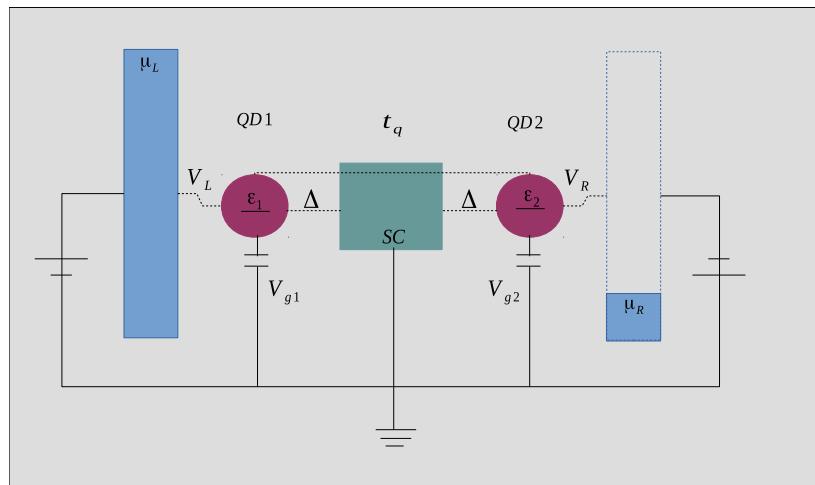
## 2 Modelos Estudados

Nosso intuito neste capítulo é apresentar os modelos teóricos utilizados na descrição dos sistemas físicos estudados. O primeiro sistema é formado por um PQ duplo acoplado a um SC comum (seção 2.1) e o segundo sistema, apresentado na seção 2.2, é uma expansão do primeiro, contando com a inserção de uma interação óptica no PQ 1. Também apresentamos neste capítulo a análise dos autovalores para cada caso, obtidos a partir da diagonalização dos Hamiltonianos para o sistema isolado. Essa análise nos permite conhecer de antemão valores de energia significativos para os processos de transporte através da junção PQ-SC-PQ formada em ambos os sistemas.

### 2.1 Ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor tipo-s

O sistema originalmente proposto na referência (47) é composto por dois PQs semicondutores acoplados, via barreiras de tunelamento, a um SC tipo-s. Uma representação do sistema considerado é apresentada na Fig. 18.

Figura 18 – Representação esquemática do sistema DPQ/SC.



Fonte: Autores (2017).

Os PQs 1 e 2 (QD1 e QD2) estão acoplados entre si ( $t_q$ ) e a um SC tipo s( $\Delta$ ). As energias dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  em cada PQ estão próximas do potencial químico do SC e são controladas pelos potenciais de porta  $V_{g1}$  e  $V_{g2}$ . O PQ 1 se acopla ao reservatório da esquerda ( $V_L$ ), enquanto o PQ 2 se acopla ao reservatório da direita ( $V_R$ ).  $\mu_L$  e  $\mu_R$  são os potenciais químicos dos reservatórios da esquerda e da direita, respectivamente.

Na Fig. 18 são mostrados os PQs 1 e 2, cada um submetido a um potencial de porta  $V_g$ , através do qual a posição do nível pode ser ajustada. Ao centro temos o SC tipo-s que está aterrado ( $\mu_{SC} = 0$ ). O parâmetro  $\Delta$  conecta os PQs ao SC. Os PQs 1 e 2 interagem entre

si através do acoplamento  $t_q$ . Ainda nesta figura podemos encontrar a descrição esquemática do acoplamento entre reservatórios e PQs: O PQ 1 se conecta diretamente ao reservatório da esquerda, de potencial químico  $\mu_L$ , enquanto o PQ 2 se conecta apenas ao reservatório da direita, cujo potencial químico é  $\mu_R$ . A intensidade desses acoplamentos é dada por  $V_L$  e  $V_R$ , respectivamente.

O sistema descrito pela Fig. 18 considera o modelo efetivo da proposta original, acrescido dos reservatórios eletrônicos. Dois processos de tunelamento podem ocorrer entre PQs e SC: o tunelamento ressonante (NT) e a reflexão de Andreev cruzada (CAR). O NT é a transferência da carga entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . A troca de cargas neste caso envolve ocupação virtual de estados de quasipartícula acima do gap supercondutor. A intensidade do acoplamento direto entre os níveis é dada pelo parâmetro  $t_q$ . Por outro lado, a CAR requer que ambos os níveis estejam acoplados ao nível no centro do gap SC. Neste caso, pode ocorrer um *Cooper pair splitting*, que é a separação de um par de Cooper do SC, com cada elétron ocupando um dos PQs. Da mesma forma, podemos ter o processo inverso, onde os elétrons presentes nos PQs tunelam para o SC, formando um par de Cooper em  $\mu_{SC} = 0$ . Devemos esclarecer que o parâmetro  $\Delta$  não fornece o valor do gap supercondutor: ele apenas descreve a intensidade do acoplamento entre os PQs e  $\mu_{SC}$ . A ocorrência da CAR também está condicionada a largura do SC, que deve ser menor que seu comprimento de coerência  $\xi$ .

Na equação (2.1) é apresentado o Hamiltoniano total que descreve o sistema DPQ/SC. Este operador é formado por três partes principais:  $H_{ds}$ ,  $H_t$  e  $H_l$  sendo estes os hamiltonianos do sistema, de tunelamento e dos reservatórios, respectivamente:

$$\begin{aligned} H &= H_{ds} + H_t + H_l, \\ H_{ds} &= \varepsilon_1 d_1^\dagger d_1 + \varepsilon_2 d_2^\dagger d_2 + t_q d_1^\dagger d_2 + t_q^* d_2^\dagger d_1 + \Delta d_1^\dagger d_2^\dagger + \Delta^* d_2 d_1, \\ H_t &= \sum_{k_L} (V_L c_{k_L}^\dagger d_1 + V_L^* d_1^\dagger c_{k_L}) + \sum_{k_R} (V_R c_{k_R}^\dagger d_2 + V_R^* d_2^\dagger c_{k_R}), \\ H_l &= \sum_{k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

O hamiltoniano do sistema  $H_{ds}$ , é o mesmo proposto pelos autores da Ref. (47)<sup>1</sup>. Aqui,  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  são as energias dos PQs 1 e 2, respectivamente. Os operadores de criação (aniquilação) de elétrons em cada PQ são denotados por  $d_1^\dagger(d_1)$  e  $d_2^\dagger(d_2)$ .  $t_q$  acopla diretamente os níveis nos dois PQs. O parâmetro  $\Delta$  descreve a ação do SC sobre os PQs e se relaciona com o gap SC previsto pela teoria BCS (24). Os operadores que acompanham esse parâmetro indicam os processos de criação ( $d_1^\dagger d_2^\dagger$ ) e aniquilação ( $d_2 d_1$ ) simultânea de elétrons nos PQ - a CAR. O acoplamento entre PQs e reservatórios é dado pelo hamiltoniano  $H_t$ . Os operadores correspondentes a criação e aniquilação de elétrons nos reservatórios são  $c_{k_\alpha}^\dagger$  e  $c_{k_\alpha}$ , respectivamente, onde

<sup>1</sup> No apêndice A encontramos a demonstração da relação deste hamiltoniano com o hamiltoniano que descreve os estados ligados de Majorana (MBSS) em um sistema formado por um PQ acoplado a um nanofio supercondutor que pode abrigar esses estados.

$\alpha$  pode ser 1 ou 2 (L ou R, equivalentemente). O hamiltoniano  $H_l$  descreve a energia cinética dos elétrons não-interagentes do reservatório  $\alpha$  (L ou R).

Vamos tomar o sistema DPQ/SC desconsiderando os reservatórios, isto é, consideraremos apenas  $H = H_{ds}$ . Escrevemos  $H_{ds}$  na forma matricial, utilizando a base de muitos corpos,  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ . Os índices da base correspondem a  $\{|n_1 n_2\rangle\}$ , onde  $n_1$  é a ocupação do PQ 1 e  $n_2$  a ocupação do PQ 2. Sendo assim,  $H_{ds}$  (Eq. (2.1)), na base de muitos corpos é:

$$h = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & \varepsilon_1 & t_q & 0 \\ 0 & t_q & \varepsilon_2 & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Em seguida, fazemos a diagonalização da matriz  $h$ , encontrando os autovalores correspondentes:

$$E_{1,2} = \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \mp \sqrt{\varepsilon_n}}{2} \quad E_{3,4} = \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \mp \sqrt{\varepsilon_p}}{2}. \quad (2.3)$$

Nos resultados da Eq. (2.3) acima:  $\varepsilon_n = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4t_q^2$  e  $\varepsilon_p = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2 + 4\Delta^2$ . Escrevemos os autovalores dois a dois, respeitando a sequência dos sinais ( $\mp$ ). Os autovetores correspondentes são:

$$V_{1,2} = \left[ 0, \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \mp \sqrt{\varepsilon_n}}{2t_q}, 1, 0 \right] \quad V_{3,4} = \left[ \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \mp \sqrt{\varepsilon_p}}{2\Delta}, 0, 0, 1 \right]. \quad (2.4)$$

Os autovetores na Eq. (2.4) não estão normalizados. Utilizando o software *Mathematica*, analisamos o comportamento dos autovalores (2.3) como função da energia do PQ 2. Os resultados são mostrados na Fig. 19, para diferentes valores dos parâmetros  $t_q$  e  $\Delta$  e para energia do PQ 1,  $\varepsilon_1$ , com valor fixo<sup>2</sup>.

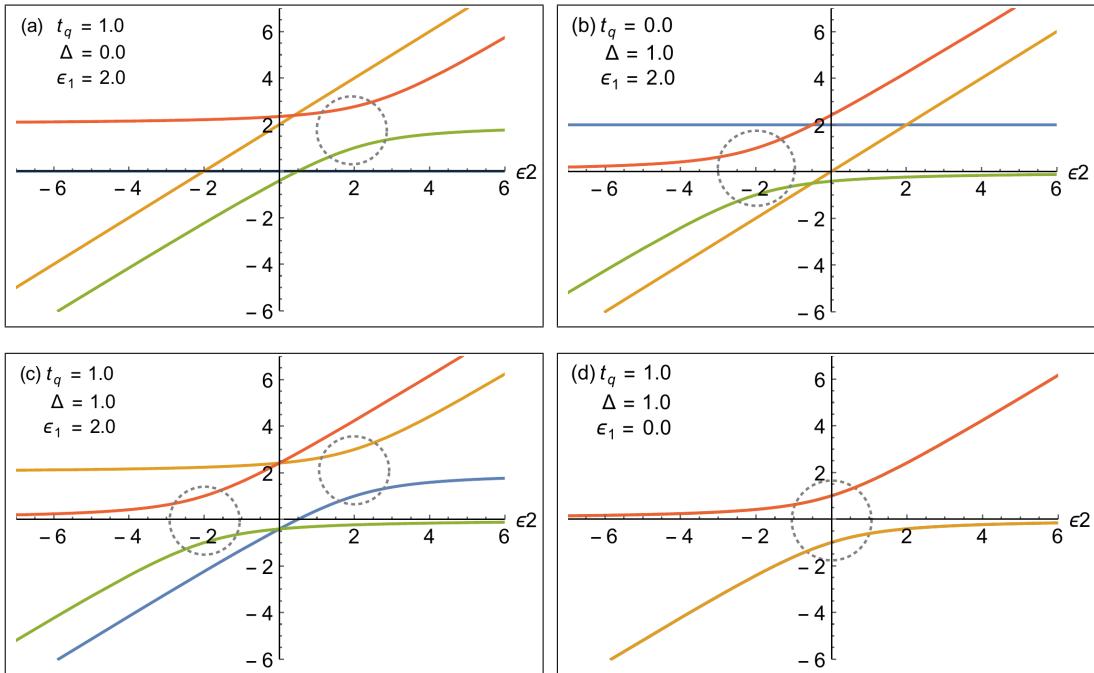
No painel (a) da Fig. 19 consideramos apenas o acoplamento direto, de modo que  $t_q = 1$ . A região circulada mostra onde ocorrem os anticruzamentos (*anticrossings*) entre as autoenergias. O comportamento das curvas vermelha e verde indica uma configuração energética em que uma transição eletrônica é possível. Neste caso, é para valores de energia próximos de  $\varepsilon_2 = +2$ . Como  $\varepsilon_1$  também é igual a 2, podemos concluir que a configuração energética em questão é  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ . Ainda na gráfico (a), o autovalor representado pela curva azul é constante em zero

<sup>2</sup> Em se tratando da introdução de resultados numéricos, como os apresentados neste capítulo nas Figuras 19 e 21, convém salientar que as escalas de grandeza são escritas em unidades proporcionais a  $\Gamma_0/\hbar$ , que é a taxa de tunelamento entre PQs e reservatórios. Uma breve discussão sobre parâmetros e unidades de medida é feita na Seção 3.4.4 no Capítulo 3.

e que a curva laranja varia linearmente com o valor de  $\varepsilon_2$ . Essas duas curvas não indicam a ocorrência de outros processos de tunelamento.

Na Fig. 19 (b), por outro lado, o anticruzamento entre dois autovalores acontece próximo de  $\varepsilon_2 = -2$ . Isso indica que pode acontecer uma transferência de cargas na junção quando  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ , pois  $\varepsilon_1$  permanece fixo com valor +2 para este gráfico. O parâmetro de acoplamento ativo é  $\Delta = 1$ , de modo que os PQs estão ambos acoplados ao SC, mas não diretamente.

Figura 19 – Autovalores de  $H_s$  para o sistema DPQ/SC como função da energia  $\varepsilon_2$ .



Fonte: Autores (2017).

Os parâmetros de acoplamento ( $t_q$  e  $\Delta$ ) e a energia  $\varepsilon_1$  estão indicados na legenda interna de cada gráfico. Os círculos tracejados evidenciam as regiões do gráfico onde ocorrem os anticruzamentos entre as autoenergias. Comparando o valor aproximado da energia  $\varepsilon_2$  com  $\varepsilon_1$  de acordo com os parâmetros de acoplamento presentes podemos inferir quais processos de tunelamento podem ocorrer. Figura obtida a partir das expressões na Eq. 2.3.

No painel (c) da Fig. 19, a energia do nível eletrônico no PQ 1 continua sendo  $\varepsilon_1 = +2$  e ambos os acoplamentos estão presentes, tal que  $t_q = \Delta = 1$ . Claramente, os dois anticruzamentos vistos nos itens (a) e (b) estão presentes mostrando que ambos os processos são igualmente prováveis, a depender da posição do nível no outro PQ: para  $\varepsilon_2$  em ressonância com  $\varepsilon_1$ , pode acontecer NT; quando  $\varepsilon_2$  tiver um valor igual ou próximo a  $-\varepsilon_1$ , poderemos observar uma transição eletrônica devida à CAR.

Por fim, no item (d), consideramos um valor de referência, com  $\varepsilon_1 = 0$  e ambos os parâmetros de acoplamento presentes e com intensidades iguais,  $t_q = \Delta = 1$ . Para esta situação, os dois anticruzamentos ocorrem em torno de  $\varepsilon_2 = 0$ , sobrepondo-se. Isso porque esse valor de energia satisfaz ambas as condições para ocorrência do NT e da CAR. A análise dos anticruzamentos não nos permite distinguir um fenômeno de espalhamento do outro. Veremos no capítulo 4 que

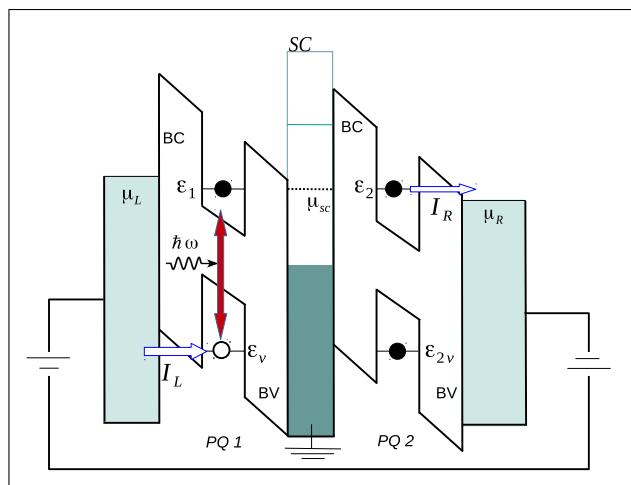
a fase entre as oscilações de Rabi que surgem na evolução temporal das ocupações eletrônicas dos PQs permitem fazer esta distinção.

## 2.2 Ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor tipo-s com aplicação de luz

Nesta seção apresentamos o modelo que descreve nossa proposta de ampliação do sistema DPQ/SC da seção 2.1, que visa abordar os efeitos da interação radiação-matéria sobre o transporte. Para fazer distinção com o sistema anterior, nos referiremos a este sistema na notação resumida DPQ/SC/Luz. Na Fig. 20 temos uma representação do sistema estudado, considerando um esquema de bandas de energia.

O sistema DPQ/SC/Luz é formado por dois PQs semicondutores acoplados a um SC tipo-s. No PQ 1 temos um nível na banda de valência, denotado por  $\varepsilon_v$ , e um nível na banda de condução,  $\varepsilon_1$ . Um laser contínuo aplicado sobre o PQ 1 provoca transições eletrônicas entre estes níveis. Na Figura 20, essa transição está indicada por uma onda acompanhada de  $\hbar\omega$ , onde  $\omega$  é a frequência do laser. Para o PQ 2 temos o nível  $\varepsilon_{2v}$  na banda de valência e  $\varepsilon_2$  na de condução. Entre os dois PQs se encontra o SC. A linha tracejada no SC acompanhada de  $\mu_{SC}$  representa o nível ao centro do gap supercondutor, onde encontramos os pares de Cooper. Ambos os níveis de condução se acoplam a este nível no centro do gap, sendo a intensidade do

Figura 20 – Representação esquemática do sistema DPQ/SC/Luz.



Fonte: Autores (2017).

Os PQs 1 e 2 estão acoplados através de um SC comum. A linha tracejada em SC indica o nível ao centro do GAP SC onde se forma o condensado de pares de Cooper ( $\mu_{SC}$ ). Cada PQ tem um nível na banda de valência VB e um na banda de condução CB. Sobre o PQ 1 é aplicado um laser contínuo ( $\hbar\omega$ ) que excita um elétron de  $\varepsilon_v$  a  $\varepsilon_1$ . O nível  $\varepsilon_v$  está acoplado ao reservatório à esquerda (de potencial químico  $\mu_L$ ), enquanto o nível  $\varepsilon_2$  se acopla ao reservatório à direita ( $\mu_R$ ). O nível  $\varepsilon_{2v}$ , na banda de valência do PQ 2 não se acopla diretamente com os demais níveis nem com os reservatórios.

acoplamento dada pelo parâmetro  $\Delta$ . Acima e abaixo do gap SC temos estados de quasipartícula fermiônicos usuais. O tunelamento ressonante (NT) entre os níveis de condução  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  ocorre através destes estados, na banda de condução do SC. A intensidade do acoplamento direto é dada pelo parâmetro  $t_q$ . O nível  $\varepsilon_{2v}$  no PQ 2 pode ser considerado inerte, não interferindo na dinâmica do sistema<sup>3</sup>.

Para obtenção da fotocorrente gerada no sistema, acoplamos reservatórios aos PQs. O PQ 1 é acoplado ao reservatório da esquerda, enquanto o PQ 2 é acoplado ao reservatório da direita. Inicialmente, devido à aplicação de um potencial elétrico  $V_{bias} = \mu_L - \mu_R$  ao sistema, temos o alargamento das barreiras de tunelamento para os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_{2v}$ . Essa barreira larga impede a passagem de corrente nesses pontos. Por outro lado, o mesmo potencial promove o estreitamento das barreiras para os níveis  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_2$ . Nesses pontos, teremos passagem de corrente elétrica:  $I_L$ , para o caso *esquerda* –  $\varepsilon_v$  e  $I_R$  no caso  $\varepsilon_2$  – *direita*. Vale ressaltar que o sistema DPQ/SC/Luz, juntamente com os reservatórios de elétrons, compõe um fotodiodo: uma estrutura onde espera-se que a corrente elétrica flua em um único sentido.

O Hamiltoniano total do modelo é dado por:  $H = H_{ds} + H_r + H_t + H_l$ . O primeiro termo  $H_{ds}$  descreve os acoplamentos dos níveis de condução dos PQs e destes ao SC, sendo idênticos àqueles apresentados para o sistema DPQ/SC na Eq. (2.1). O termo  $H_l$ , que descreve as energias cinéticas dos elétrons nos reservatórios não-interagentes, também é idêntico ao caso anterior (Eq. (2.1)). O Hamiltoniano  $H_r$  é acrescentado para contabilizar a interação radiação-matéria no PQ 1. Além disso, o termo de tunelamento também é modificado, já que o reservatório da esquerda se acopla apenas ao nível de valência no PQ 1, e não mais ao nível de condução. Sendo assim,  $H_r$  e  $H_t$  ficam:

$$H_r = \varepsilon_v v_1^\dagger v_1 + \Omega e^{-i\omega t} d_1^\dagger v_1 + \Omega^* e^{+i\omega t} v_1^\dagger d_1,$$

$$H_t = \sum_{k_1L} (V_{1L} v_1^\dagger c_{k_1L} + V_{1L}^* c_{k_1L}^\dagger v_1) + \sum_{k_2R} (V_{2R} d_2^\dagger c_{k_2R} + V_{2R}^* c_{k_2R}^\dagger d_2). \quad (2.5)$$

Na Eq. (2.5), o primeiro termo no Hamiltoniano  $H_r$  é a energia cinética do nível de energia  $\varepsilon_v$ , na banda de valência do PQ 1. Os operadores de criação e aniquilação de elétrons nesse nível são  $v_1^\dagger$  e  $v_1$ , respectivamente. Os segundo e terceiro termos descrevem a absorção e emissão de fôtons pelo sistema. No modelo semiclássico algumas aproximações são feitas para descrever a onda eletromagnética. A discussão sobre essas aproximações pode ser acompanhada na Ref. (137). Sendo assim, no segundo termo temos a criação de um elétron no nível de condução  $\varepsilon_1$ , descrito pelo operador  $d_1^\dagger$ , acompanhada da aniquilação de um elétron em  $\varepsilon_v$  por  $v_1$ . O parâmetro  $\Omega$  é o que chamaremos “intensidade do acoplamento” radiação-matéria, pois ele é proporcional à intensidade do campo elétrico aplicado.  $\omega$  é a frequência de oscilação da luz

<sup>3</sup> Isso porque nenhuma interação entre  $\varepsilon_{2v}$  e  $\varepsilon_2$  é considerada. Além disso, a geometria das barreiras de tunelamento (formato de 'H' no esquema da Fig. 20) apenas permite que este nível troque cargas com a banda de valência do SC (onde a barreira se estreita), o que faria sua ocupação sempre constante e igual a 1. Do lado direito, a barreira entre o nível  $\varepsilon_{2v}$  e o reservatório  $R$  é larga, não permitindo o tunelamento de cargas.

incidida. Similarmente, no terceiro termo de  $H_r$  é descrito o processo inverso, com a emissão de um fóton (elétron aniquilado na banda de condução e criado na banda de valência).

Em  $H_t$ , a soma em  $k_1 L$  indica a passagem de elétrons entre o reservatório  $L$  e o nível  $\varepsilon_v$  no PQ 1, de modo que  $c_{k_1 L}$  aniquila um elétron no nível  $k_1$  do reservatório  $L$ , enquanto  $c_{k_1 L}^\dagger$  cria. Os outros dois termos descrevem a troca de cargas entre o reservatório  $R$  e o nível  $\varepsilon_2$ , sendo que os operadores de criação e aniquilação de elétrons nesse reservatório são  $c_{k_2 R}^\dagger$  e  $c_{k_2 R}$ . Os parâmetros  $V_\alpha$  indicam a intensidade dos acoplamentos entre os reservatórios e os níveis. Nesse modelo, o nível  $\varepsilon_1$  não se acopla diretamente aos reservatórios L ou R.

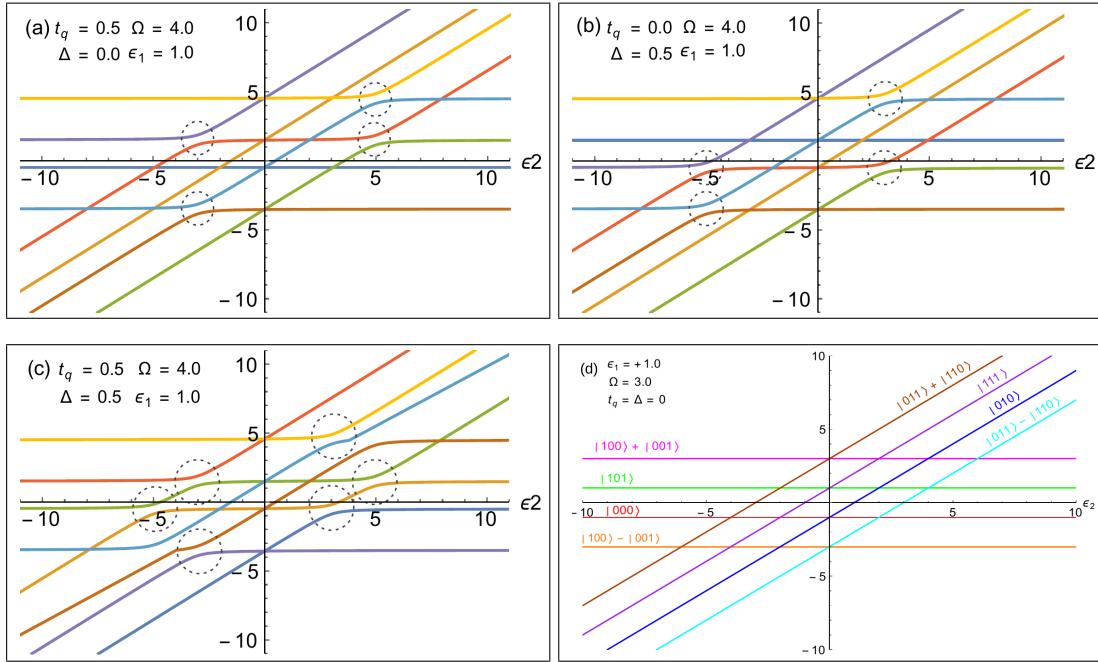
Tal como foi feito para o sistema DPQ/SC na seção 2.1, vamos mostrar resultados da diagonalização numérica do sistema DPQ/SC/Luz na Fig. 21. Para tanto, escrevemos o Hamiltoniano do sistema isolado  $H_{ds} + H_r$  (Eqs. (2.1) e (2.5)) na base de muitos corpos  $\{|000\rangle |100\rangle |010\rangle |001\rangle |101\rangle |011\rangle |110\rangle |111\rangle\}$ . Nesta base os índices dos vetores são  $\{|n_1 n_2 n_v\rangle\}$ , que são as ocupações dos níveis  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_v$ , respectivamente. Além disso, foi feita uma transformação unitária sobre a matriz original, com o intuito de remover as exponenciais temporais que acompanham  $\Omega$ . A consequência dessa transformação é o surgimento de um termo  $\pm\omega/2$  nos termos da diagonal. A transformação unitária realizada pode ser encontrada no apêndice B. A matriz transformada é exibida na Eq. (2.6):

$$h = \begin{bmatrix} \delta_3/2 & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta_1/2 & \Omega^* & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & \Omega & \delta_1/2 & t_q & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_q^* & \delta_2/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta^* & 0 & 0 & 0 & (2\varepsilon_2 + \delta_1)/2 & \Omega^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega & (2\varepsilon_2 - \delta_1)/2 & t_q^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_q & (2\varepsilon_2 - \delta_2)/2 & 0 \\ 0 & \Delta^* & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (2\varepsilon_2 - \delta_3)/2 \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

onde substituímos  $\delta_1 = \omega_{1v} - \omega$ ,  $\delta_2 = \omega_{21} - \delta_1$  e  $\delta_3 = 2\varepsilon_1 - \delta_1$ , sendo  $\omega_{21} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$  e  $\omega_{1v} = \varepsilon_1 - \varepsilon_v$ .

Na Fig. 21 são mostrados os oito autovalores deste hamiltoniano como função da energia do nível  $\varepsilon_2$ . Foram usadas quatro combinações diferentes dos parâmetros de acoplamento  $t_q$ ,  $\Delta$  e  $\Omega$ , com as energias dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  fixas.

Os autovalores como função da energia  $\varepsilon_2$  na Fig. 21 mostram para quais valores de energia são possíveis transições eletrônicas. Nos casos (a)-(c) o parâmetro de acoplamento óptico entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  é fixo em  $\Omega = 4$ . No caso (a)  $t_q = 0,5$ , enquanto o acoplamento ao SC é nulo. No gráfico podemos perceber quatro anticruzamentos: dois deles ocorrem para  $\varepsilon_2$  próximo a  $-3$  e outros dois em torno de  $+5$ . Estes valores diferem da condição previamente estabelecida para a ocorrência de NT, quando apenas  $t_q$  está presente, de  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ , já que a energia do nível

Figura 21 – Autovalores de  $H_s$  para o sistema DPQ/SC/Luz como função da energia  $\varepsilon_2$ .

Fonte: Autores (2017).

Autovalores em função de  $\varepsilon_2$  para sistema DPQ/SC/Luz, desacoplado dos reservatórios. As energias dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  são fixas, +1 e -100, respectivamente. Além de  $\Omega = 4$  fixo, os parâmetros de acoplamento em cada gráfico são: (a)  $t_q = 0,5$ ,  $\Delta = 0$ ; (b)  $t_q = 0$ ,  $\Delta = 0,5$ ; (c)  $t_q = \Delta = 0,5$ . Os círculos tracejados mostram onde ocorrem os anticruzamentos entre as autoenergias. Em (d)  $\Omega = 3$  e  $t_q = \Delta = 0$ .

$\varepsilon_1$  é +1. Para o caso (b), em que o acoplamento direto é desligado ( $t_q = 0$ ) e o acoplamento com o SC é ativado, com  $\Delta = 0,5$ , a condição anterior para a CAR  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$  também não aparenta ser satisfeita, com os anticruzamentos acontecendo para valores de  $\varepsilon_2$  próximos de -5 e +3. No caso (c), com ambos os parâmetros presentes ( $t_q = \Delta = 0,5$ ), os anticruzamentos ocorrem para os quatro valores simultaneamente. No item (d) mostramos uma configuração de comparação, em que apenas o parâmetro  $\Omega$  está ativo ( $t_q = \Delta = 0$ ). Neste caso, não ocorrem anticruzamentos porque o PQ 1 e o PQ 2 não estão acoplados, não havendo possibilidade de NT ou CAR. A transição óptica não depende do valor de  $\varepsilon_2$ , por isso não gera anticruzamentos.

O que os gráficos da Fig. 21 demonstram é a mudança das energias de transição eletrônica, que é devida ao forte acoplamento radiação-matéria. Propositalmente utilizamos um valor de  $\Omega$  bem maior que de  $t_q$  e  $\Delta$  para que o efeito do desdobramento dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  seja visualizado nas transições mais facilmente. Como discutido no capítulo 1, a forte interação radiação-matéria se manifesta na formação de dubletos de Autler-Townes. Dessa forma, o nível  $\varepsilon_1$  se desdobra em outros dois:  $\varepsilon_1 \pm \Omega$ , resultando em dois níveis de energia +5 e -3 para  $\Omega = 4$  e  $\varepsilon_1 = +1$ . Esses valores são coerentes com os anticruzamentos encontrados no caso (a) para o NT entre os PQs 1 e 2, que ocorre para  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ . Dessa forma, quando os valores de energia do nível  $\varepsilon_2$  se aproximam desses valores, ocorre transferência de carga por este processo. Por outro lado, no caso (b), as transições ocorrem para -5 e +3, pois a CAR requer níveis antissimétricos,

$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_2.$$

É muito importante perceber como não observamos picos em  $\varepsilon_2 = +1$  no caso (a) ou em  $\varepsilon_2 = -1$  no caso (b). Isso demonstra que as transições através do nível  $\varepsilon_1$  original não são mais possíveis: as probabilidades de transferência eletrônica através destes níveis foram redistribuídas entre os doubletos formados a partir da interação com a luz.

Em resumo, os modelos físicos apresentados nas Eq. (2.1) e (2.5) vão nos permitir obter expressões para as ocupações eletrônicas e para as correntes elétricas em cada caso no próximo capítulo, através do cálculo de funções de Green específicas. Além disso, os anticruzamentos observados nas Fig. 19 e 21 serão de fundamental importância na análise dos resultados nos capítulos 4 e 5, nos possibilitando conhecer valores de energia relevantes para o problema proposto.

# 3 Funções de Green de não-equilíbrio

Neste capítulo apresentamos a metodologia de trabalho utilizada, centrada nas técnicas de funções de Green de não-equilíbrio. Em particular, desejamos encontrar as funções de Green (FG) com dependência temporal pois, a partir destas, é possível obter a evolução temporal da corrente elétrica e das ocupações dos níveis eletrônicos. Dessa forma, na seção 3.1 são apresentadas definições básicas de FG para, em seguida, na seção 3.2, demonstrarmos como a equação da corrente elétrica pode ser escrita em termos destas funções. Na seção 3.3, aplicamos a equação de Kadanoff-Baym para os sistemas DPQ/SC (subseção 3.3) e DPQ/SC/Luz (subseção 3.3), para obter  $G^<(tt)$ , FG menor. Ainda nesta seção discutimos a obtenção das funções  $G^r(tt')$  para cada sistema. Na última seção, 3.4, são feitas algumas considerações de caráter técnico sobre o cálculo das FG, determinantes para a obtenção de nossos resultados teóricos.

## 3.1 Funções de Green

O método de *funções de Green* é utilizado na resolução de equações diferenciais. Em particular na Mecânica Quântica, é possível definir uma FG para encontrar soluções perturbativas para a equação de Schrödinger de uma partícula (138). Para sistemas de muitos corpos, com partículas submetidas à interação Coulombiana, por exemplo, não é possível obter a função de onda completa, que contém toda a informação sobre o sistema. A técnica de FG também não consegue resolver a equação de Schrödinger neste caso, entretanto, permite-nos obter algumas informações relevantes sobre o sistema, como destacamos no decorrer deste capítulo.

Matematicamente, podemos definir as FG como médias termodinâmicas entre produtos de operadores  $\psi(\mathbf{r}, t)$  e  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$  (139). Um conceito comumente associado às FG é o de propagador: uma FG de uma partícula<sup>1</sup>, por exemplo, está relacionada diretamente com a amplitude de probabilidade do deslocamento dessa partícula de um ponto a outro no espaço real, em determinado tempo (ou, equivalentemente, dela se deslocar com certa energia e momento)<sup>2</sup>.

As seguintes FG serão utilizadas neste trabalho: cada uma traz consigo especificidades, vantagens e desvantagens, a depender das observáveis que se deseja obter:

$$\begin{aligned}
 G^r(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') &= -i\theta(t - t')\langle\{\psi_\sigma(\mathbf{r}t), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t')\}\rangle, \\
 G^a(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') &= +i\theta(t' - t)\langle\{\psi_\sigma(\mathbf{r}t), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t')\}\rangle, \\
 G^<(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') &= +i\langle\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t')\psi_\sigma(\mathbf{r}t)\rangle, \\
 G^>(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') &= -i\langle\psi_\sigma(\mathbf{r}t)\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t')\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

<sup>1</sup> Se as partículas forem não-interagentes, as FG para um sistema de muitos corpos se tornam idênticas às FG para um sistema de uma partícula.

<sup>2</sup> FG são também denominadas "funções de correlação". A discussão sobre a terminologia destas funções é amplamente discutida na literatura e pode ser encontrada, por exemplo, na Ref. (140).

onde  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}'$  são vetores posição,  $\sigma$  e  $\sigma'$  são índices de spin e  $t$  e  $t'$  de tempo.

O símbolo  $\{\}$  denota operação de anticomutação entre operadores fermiônicos<sup>3</sup>.  $G^r(t, t')$  define a FG *Retardada* que é diferente de zero sempre que  $t \geq t'$ . A FG *Avançada*  $G^a$  pode ser obtida tomando-se o complexo conjugado de  $G^r(t, t')$ , com os índices temporais trocados. Dessa forma,  $G^a(t, t')$  apenas é finita para tempos  $t \leq t'$ .  $G^r(t, t')$  e  $G^a(t, t')$  carregam informações importantes sobre propriedades espectrais, densidade de estados, etc. Também são definidas na Eq. (3.1) as FG *Menor* e *Maior*,  $G^<(t, t')$  e  $G^>(t, t')$ , respectivamente, que são relacionadas a grandezas como densidade de partículas e corrente elétrica (140).

As funções de Green na Eq. (3.1) estão escritas no espaço real. Podemos relacioná-las com FG em uma outra base qualquer através da transformação:

$$G^\eta(\nu\sigma t, \nu'\sigma't') = \sum_{\nu\nu'} \varphi_\nu(\sigma\mathbf{r}) G^\eta(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') \varphi_{\nu'}^*(\sigma'\mathbf{r}'). \quad (3.2)$$

Na Eq. (3.2)  $\eta = r, a, <$  ou  $>$ . O termo  $\varphi_\nu(\sigma\mathbf{r})$  (e seu conjugado) é a função de onda em primeira quantização. Com isso, as FG  $G^\eta(\nu\sigma t, \nu'\sigma't')$  assumem as formas:

$$G^r(\nu\sigma t, \nu'\sigma't') = -i\theta(t - t') \langle \{a_{\nu\sigma}(t), a_{\nu'\sigma'}^\dagger(t')\} \rangle, \quad (3.3)$$

$$G^a(\nu\sigma t, \nu'\sigma't') = +i\theta(t' - t) \langle \{a_{\nu\sigma}(t), a_{\nu'\sigma'}^\dagger(t')\} \rangle, \quad (3.4)$$

$$G^<(\nu\sigma t, \nu'\sigma't') = +i \langle a_{\nu'\sigma'}^\dagger(t') a_{\nu\sigma}(t) \rangle, \quad (3.5)$$

$$G^>(\nu\sigma t, \nu'\sigma't') = -i \langle a_{\nu\sigma}(t) a_{\nu'\sigma'}^\dagger(t') \rangle, \quad (3.6)$$

onde  $a_{\nu\sigma}$  e  $a_{\nu'\sigma'}^\dagger$  são operadores fermiônicos de aniquilação e criação com dependência temporal. Eles surgem a partir da definição dos operadores de campo  $\psi(\mathbf{r}) = \sum_\nu \varphi_\nu(\mathbf{r}) a_\nu$  e  $\psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_\nu \varphi_\nu^*(\mathbf{r}) a_\nu^\dagger$ <sup>4</sup>.

Definimos ainda a FG com ordenamento temporal ou causal, denotada por  $G^c(tt')$ :

$$G^c(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') = -i \langle T\psi_\sigma(\mathbf{r}t) \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t') \rangle. \quad (3.7)$$

Na Eq. (3.7),  $T$  é o operador de ordenamento temporal. Sua função é mover o operador que possui o menor argumento de tempo para a direita. A aplicação deste operador em um produto de dois operadores  $A$  e  $B$ , com índices de tempo distintos, gera:

$$TA(t)B(t') = \theta(t - t')A(t)B(t') - \theta(t' - t)B(t')A(t), \quad (3.8)$$

em que  $\theta(t - t')$  é a função Heaviside<sup>5</sup>.

A FG  $G^c(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't')$ , da equação (3.7), é escrita também em termos de operadores de criação e aniquilação fermiônicos:

$$G^c(\nu\sigma t, \nu\sigma't') = -i \langle T a_{\nu\sigma}(t) a_{\nu\sigma'}^\dagger(t') \rangle. \quad (3.9)$$

<sup>3</sup>  $\{A, B\} = AB + BA$ . As FG retardada e avançada para bósons, por outro lado, são definidas pela operação de comutação  $[A, B] = AB - BA$ .

<sup>4</sup> Como explicado (e demonstrado) na Ref. (138), para sistemas com invariância translacional,  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  depende apenas da diferença  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  e, com isso, o índice  $\nu$  pode ser substituído por  $\mathbf{k}$  (na base de ondas planas).

<sup>5</sup> O valor da função Heaviside é  $\theta(t - t') = 0$  se  $t' > t$  e 1 para  $t' < t$ .

Podemos ainda especificar a forma das FG  $r$ ,  $a$ ,  $<$ ,  $e >$  para o caso especial de elétrons livres. O operador Hamiltoniano que descreve esse sistema é:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (3.10)$$

onde  $\varepsilon_{k\sigma}$  é a energia cinética de um elétron com momento  $k$  e spin  $\sigma$  e  $c_{k\sigma}^\dagger$  ( $c_{k\sigma}$ ) é o operador de criação (aniquilação) de elétrons.

A FG menor para esse caso é<sup>6</sup>:

$$g^<(tt') = +i\langle c_{k\sigma}^\dagger(t') c_{k\sigma}(t) \rangle. \quad (3.11)$$

Utilizando a equação de Heisenberg ( $\dot{A}(t) = +i/\hbar[H, A(t)] + \partial_t A$ ), encontramos a dependência temporal dos operadores de criação e aniquilação da Eq. (3.11):

$$c_{k\sigma}(t) = c_{k\sigma}(0)e^{-i\varepsilon_{k\sigma}t}, \quad (3.12)$$

$$c_{k\sigma}^\dagger(t) = c_{k\sigma}^\dagger(0)e^{+i\varepsilon_{k\sigma}t}. \quad (3.13)$$

Substituindo os resultados das Eq. (3.12) e (3.13) na expressão da  $g^<(tt')$  ficamos com:

$$g^<(tt') = +i\langle c_{k\sigma}^\dagger(0) c_{k\sigma}(0) \rangle e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t-t')}. \quad (3.14)$$

É possível demonstrar também que, nessas condições,  $\langle c_{k\sigma}^\dagger(0) c_{k\sigma}(0) \rangle$  descreve a função distribuição de Fermi-Dirac, que dá a ocupação de elétrons livres, ou seja (Ref. (141)):

$$f(\varepsilon_{k\sigma}) = \langle c_{k\sigma}^\dagger(0) c_{k\sigma}(0) \rangle, \quad (3.15)$$

$$1 - f(\varepsilon_{k\sigma}) = \langle c_{k\sigma}(0) c_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle. \quad (3.16)$$

Sendo assim, a FG menor para elétrons livres  $g^<(tt')$  será descrita por:

$$g^<(k\sigma, t - t') = +i f(\varepsilon_{k\sigma}) e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t-t')}. \quad (3.17)$$

Similarmente, calculamos as demais FG para elétrons livres em função do tempo:

$$g^>(k\sigma, t - t') = -i(1 - f(\varepsilon_{k\sigma})) e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t-t')}, \quad (3.18)$$

$$g^r(k\sigma, t - t') = -i\theta(t - t') e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t-t')}, \quad (3.19)$$

$$g^a(k\sigma, t - t') = +i\theta(t' - t) e^{-i\varepsilon_{k\sigma}(t-t')}. \quad (3.20)$$

Essas funções são importantes no contexto deste trabalho, pois descrevem o comportamento dos elétrons (em um nível  $k$ ) nos reservatórios de carga (fonte), onde o efeito da interação entre estes é desprezado.

Diferente do caso de elétrons livres (não-interagentes) visto acima, em outros sistemas os hamiltonianos nunca são tão simples e a obtenção das FG não é direta. Em geral vamos recorrer à técnica de equação de movimento e fazer algumas aproximações.

<sup>6</sup> Embora alguns autores utilizem a notação  $G_0^\eta(t')$ , para uma separação mais clara das funções para elétrons livres, utilizamos a notação  $g^\eta(tt')$ .

### 3.1.1 Formalismos de Keldysh e Kadanoff-Baym

As funções de Green são um método extremamente eficiente para calcular propriedades de transporte em sistemas quânticos, tanto em situações de equilíbrio como fora do equilíbrio. O regime fora do equilíbrio pode ser induzido, por exemplo, pelo acoplamento do sistema a reservatórios de carga com diferentes potenciais químicos. No contexto de não-equilíbrio, L. V. Keldysh introduziu o conceito de *função de Green ordenada no contorno* em 1965 (142):

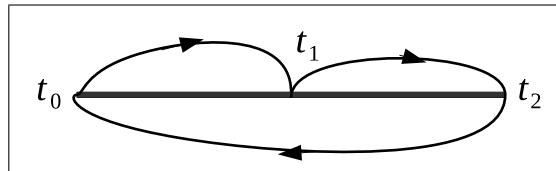
$$G_C(t_1, t_2) = -i\langle T_C \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2) \rangle. \quad (3.21)$$

Na equação 3.21,  $T_C$  é o operador de ordenamento temporal no contorno  $C$ , que vai de  $t_0$ , passa pelos tempos  $(t_1, t_2)$  e retorna a  $t_0$ , conforme a Fig. 22. Os operadores  $\psi(t_1)$  e  $\psi(t_2)$  estão na representação de Heisenberg e são ordenados pelo operador  $T_C$  de acordo com:

$$T_C \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2) \equiv \begin{cases} \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2), & t_1 >_C t_2, \\ -\psi^\dagger(t_2) \psi(t_1), & t_1 <_C t_2, \end{cases}$$

onde assumimos operadores fermiônicos. As desigualdades  $>_C$  e  $<_C$  indicam maior e menor ao longo do contorno.

Figura 22 – Representação do contorno temporal de Keldysh.



Fonte: Autores (2017).

Contorno temporal  $C$  utilizado na definição da função de Green da Eq. (3.21).  $t_0$  é o instante em que a perturbação é introduzida no sistema, dando início ao regime fora do equilíbrio.

Uma das formas de se calcular a função de Green ordenada no contorno é pela técnica de equação de movimento (ver Ref. (138)), na qual se utiliza a equação de Heisenberg para calcular a evolução temporal dos operadores  $\psi(t)$ . A partir da função de Green ordenada no contorno poderemos obter as funções de Green  $G^r$ ,  $G^a$ ,  $G^<$  e  $G^>$ , que vão nos permitir calcular observáveis físicos de interesse como a corrente elétrica. Para tanto é utilizado o procedimento de *continuação analítica*, que vai deformar o contorno  $C$  para permitir a aplicação do *teorema de Langreth*<sup>7</sup>. Na continuação deste texto, na seção 3.2, durante a obtenção da equação da corrente elétrica, damos um exemplo prático da utilização da continuação analítica para aplicação das regras de Langreth. Demonstrações e discussões mais aprofundadas sobre esse procedimento podem ser encontradas em referências como (140) e (143) e (144).

<sup>7</sup> Ver Langreth's theorem na Ref. (140)

No estudo do transporte eletrônico em regime temporal, estamos interessados principalmente na obtenção da função de Green  $G^<(tt)$ , que está diretamente relacionada ao cálculo de ocupações eletrônicas e correntes elétricas. Para tanto, introduzimos a equação de Dyson (Ref. (143)):

$$G_C(\tau_1, \tau_2) = G_C^0(\tau_1, \tau_2) + \int_C d\tau' \int_C d\tau'' G_C^0(\tau_1, \tau') \Sigma_C(\tau', \tau'') G_C(\tau'', \tau_2), \quad (3.22)$$

em que os índices temporais  $\tau_i$  são utilizados para indicar que a integral é feita ao longo do contorno e  $\Sigma$  é chamada auto-energia, que está relacionada com a função de Green de reservatório.

Se aplicarmos o procedimento de continuação analítica sobre a equação de Dyson (Eq. (3.22)) e, sabendo pelo teorema de Langreth que uma integral de um produto de três funções de Green ( $G = \int ABC$ ) pode ser reescrita na forma  $G^< = \int A^r B^r C^< + \int A^r B^< C^a + \int A^< B^a C^a$ , podemos encontrar a equação de Keldysh:

$$G^< = (1 + G^r \Sigma^r) G_0^< (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^< G^a, \quad (3.23)$$

onde omitimos as integrais temporais nos produtos de funções.

Similarmente, pode ser definida uma outra equação para a função de Green menor, a partir da forma diferencial da equação de Dyson. Sua expressão é:

$$[G_0^{-1}, G^<] = \Sigma^r G^< + \Sigma^< G^a - G^r \Sigma^< - G^< \Sigma^a, \quad (3.24)$$

onde  $G_0^{-1} = i\partial_t - h_0$ .  $h_0$  é a matriz composta pelos termos de equilíbrio. Do lado direito da equação, os produtos entre FG pelos termos de auto-energia  $\Sigma^<$  estão integrados no tempo<sup>8</sup>.

A equação (3.24) é chamada *equação de Kadanoff-Baym*. As duas abordagens, versão integral de Keldysh (142) e a versão diferencial de Kadanoff e Baym (139), são equivalentes e foram desenvolvidas independentemente, praticamente de forma simultânea. Neste trabalho optamos pela utilização do formalismo de Kadanoff-Baym, com resolução numérica dos conjuntos de equações diferenciais.

A função de Green retardada também tem expressões diferenciais e integrais que podem ser obtidas a partir da equação de Dyson, como discutimos na seção 3.3.

## 3.2 Corrente elétrica

Nesta seção demonstramos a obtenção de uma expressão para a corrente elétrica em função do tempo, escrita em termos de funções de Green de não-equilíbrio. Vamos calcular a corrente

<sup>8</sup> A dedução desta equação a partir da equação de Dyson pode ser vista na Ref. (140).

entre um nível eletrônico  $i$  e um reservatório  $\alpha$ . Começamos com a expressão:

$$I_\alpha(t) = -e\langle \dot{N}_\alpha \rangle = \frac{-ei}{\hbar} \langle [H, N_\alpha] \rangle. \quad (3.25)$$

A Eq. (3.25) descreve a corrente elétrica como o produto da carga fundamental  $e$  pela taxa de variação do operador número de partículas,  $N_\alpha = \sum_{k_j} c_{k_j\alpha}^\dagger c_{k_j\alpha}$ . Aqui,  $c_{k_j\alpha}^\dagger$  ( $c_{k_j\alpha}$ ) cria (aniquila) um elétron no nível  $k_j$  do reservatório  $\alpha$ .

Para calcular a corrente  $I_\alpha(t)$  introduzimos um operador  $H$  geral, descrevendo um nível eletrônico único, de energia  $\varepsilon_i$ , um reservatório de cargas não-interagentes, com energias  $\varepsilon_{k_\alpha}$ , e o tunelamento entre eles:

$$H = \varepsilon_i d_i^\dagger d_i + \sum_{k_\alpha} (V_\alpha c_{k_\alpha}^\dagger d_i + V_\alpha^* d_i^\dagger c_{k_\alpha}) + \sum_{k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}, \quad (3.26)$$

sendo  $V_\alpha$  a intensidade do acoplamento entre o nível  $i$  e o reservatório  $\alpha$ .

Utilizando o operador  $H$  definido na Eq. (3.26), calculamos os comutadores da equação (3.25) e obtemos:

$$I_\alpha(t) = \frac{ie}{\hbar} \left\{ \sum_{k_j} \left( V_\alpha \langle c_{k_j\alpha}^\dagger d_i \rangle - V_\alpha^* \langle d_i^\dagger c_{k_j\alpha} \rangle \right) \right\}, \quad (3.27)$$

onde  $d_i^\dagger$  ( $d_i$ ) cria (aniquila) um elétron no nível  $i$ .

Em seguida, definimos as médias termodinâmicas como funções de Green, seguindo o desenvolvimento proposto por Haug e Jauho na Ref. (140). Definindo  $G_{k_j\alpha,i}^<(tt') \equiv i\langle c_{k_j\alpha}^\dagger(t')d_i(t) \rangle$

e  $G_{i,k_j\alpha}^<(tt') \equiv i\langle d_i^\dagger(t')c_{k_j\alpha}(t) \rangle$ , e utilizando que  $G_{k_j\alpha,i}^<(tt) = -[G_{i,k_j\alpha}^<(tt)]^*$ , é possível obter:

$$I_\alpha(t) = \frac{2e}{\hbar} \Re \left\{ \sum_{k_j} V_\alpha G_{i,k_j\alpha}^<(t,t) \right\}. \quad (3.28)$$

Para obter  $G_{i,k_j\alpha}^<(t,t)$  precisamos primeiro encontrar a equação de movimento para a FG causal. Utilizando a definição dada na Eq. (3.9) escrevemos:

$$i \frac{\partial}{\partial t'} G_{i,k_j\alpha}^c(tt') = \langle T d_i(t) \dot{c}_{k_j\alpha}^\dagger(t') \rangle. \quad (3.29)$$

Calculamos a evolução temporal do operador  $c_{k_j\alpha}^\dagger(t')$  utilizando a equação de Heisenberg:

$$\begin{aligned}\dot{c}_{k_j\alpha}^\dagger(t') &= i \left[ H, c_{k_j\alpha}^\dagger \right] = i \sum_{k_j} \left\{ \left[ V_\alpha^* d_i^\dagger c_{k_j\alpha}, c_{k_j\alpha}^\dagger \right] + \left[ \varepsilon_{k_j\alpha} c_{k_j\alpha}^\dagger c_{k_j\alpha}, c_{k_j\alpha}^\dagger \right] \right\} \\ \dot{c}_{k_j\alpha}^\dagger(t') &= i \left\{ V_\alpha^* d_i^\dagger + \varepsilon_{k_j\alpha} c_{k_j\alpha}^\dagger \right\}.\end{aligned}\quad (3.30)$$

Note que o resultado<sup>9</sup> da Eq. (3.30) é composto de dois termos, um deles se origina no termo de tunelamento que descrevemos para a Eq. (3.27), o outro é oriundo do termo de energia cinética dos elétrons do reservatório, com energias  $\varepsilon_{k_j\alpha}$ .

Substituindo o resultado da Eq. (3.30) na equação de movimento (3.29) teremos:

$$i\partial_{t'} G_{i,k_j\alpha}^c(tt') = V_\alpha^* i \langle T d_i(t) d_i^\dagger(t') \rangle + \varepsilon_{k_j\alpha} i \langle T d_i(t) c_{k_j\alpha}^\dagger(t') \rangle,$$

$$(i\partial_{t'} + \varepsilon_{k_j\alpha}) G_{i,k_j\alpha}^c(tt') = -V_\alpha^* G_{ii}^c(tt').\quad (3.31)$$

Neste ponto introduzimos uma nova FG relacionada aos elétrons não-interagentes do reservatório  $\alpha$  através da equação diferencial:

$$(i\partial_{t'} + \varepsilon_{k_j\alpha}) g_{k_j\alpha}(tt') = -\delta(t - t').\quad (3.32)$$

Utilizamos a expressão da Eq. (3.32) para passar a Eq. (3.31) para a forma integral. Sabendo que a inversa de  $g_{k_j\alpha}(tt')$  é  $g_{k_j\alpha}^0(tt') = i\partial_{t'} + \varepsilon_{k_j\alpha}$ , atuamos  $g_{k_j\alpha}(tt')$  pela direita e integramos:

$$\begin{aligned}(i\partial_{t'} + \varepsilon_{k_j\alpha}) g_{k_j\alpha}(tt') G_{i,k_j\alpha}^c(tt') &= -V_\alpha^* G_{ii}^c(tt') g_{k_j\alpha}(tt'), \\ g_{k_j\alpha}^0(tt') g_{k_j\alpha}(tt') G_{i,k_j\alpha}^c(tt') &= -V_\alpha^* G_{ii}^c(tt') g_{k_j\alpha}(tt'), \\ - \int dt_1 \delta(t - t_1) G_{i,k_j\alpha}^c(t_1 t') &= -V_\alpha^* \int dt_1 G_{ii}^c(tt_1) g_{k_j\alpha}(t_1 t'), \\ G_{i,k_j\alpha}^c(tt') &= V_\alpha^* \int dt_1 G_{ii}^c(tt_1) g_{k_j\alpha}(t_1 t').\end{aligned}\quad (3.33)$$

Nosso objetivo é converter  $G_{i,k_j\alpha}^c(tt)$  em  $G_{i,k_j\alpha}^<(t,t)$ , que é a função requerida na equação da corrente (3.28). Para tanto, escrevemos a integral na Eq. (3.33) no contorno de Keldysh:

$$G_{i,k_j\alpha}(tt') = V_\alpha^* \int_C d\tau_1 G_{ii}(t\tau_1) g_{k_j\alpha}(\tau_1 t'),\quad (3.34)$$

<sup>9</sup> Em um passo intermediário fizemos:

$$\dot{c}_{k_j\alpha}^\dagger(t') = i \sum_{k_j} \left\{ V_\alpha^* \left[ d_i^\dagger \left( \delta_{k_j k'_j} - c_{k'_j\alpha}^\dagger c_{k_j\alpha} \right) - c_{k'_j\alpha}^\dagger d_i^\dagger c_{k_j\alpha} \right] + \varepsilon_{k_j\alpha} \left[ c_{k_j\alpha}^\dagger \left( \delta_{k_j k'_j} - c_{k'_j\alpha}^\dagger c_{k_j\alpha} \right) - c_{k'_j\alpha}^\dagger c_{k_j\alpha}^\dagger c_{k_j\alpha} \right] \right\},$$

usando relações de anticomutação para férmons:  $\{d_i^\dagger, d_j\} = \{d_i, d_j^\dagger\} = \delta_{i,j}$  e  $\{d_i^\dagger, d_j^\dagger\} = \{d_i, d_j\} = 0$ .

em que  $\tau_1$  é um índice temporal complexo.

Nesse ponto é utilizado o procedimento de continuação analítica, onde o contorno é deformado para aplicação da regra de Langreth. A regra que devemos utilizar diz que, se uma função  $C$  é definida pela integral sobre o contorno do produto  $AB$ ,  $C = \int_C AB$ , a FG menor correspondente  $C^<$ , pode ser escrita no eixo real por:

$$C^< = \int_t [A^r B^< + A^< B^a]. \quad (3.35)$$

Com isso,  $G_{i,k_j\alpha}^<(t,t)$  será definida no eixo real.

$$G_{i,k_j\alpha}^<(tt') = V_\alpha^* \int dt_1 \left[ G_{ii}^r(tt_1)g_{k_j\alpha}^<(t_1t') + G_{ii}^<(tt_1)g_{k_j\alpha}^a(t_1t') \right]. \quad (3.36)$$

Como  $G_{i,k_j\alpha}^<(t,t)$  aparece multiplicada por  $\sum_{k_j} V_\alpha$  na Eq. (3.28), multiplicamos os dois lados

da Eq. (3.36) por este somatório:

$$\sum_{k_j} V_\alpha G_{i,k_j\alpha}^<(tt') = \sum_{k_j} V_\alpha V_\alpha^* \int dt_1 \left[ G_{ii}^r(tt_1)g_{k_j\alpha}^<(t_1t') + G_{ii}^<(tt_1)g_{k_j\alpha}^a(t_1t') \right]. \quad (3.37)$$

Na Eq. (3.37) vamos substituir  $g_{k_j\alpha}^<(tt')$  e  $g_{k_j\alpha}^a(tt')$  pelas expressões das FG para elétrons livres definidas na seção 3.1, equações (3.17) e (3.20), respectivamente. Transformando a soma em  $k$  em uma integral de energia obtemos:

$$\begin{aligned} \sum_{k_j} |V_\alpha|^2 i e^{-i\varepsilon_{k_j}(t_1-t')} f_\alpha(\varepsilon_{k_j}) &\rightarrow \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) |V_\alpha|^2 i e^{-i\varepsilon(t_1-t')} f_\alpha(\varepsilon) \rightarrow i\Gamma_\alpha \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t_1-t')} f_\alpha(\varepsilon); \\ \sum_{k_j} |V_\alpha|^2 i \theta(t' - t_1) e^{-i\varepsilon_{k_j}(t_1-t')} &\rightarrow \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) |V_\alpha|^2 i e^{-i\varepsilon(t_1-t')} \rightarrow \frac{i}{2} \Gamma_\alpha \delta(t_1 - t'), \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde  $\Gamma_\alpha = 2\pi\rho_\alpha |V_\alpha|^2$  e  $\int d\varepsilon e^{-i\varepsilon(t-t')} = 2\pi\delta(t-t')$ .

Os resultados em (3.38) são substituídos em (3.37) gerando:

$$\sum_{k_j} V_\alpha G_{i,k_j\alpha}^<(tt) = i\Gamma_\alpha \left[ \int dt_1 G_{ii}^r(tt_1) \phi_\alpha(t_1t) + \frac{1}{2} \int dt_1 G_{ii}^<(tt_1) \delta(t_1 - t) \right], \quad (3.39)$$

onde também tomamos  $t' = t$ .

Resta-nos substituir o resultado (3.39) na equação da corrente (3.28):

$$\begin{aligned} I_\alpha(t) &= \frac{2e}{\hbar} \Re \left\{ i\Gamma_\alpha \left[ \int dt_1 G_{ii}^r(tt_1) \phi_\alpha(t_1 t) + \frac{1}{2} \int dt_1 G_{ii}^<(tt_1) \delta(t_1 - t) \right] \right\}, \\ I_\alpha(t) &= \frac{2e}{\hbar} \Re \left\{ i\Gamma_\alpha \int dt_1 G_{ii}^r(tt_1) \phi_\alpha(t_1 t) \right\} - e\Gamma_\alpha n_i(t), \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde fizemos  $\phi_\alpha(t_1 t) = \int \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{-i\epsilon(t_1 - t)} f_\alpha(\epsilon)$  e  $n_i(t) = \Re\{-iG_{ii}^<(tt)\}$

A expressão da corrente elétrica em (3.40) pode ser separada em duas partes. A primeira parte acompanha  $G^r(tt')$  e representa a corrente do reservatório  $\alpha$  para o nível  $i$ , que chamamos corrente de entrada, ou *In*. O segundo termo é o que acompanha  $G^<(tt)$  e tem sentido do nível para o reservatório. Por isso ela é chamada corrente de saída, ou *Out*. A corrente *In* depende primordialmente das condições do acoplamento ao reservatório, sua temperatura, etc. O termo *Out*, por outro lado, é definido diretamente pela ocupação do nível  $i$ , e, portanto, depende apenas das condições do sistema.

### 3.3 Obtenção das funções de Green

Na seção 3.2 mostramos que a evolução temporal da corrente elétrica pode ser escrita em função das FG retardada e menor (ver Eq. (3.40)). Para cada sistema em estudo, encontramos um conjunto de equações de movimento necessário para obter cada uma dessas FG. Para  $G_{ii}^<(tt)$  é utilizada a equação de Kadanoff-Baym (3.24) enquanto para  $G_{ii}^r(tt')$  é utilizada uma forma diferencial da equação de Dyson.

A base escolhida para escrever as matrizes é aquela formada pelos operadores de criação e aniquilação do sistema. Na seção 3.3 mostramos especificamente as matrizes utilizadas para o caso do sistema formado por um PQ duplo acoplado a um SC comum, ou DPQ/SC. Na seção 3.3, apresentamos também as matrizes utilizadas para obter rapidamente as derivadas de  $G_{ii}^<(tt)$  e  $G_{ii}^r(tt')$  para o sistema DPQ/SC/Luz.

#### Funções de Green para o Sistema DPQ/SC

No sistema DPQ/SC apenas os dois níveis de condução em cada PQ são relevantes para as situações de transporte que consideramos, sendo assim, a base de Nambu é formada por quatro operadores:  $\Psi = (d_1, d_2, d_2^\dagger, d_1^\dagger)$ .

Para aplicar a equação de Kadanoff-Baym devemos escrever as matrizes respectivas de acordo com a base de operadores  $\Psi$ . Para obter  $G^<(tt)$  e  $G^r(tt')$  precisamos da matriz  $h$  do

sistema isolado. A partir do hamiltoniano da Eq. (2.1) escrevemos:

$$h = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & t_q & 0 & \Delta \\ t_q^* & \varepsilon_2 & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta^* & -\varepsilon_1 & -t_q^* \\ \Delta^* & 0 & -t_q & -\varepsilon_2 \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

Utilizando a definição  $G_{ab}^<(tt') = i\langle b(t')a(t) \rangle$  construímos a matriz das FG menor<sup>10</sup>:

$$G^<(tt) = \begin{bmatrix} G_{d_1 d_1^\dagger}^< & G_{d_1 d_2^\dagger}^< & G_{d_1 d_2}^< & 0 \\ G_{d_2 d_1^\dagger}^< & G_{d_2 d_2^\dagger}^< & 0 & G_{d_2 d_1}^< \\ G_{d_2^\dagger d_1^\dagger}^< & 0 & G_{d_2^\dagger d_2}^< & G_{d_2^\dagger d_1}^< \\ 0 & G_{d_1^\dagger d_2^\dagger}^< & G_{d_1^\dagger d_2}^< & G_{d_1^\dagger d_1}^< \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

As matrizes para  $G^r(tt')$  e  $G^a(tt')$  tem os mesmos índices da matriz  $G^<(tt)$  em (3.47). As auto-energias  $\Sigma^i$  são matrizes diagonais:

$$\Sigma^r = \begin{bmatrix} -i\Gamma_L/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\Gamma_R/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\Gamma_R/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\Gamma_L/2 \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

lembrando que  $\Sigma^a = [\Sigma^r]^*$ . Para a auto-energia menor temos:

$$\Sigma^< = \begin{bmatrix} -i\Gamma_L\phi_L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\Gamma_R\phi_R & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\Gamma_R\phi'_R & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\Gamma_L\phi'_L \end{bmatrix}. \quad (3.44)$$

Na matriz (3.44), temos  $\phi_i(tt') = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t-t_1)} f_i(\varepsilon)$  e  $\phi'_i(tt') = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t-t_1)} f_i(-\varepsilon)$ . Para obter esses resultados utilizamos novamente a aproximação de banda infinita (wide-band limit) e que  $\Gamma_i = 2\pi\rho_i|V_i|^2$ . A integral  $\phi'_i(tt')$  considera a função distribuição de Fermi-Dirac de buracos<sup>11</sup>, dadas as energias negativas que vemos na matriz (3.41). Essas integrais surgem devido à simetria partícula-buraco promovida pela presença do SC.

<sup>10</sup> Como  $G^<$  na equação de Kadanoff-Baym é válida para índices temporais iguais, quatro funções em que os operadores são idênticos se anulam pois  $\langle b(t)b(t) \rangle = \langle a(t)a(t) \rangle = 0$ .

<sup>11</sup> Podemos demonstrar facilmente que  $f_i(-\varepsilon) = 1 - f_i(\varepsilon)$ .

Para obter  $G^r(tt')$  utilizamos a equação de Dyson na forma diferencial:

$$i\partial_t' G^r(tt') = -\delta(t - t')I + MG^r(tt'), \quad (3.45)$$

onde  $M = h_0 + \Sigma^r$  e  $I$  é a matriz identidade.

Garantindo  $\Gamma_L = \Gamma_R$  podemos demonstrar que a versão integral dessa equação será:

$$G^r(tt') = -iIe^{-i(t-t')M}. \quad (3.46)$$

Especificamente para o sistema DPQ/SC, as matrizes tem dimensão 4. Além disso  $h_0$  e  $\Sigma^r$  são as mesmas vistas em (3.41) e (3.43), respectivamente. A matriz das FG retardadas para o sistema em questão é:

$$G^r(tt') = \begin{bmatrix} G^r_{d_1 d_1^\dagger} & G^r_{d_1 d_2^\dagger} & G^r_{d_1 d_2} & G^r_{d_1 d_1} \\ G^r_{d_2 d_1^\dagger} & G^r_{d_2 d_2^\dagger} & G^r_{d_2 d_2} & G^r_{d_2 d_1} \\ G^r_{d_2^\dagger d_1^\dagger} & G^r_{d_2^\dagger d_2^\dagger} & G^r_{d_2^\dagger d_2} & G^r_{d_2^\dagger d_1} \\ G^r_{d_1^\dagger d_1^\dagger} & G^r_{d_1^\dagger d_2^\dagger} & G^r_{d_1^\dagger d_2} & G^r_{d_1^\dagger d_1} \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

### Funções de Green para Sistema DPQ/SC/Luz

O sistema DPQ/SC/Luz, é composto efetivamente de três níveis eletrônicos, dois de condução que existiam no caso anterior, e mais um nível na banda de valência do PQ 1, cujos operadores de criação e aniquilação de elétrons são  $v_1^\dagger$  e  $v_1$ . Dessa forma a base escolhida foi:  $\Psi = (d_1, v_1, d_2, d_1^\dagger, v_1^\dagger, d_2^\dagger)$ .

Começamos novamente com a matriz  $h$ :

$$h = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \Omega e^{-i\omega t} & t_q & 0 & 0 & \Delta \\ \Omega^* e^{+i\omega t} & \varepsilon_v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_q^* & 0 & \varepsilon_2 & -\Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta^* & -\varepsilon_1 & -\Omega^* e^{+i\omega t} & -t_q^* \\ 0 & 0 & 0 & -\Omega e^{-i\omega t} & -\varepsilon_v & 0 \\ \Delta^* & 0 & 0 & -t_q & 0 & -\varepsilon_2 \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

Para a FG menor a matriz de termos segundo a base  $\Psi$  é:

$$G^<(tt) = \begin{bmatrix} G^<_{d_1 d_1^\dagger} & G^<_{d_1 v_1^\dagger} & G^<_{d_1 d_2^\dagger} & 0 & G^<_{d_1 v_1} & G^<_{d_1 d_2} \\ G^<_{v_1 d_1^\dagger} & G^<_{v_1 v_1^\dagger} & G^<_{v_1 d_2^\dagger} & G^<_{v_1 d_1} & 0 & G^<_{v_1 d_2} \\ G^<_{d_2 d_1^\dagger} & G^<_{d_2 v_1^\dagger} & G^<_{d_2 d_2^\dagger} & G^<_{d_2 d_1} & G^<_{d_2 v_1} & 0 \\ 0 & G^<_{d_1^\dagger v_1^\dagger} & G^<_{d_1^\dagger d_2^\dagger} & G^<_{d_1^\dagger d_1} & G^<_{d_1^\dagger v_1} & G^<_{d_1^\dagger d_2} \\ G^<_{v_1^\dagger d_1^\dagger} & 0 & G^<_{v_1^\dagger d_2^\dagger} & G^<_{v_1^\dagger d_1} & G^<_{v_1^\dagger v_1} & G^<_{v_1^\dagger d_2} \\ G^<_{d_2^\dagger d_1^\dagger} & G^<_{d_2^\dagger v_1^\dagger} & 0 & G^<_{d_2^\dagger d_1} & G^<_{d_2^\dagger v_1} & G^<_{d_2^\dagger d_2} \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Já as matrizes das auto-energias  $\Sigma^<$ ,  $\Sigma^r$  e  $\Sigma^a$  vão ter duas linhas (e duas colunas) com todos os termos nulos, pois o nível  $\varepsilon_1$  no PQ 1 não se acopla a nenhum reservatório normal.

$$\Sigma^< = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\Gamma_L \phi_L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\Gamma_R \phi_R & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Gamma_L \phi'_L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Gamma_R \phi'_R \end{bmatrix} \quad (3.50)$$

$$\Sigma^r = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\Gamma_L/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\Gamma_R/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Gamma_L/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Gamma_R/2 \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

A matriz de  $G^r(tt')$  é composta por:

$$G^r(tt') = \begin{bmatrix} G^r_{d_1 d_1^\dagger} & G^r_{d_1 v_1^\dagger} & G^r_{d_1 d_2^\dagger} & G^r_{d_1 d_1} & G^r_{d_1 v_1} & G^r_{d_1 d_2} \\ G^r_{v_1 d_1^\dagger} & G^r_{v_1 v_1^\dagger} & G^r_{v_1 d_2^\dagger} & G^r_{v_1 d_1} & G^r_{v_1 v_1} & G^r_{v_1 d_2} \\ G^r_{d_2 d_1^\dagger} & G^r_{d_2 v_1^\dagger} & G^r_{d_2 d_2^\dagger} & G^r_{d_2 d_1} & G^r_{d_2 v_1} & G^r_{d_2 d_2} \\ G^r_{d_1^\dagger d_1^\dagger} & G^r_{d_1^\dagger v_1^\dagger} & G^r_{d_1^\dagger d_2^\dagger} & G^r_{d_1^\dagger d_1} & G^r_{d_1^\dagger v_1} & G^r_{d_1^\dagger d_2} \\ G^r_{v_1^\dagger d_1^\dagger} & G^r_{v_1^\dagger v_1^\dagger} & G^r_{v_1^\dagger d_2^\dagger} & G^r_{v_1^\dagger d_1} & G^r_{v_1^\dagger v_1} & G^r_{v_1^\dagger d_2} \\ G^r_{d_2^\dagger d_1^\dagger} & G^r_{d_2^\dagger v_1^\dagger} & G^r_{d_2^\dagger d_2^\dagger} & G^r_{d_2^\dagger d_1} & G^r_{d_2^\dagger v_1} & G^r_{d_2^\dagger d_2} \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

O primeiro termo à direita na Eq. (3.45) fica:

$$\delta(t - t')I = \begin{bmatrix} \delta(t - t') & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta(t - t') & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta(t - t') & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta(t - t') & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \delta(t - t') & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \delta(t - t') \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

## 3.4 Considerações técnicas

Nesta seção fornecemos alguns detalhes práticos sobre os cálculos e a programação computacional utilizados no trabalho.

### Ocupação

A densidade de partículas, ou ocupação, é uma quantidade mensurável dada por  $\langle n(x, t) \rangle = \langle \psi^\dagger(x, t)\psi(x, t) \rangle$ . Esse objeto, no entanto, pode ser diretamente relacionado com a função de Green menor (lembrando (3.1) e ignorando a componente espacial):

$$\begin{aligned} \langle n(t) \rangle &= \langle \psi^\dagger(t)\psi(t) \rangle, \\ i\langle n(t) \rangle &= i\langle \psi^\dagger(t)\psi(t) \rangle, \\ i\langle n(t) \rangle &= G^<(tt). \end{aligned}$$

Após alguma manipulação podemos escrever:

$$\langle n_i(t) \rangle = \Re \left\{ -iG^<_{d_i d_i^\dagger}(t, t) \right\}. \quad (3.54)$$

#### 3.4.1 Funções de Green e regime de tensão

Neste trabalho consideramos que a tensão elétrica aplicada sobre o sistema pelos reservatórios normais pode ser alta ou nula. No caso de uma tensão alta, o potencial químico de um reservatório é muito maior que do outro ( $\mu_L \gg \mu_R$ ). Matematicamente, podemos considerar que os potenciais tendem a infinito. Quando fazemos o limite da função distribuição de Fermi-Dirac, tanto para elétrons como para buracos, obtemos 0 ou 1. Dessa forma as integrais de energia  $\phi_i(tt')$  e  $\phi'_i(tt')$  (ver Eq. (3.44) e (3.50)) são facilmente obtidas. Se  $f_i(\varepsilon)$  ou  $f_i(-\varepsilon)$  forem zero, as respectivas integrais também são zero. Por outro lado, se  $f_i(\varepsilon) = 1$  ou  $f_i(-\varepsilon) = 1$ ,  $\phi_i(tt')$  e  $\phi'_i(tt')$  serão iguais a  $\delta(t - t')$  pois:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon e^{i\varepsilon(t_1 - t_2)} = 2\pi\delta(t_1 - t_2). \quad (3.55)$$

Uma vantagem técnica do regime HB é que não é necessário calcular a evolução da FG retardada  $G^r(tt')$  (3.45). Isso porque os valores de  $\phi_i(tt')$  e  $\phi'_i(tt')$  que mencionamos anteriormente (0 ou  $\delta(t - t')$ ) são diretamente aplicados no produto  $G^r\Sigma^<$  que aparece na equação de Kadanoff-Baym (3.24) (e, equivalentemente, para a FG avançada  $G^a(tt')$ ). Exemplificando (com  $\phi_i(tt') = \delta(t - t')$ ):

$$\begin{aligned} G^r\Sigma^< &= \Gamma_l \int dt_1 G_{ij}^r(tt_1) \phi_l(t_1 t), \\ G^r\Sigma^< &= \Gamma_l \int dt_1 G_{ij}^r(tt_1) \delta(t_1 - t), \\ G^r\Sigma^< &= \Gamma_l G_{ij}^r(tt). \end{aligned} \quad (3.56)$$

A FG retardada no resultado (3.56) é facilmente calculada por<sup>12</sup>:

$$G_{ij}^r(tt) = -i\theta(t - t) \langle \{d_i(t), d_j^\dagger(t)\} \rangle = \frac{-i}{2} \delta_{i,j}. \quad (3.57)$$

Também consideramos que os reservatórios podem se acoplar ao sistema com seus potenciais químicos sendo zero, ou seja:  $\mu_L = \mu_R = 0$ . Neste caso dizemos que o sistema está submetido a tensão zero. Para este caso é preciso calcular as integrais  $\phi_i(tt')$  e  $\phi'_i(tt')$  numericamente. Entretanto, tomando  $k_B T = 0$ , é possível obter uma expressão analítica para as integrais de energia que contém as funções  $f_i(\varepsilon)$  e  $f_i(-\varepsilon)$ . O desenvolvimento dessa expressão é mostrado a seguir.

### 3.4.2 Temperatura zero

A temperatura se reflete diretamente na distribuição das cargas descrita pela distribuição de Fermi-Dirac. Na prática, devemos nos preocupar com o cálculo das funções  $\phi(tt')$  e  $\phi'(tt')$  que surgem na expressão da auto-energia  $\Sigma^<$  (na Eq. (3.24)):

$$\begin{aligned} \phi_i(tt') &= \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t-t')} f_i(\varepsilon), \\ \phi'_i(tt') &= \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{+i\varepsilon(t-t')} f_i(-\varepsilon). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Para  $k_B T = 0$  as funções distribuição de elétrons  $f_i(\varepsilon)$  e de buracos  $f_i(-\varepsilon)$  em cada reservatório  $i$  podem ser aproximadas por uma função degrau:

$$\begin{aligned} f_i(\varepsilon) &\rightarrow \theta(\varepsilon - \mu_i), \\ f_i(-\varepsilon) &\rightarrow 1 - \theta(\varepsilon - \mu_i). \end{aligned} \quad (3.59)$$

<sup>12</sup> Na Eq. (3.57) consideramos apenas  $\{d(t), d^\dagger(t)\}$  porque todos os demais casos são nulos segundo as relações de anticomutação para férmons:  $\{d^\dagger(t), d^\dagger(t)\} = \{d(t), d(t)\} = 0$ .

Com essa mudança, as integrais da Eq. (3.58) podem ser calculadas por método de substituição simples. Vamos fazer  $t_j = t - t'$ . Sendo assim, a integral  $\phi_i(t_j)$  fica:

$$\begin{aligned}\phi_i(t_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t_j)} f_i(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t_j)} \theta(\varepsilon - \mu_i), \\ \phi_i(t_j) &= \int_{-D}^{\mu_i} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t_j)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-D}^{\mu_i} \frac{du e^u}{t_j} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^u}{i(t_j)} \Big|_{-D}^{\mu_i}, \\ \phi_i(t_j) &= \frac{i}{2\pi} \frac{e^{-i\mu_i t_j} - e^{iD t_j}}{t_j},\end{aligned}\tag{3.60}$$

onde tomamos  $-i\varepsilon t_j = u$ .

Similarmente,  $\phi'_i(t_j)$  será:

$$\begin{aligned}\phi'_i(t_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{+i\varepsilon(t_j)} f_i(-\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{+i\varepsilon(t_j)} (1 - \theta(\varepsilon - \mu_i)), \\ \phi'_i(t_j) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-D}^D d\varepsilon e^{+i\varepsilon(t_j)} - \frac{1}{2\pi} \int_{-D}^{\mu_i} d\varepsilon e^{+i\varepsilon(t_j)}, \\ \phi'_i(t_j) &= \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{e^{iD t_j} - e^{-iD t_j}}{it_j} - \frac{e^{i\mu_i t_j} - e^{-i\mu_i t_j}}{it_j} \right], \\ \phi'_i(t_j) &= \frac{i}{2\pi} \frac{e^{i\mu_i t_j} - e^{iD t_j}}{t_j}.\end{aligned}\tag{3.61}$$

Por último, devemos fazer uma consideração sobre o ponto  $t_j = 0$ , quando os tempos forem iguais ( $t_j = t - t'$ ), ou ambos iguais a zero. Para tratar a indeterminação, tomamos os limites  $t_j \rightarrow 0$  dos resultados das equações (3.60) e (3.61) e por isso:

$$\begin{aligned}\lim_{t_j \rightarrow 0} \phi_i(t_j) &= \frac{i}{2\pi} \lim_{t_j \rightarrow 0} \frac{e^{-i\mu_i t_j} - e^{iD t_j}}{t_j} = \frac{i}{2\pi} \lim_{t_j \rightarrow 0} \frac{(-i\mu_i e^{-i\mu_i t_j} - iD e^{iD t_j})}{1}, \\ \lim_{t_j \rightarrow 0} \phi_i(t_j) &= \frac{i}{2\pi} \frac{(-i\mu_i - iD)}{1} = \frac{\mu_i + D}{2\pi}, \\ \text{e, } \lim_{t_j \rightarrow 0} \phi'_i(t_j) &= \frac{-\mu_i + D}{2\pi}.\end{aligned}\tag{3.62}$$

### 3.4.3 Método de Runge-Kutta

Sabemos que a evolução temporal das correntes elétricas e das ocupações eletrônicas em cada sistema podem ser expressas através de FG resolvidas temporalmente. Entretanto, essas

funções geralmente estão agrupadas em conjuntos de equações de movimento (Eq. (3.24) e Eq. (3.45)), isto é, em sistemas de equações diferenciais acopladas. Como tentamos esclarecer nas seções 3.1.1 e 3.3, nos sistemas DPQ/SC e DPQ/SC/Luz, não estão presentes interações de muitos corpos, e por isso o sistema de equações diferenciais ordinárias é fechado e pode ser solucionado numericamente com certa facilidade.

Tanto para obter o conjunto de  $G^<(tt)$  como para  $G^r(tt')$  utilizamos o método de Runge-Kutta de segunda ordem. É um método padrão de resolução de equações diferenciais, com alternativas mais sofisticadas como resoluções de quarta ordem e/ou algorítimos de passo adaptativo. Neste trabalho o método com duas interações e passo fixo se provou suficiente para obter precisão e estabilidade desejáveis nos resultados<sup>13</sup>.

No método de Runge-Kutta utilizamos a expressão da equação de movimento para estimar o valor da própria função no ponto seguinte. Para tanto, utilizamos um valor conhecido da função, isto é, uma condição de contorno. Repetindo o processo e fazendo uma média ponderada dos valores encontrados, conseguimos um resultado mais refinado, por isso, Runge-Kutta de segunda ordem.

Podemos demonstrar matematicamente com um exemplo. Digamos que queremos encontrar a evolução temporal da função  $G(t)$ , cuja expressão da primeira derivada é:

$$i \frac{\partial G(t)}{\partial t} = f(t) = f_0 G(t). \quad (3.63)$$

Para uma EDO de primeira ordem para a qual conhecemos o valor em  $t = 0$ ,  $G(0) = G_0$ , podemos calcular o valor da função em um tempo  $\Delta t$  posterior, ou seja,  $G(t + \Delta t) = G(\Delta t)$  fazendo:

$$\begin{aligned} f(0) &= f_0 G(0), \\ G(\Delta t) &= G(0) + \Delta t f(0). \end{aligned} \quad (3.64)$$

O resultado na Eq. (3.64) pode ser refinado se recalcularmos o valor de  $G(\Delta t)$  fazendo

$$\begin{aligned} f(\Delta t) &= f_0 G(\Delta t), \\ G(\Delta t) &= G(0) + \frac{\Delta t}{2} (f(0) + f(\Delta t)). \end{aligned} \quad (3.65)$$

Essa operação pode ser feita novamente, calculando agora o valor de  $G(2\Delta t)$ , por exemplo, utilizando  $G(\Delta t)$  como valor inicial e assim por diante, até que o valor máximo de  $t$  seja atingido. Quanto menor  $\Delta t$ , melhor será a descrição da evolução temporal da função  $G(t)$  (guardados os limites numéricos do método).

<sup>13</sup> Testes utilizando método de Runge-Kutta de quarta ordem não mostraram uma variação significativa em relação aos resultados de segunda ordem e, por esse motivo, optamos por seguir com a abordagem de segunda ordem, que requer um tempo menor de cálculo.

Vamos considerar o caso da função  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ , com condição de contorno  $y = y_n$  para  $x = x_n$ , se quisermos escrever uma fórmula geral (145) para o cálculo do termo  $n + 1$  segundo o método RK2, teremos:

$$y_{n+1} = y_n + k_2. \quad (3.66)$$

Para utilizar essa fórmula geral devemos obter primeiramente:

$$k_1 = hf(x_n, y_n),$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1). \quad (3.67)$$

### 3.4.4 Parâmetros e unidades

Nessa subseção tratamos brevemente das unidades e valores típicos dos parâmetros considerados ao longo deste trabalho. Com o objetivo de construir uma análise generalizada dos resultados, os parâmetros e escalas são apresentados no texto numericamente sem o acompanhamento de suas respectivas unidades de grandeza. De fato, as grandezas são expressas como função de  $\Gamma_0$ .  $\Gamma_0/\hbar$  é a taxa de tunelamento entre reservatórios e nível eletrônico acoplado. Essa taxa é calculada pela regra de ouro de Fermi (138) e fornece a largura de linha dos níveis de um PQ.

Sendo assim, a energia é expressa em unidades de  $\Gamma_0$  e o tempo, inverso da taxa, é expresso em unidades de  $t_0 = \hbar/\Gamma_0$ . As ocupações dos níveis eletrônicos, por se tratarem de probabilidades, são grandezas adimensionais. A corrente elétrica, no entanto, é dada em unidades de  $I_0 = e\Gamma_0/\hbar$ , pois  $I = \Delta Q/\Delta t$ .

Para PQs semicondutores acoplados, por exemplo, encontramos na literatura valores típicos de  $\Gamma_0$  em torno de  $1 \mu eV$  (Ref. (146)). Com isso, a escala temporal típica estaria multiplicada por  $t_0 \approx 1 \text{ ns}$ , enquanto a corrente elétrica seria expressa em unidades de  $I_0 \approx 0,5 \text{nA}$ .

# 4 Resultados: ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor

Neste capítulo apresentamos os resultados de nosso estudo teórico sobre o sistema DPQ/SC, formado por dois PQs acoplados através de um SC, descrito com detalhes na seção 2.1 do capítulo 2. Os resultados contemplam evoluções temporais das ocupações eletrônicas ( $n$ ) e das correntes elétricas ( $I$ ) e foram obtidos através de códigos computacionais próprios em linguagem FORTRAN. Estes códigos foram construídos a partir das equações e modelos numéricos discutidos no capítulo 3. Os resultados incluem análises para diferentes tensões elétricas aplicadas, bem como para diferentes intensidades dos acoplamentos entre sistema e reservatório.

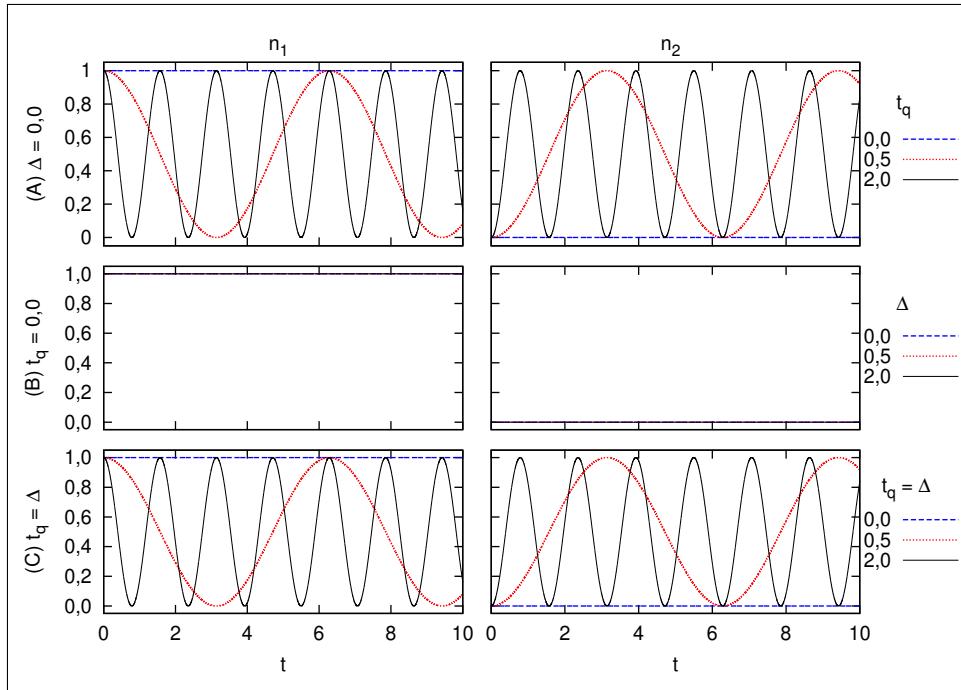
Na seção 4.1 são apresentados resultados para o sistema isolado, isto é, quando ele está desacoplado dos reservatórios de carga. Quando os reservatórios estão presentes, a geometria adotada considera que o reservatório à esquerda está acoplado apenas ao PQ 1, e que o reservatório à direita se acopla exclusivamente ao PQ 2. De acordo com o potencial aplicado sobre o sistema, temos dois regimes de tensão: tensão alta, onde a diferença entre os potenciais químicos dos dois reservatórios é muito grande e, tensão zero, onde os potenciais químicos  $\mu_L$  e  $\mu_R$  são iguais. Os resultados para tensão alta são discutidos na subseção 4.2.1 e, para a tensão zero, na subseção 4.2.2.

## 4.1 Caso $\Gamma = 0$ .

Consideramos primeiramente o caso em que o sistema está desacoplado dos reservatórios normais. Para tanto, os parâmetros que indicam as taxas de tunelamento entre PQs e reservatórios são  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0$ , de onde vem  $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R = 0$ . Na ausência de reservatórios normais, que usualmente promovem portadores de carga ao sistema, é preciso definir a configuração eletrônica inicial. Aqui vamos representar o estado inicial por  $|n_1 n_2\rangle$ , onde  $n_1$  ( $n_2$ ) indica a ocupação do PQ 1 (PQ 2).

Na Fig. 23 apresentamos as ocupações eletrônicas dos PQs 1 e 2, como função do tempo. As energias dos PQs são fixas em  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e a configuração inicial do sistema é  $|10\rangle$ . A figura mostra que, para  $t_q = 0$ , a ocupação do PQ 1 é constante em  $n_1 = 1$ , bem como  $n_2$  é constante em 0. Isso indica que o sistema permanece na configuração inicial  $|10\rangle$ , independentemente do valor adotado para  $\Delta$ . Para  $t_q \neq 0$ , as ocupações  $n_1$  e  $n_2$  oscilam com uma diferença de fase  $\pi$ . Esse comportamento indica que a carga é transferida de um PQ para o outro. O parâmetro  $\Delta$  não tem influência sobre as oscilações observadas. A análise do hamiltoniano do sistema na forma matricial - equação (2.2) no capítulo 2 - nos permite inferir que o sistema iniciado nos estados  $|10\rangle$  ou  $|01\rangle$  não pode ser afetado por mudanças no parâmetro  $\Delta$ , já que este parâmetro

Figura 23 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso  $\Gamma = 0$ , configuração inicial  $|10\rangle$ , variação de  $t_q$  e  $\Delta$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações do PQ 1 ( $n_1$ , coluna da esquerda) e do PQ 2 ( $n_2$ , coluna da direita) como função do tempo, regime  $\Gamma = 0$ . Os parâmetros  $t_q$  e  $\Delta$  são configurados de três maneiras: (A)  $t_q$  varia e  $\Delta = 0$ ; (B)  $t_q = 0$  e  $\Delta$  varia; (C)  $t_q = \Delta$ . Os valores adotados estão indicados na legenda interna. As energias dos PQs são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ .

atua apenas no subespaço formado pelos estados  $|11\rangle$  e  $|00\rangle$ .

Por considerarmos o processo de tunelamento direto<sup>1</sup>, a transferência de carga entre os PQs ocorre sempre com máxima probabilidade para níveis de mesma energia. Como  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ , as amplitudes máximas de oscilação são 1 para todas as curvas da Fig. 23. A Fig. 24 mostra como se altera a evolução temporal de  $n_1$  e  $n_2$  para diferentes valores das energias  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . O parâmetro de acoplamento entre os níveis está fixo em  $t_q = 2$ .

Para valores fora de ressonância (curvas pontilhada e tracejada na figura 24),  $n_1$  e  $n_2$  apresentam amplitudes máximas de oscilação menores que 1. Note que a amplitude máxima é maior quanto menor for a diferença entre as energias dos níveis: na curva tracejada (preta), a diferença entre as energias é  $|\varepsilon_2 - \varepsilon_1| = 2$ , enquanto nas pontilhadas (magenta) é  $|\varepsilon_2 - \varepsilon_1| = 4$ .

A mudança no valor da amplitude máxima é acompanhada pela mudança da frequência de oscilação de cada curva. A frequência aumentou conforme a diferença entre as energias cresceu (note que a frequência aumenta da curva de linha contínua (azul), onde  $|\varepsilon_2 - \varepsilon_1| = 0$ , para a pontilhada, em que  $|\varepsilon_2 - \varepsilon_1| = 4$ ).

<sup>1</sup> Vamos utilizar a sigla NT (de *normal tunneling*) para nos referirmos ao tunelamento ressonante, isto é, o tunelamento elástico entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ .

Podemos analisar esses resultados à luz da equação de Rabi [(135)-(136)]:

$$n_1(t) = \frac{t_q^2}{t_q^2 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2/4} \sin^2 \left[ t_q^2 + \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2}{4} \right]^{1/2} t,$$

$$n_2(t) = 1 - n_1(t). \quad (4.1)$$

Da expressão de  $n_1(t)$  podemos deduzir que a frequência  $\Omega_R$  de oscilação da função  $\sin^2(x)$  é dada por:

$$\Omega_R = \sqrt{t_q^2 + \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2}{4}}. \quad (4.2)$$

Pela Eq. (4.2) fica claro que, para  $t_q$  fixo, o aumento da diferença  $|\varepsilon_2 - \varepsilon_1|$  provoca aumento da frequência de oscilação. Podemos analisar também a amplitude máxima  $A_R$  da função  $\sin^2(x)$  em (4.1):

$$A_R = \frac{t_q^2}{t_q^2 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2/4}. \quad (4.3)$$

A amplitude é máxima quando a função  $\sin^2(x)$  for 1. A Eq. (4.3) mostra que o resultado da Fig. 24 concorda com a fórmula de Rabi: para  $t_q$  fixo, quanto maior a diferença entre as energias  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_1$ , menor será a amplitude máxima das oscilações de Rabi observadas.

Na Fig. 25 consideramos a mesma variação de parâmetros da Fig. 23, porém com o estado inicial  $|00\rangle$ . Para o item (A), os níveis não estão acoplados ao SC ( $\Delta = 0$ ).  $t_q$  assume valores diferentes (0, 0,5 e 2) de acordo com as formas e cores das curvas. Nessa situação, para qualquer valor de  $t_q$ , as curvas  $n_1$  e  $n_2$  permanecem constantes em zero. Concluímos desse comportamento que o sistema permanece no estado inicial  $|00\rangle$  se os PQs estiverem acoplados apenas diretamente.

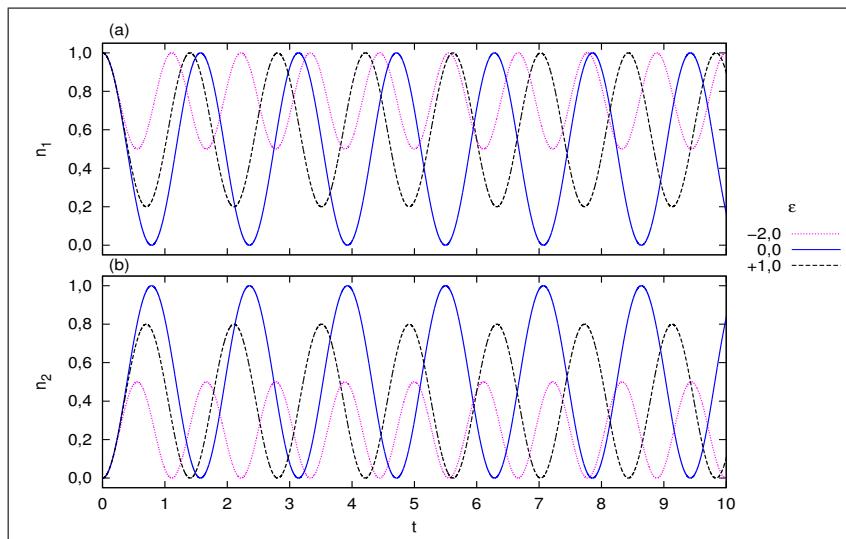
Na Fig. 25 (B), com  $t_q = 0$  e  $\Delta$  variável, observamos oscilações periódicas no tempo para  $\Delta \neq 0$ . As oscilações tem frequências que são maiores conforme  $\Delta$  aumenta e sua amplitude máxima é 1. O padrão de oscilação observado em (B) é semelhante ao observado na Fig. 23 (A). A diferença entre os dois resultados reside na fase entre as oscilações de  $n_1$  e  $n_2$ : na Fig. 23 (A), as oscilações acontecem alternadamente (com fase  $\pi$ ), enquanto na Fig. 25 (B), as oscilações são coincidentes, isto é, a fase entre curvas de mesma cor/forma é 0. Essa mudança na fase entre as oscilações nos permite diferenciar os processos físicos responsáveis pelo transporte de carga através deste sistema. Se a fase é  $\pi$ , como na Fig. 23, ocorre tunelamento direto de elétrons entre os PQs (NT). Se a fase for 0, o processo de tunelamento ocorre simultaneamente entre os PQs e o SC, o que caracteriza a reflexão de Andreev cruzada.

Os máximos coincidentes na Fig. 25 caracterizam um *Cooper pair splitting*, com cada elétron do par sendo transferido a um PQ. Nos mínimos identificamos a formação de um par de Cooper no SC, através da transferência de dois elétrons, oriundos dos PQs 1 e 2. Fica claro que, neste processo, os estados de interesse são  $|00\rangle$  (com os dois PQs vazios) e  $|11\rangle$  (com os dois PQs ocupados), e não mais  $|10\rangle$  e  $|01\rangle$ . Essa verificação demonstra como a introdução de fenômenos de supercondutividade no sistema ocasiona a quebra da simetria do número de partículas. Um sistema inicialmente com 0 partículas (estado inicial  $|00\rangle$ ), passa a um estado de 2 partículas (estado  $|11\rangle$ ).

Ainda sobre a Fig. 25, destacamos como o caso (C), onde  $t_q = \Delta$ , apresenta os mesmos resultados do caso (B) onde,  $t_q = 0$ . O mesmo ocorre entre os itens (A) e (C) da Fig. 23. Nas duas comparações, a igualdade dos resultados indica o mesmo: quando o sistema DPQ/SC isolado é iniciado em uma determinada configuração, apenas um dos dois fenômenos, CAR ou NT, vai ocorrer. A CAR apenas vai ser identificada quando o parâmetro  $\Delta$  for não-nulo e o número inicial de partículas for par (0 ou 2). Já o NT está associado com a ativação do acoplamento  $t_q$  e número inicial de partículas ímpar (1). Essa relação entre os estados iniciais do sistema e os acoplamentos  $t_q$  e  $\Delta$  fica mais clara analisando-se mais uma vez a matriz do sistema (Eq. (2.2)). Os subespaços contendo  $t_q$  e  $\Delta$  estão desacoplados na ausência de reservatórios.

Na Fig. 26 são mostradas as ocupações  $n_1$  e  $n_2$  em função do tempo para diferentes valores das energias dos PQs, com o sistema inicialmente configurado em  $|10\rangle$ . Os parâmetros de acoplamento estão fixos em  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$ .

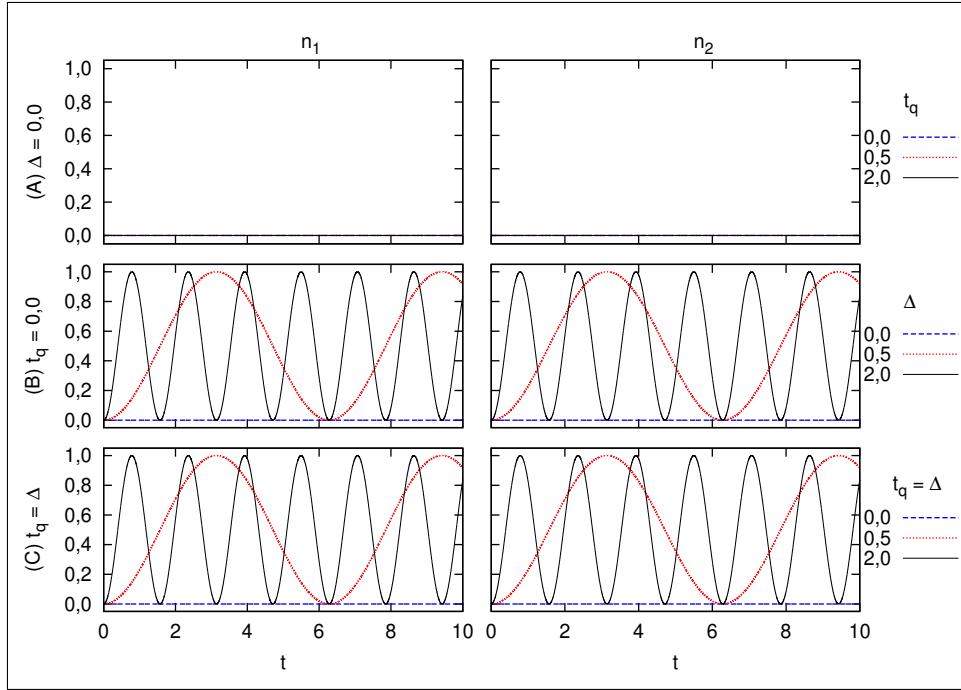
Figura 24 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso  $\Gamma = 0$ , configuração inicial  $|10\rangle$ , variação de  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações do PQ 1 ( $n_1$ , gráfico superior) e do PQ 2 ( $n_2$ , inferior) como função do tempo, regime  $\Gamma = 0$ . As energias são tais que  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 = \varepsilon$ , em todos os casos  $t_q = 2$ ,  $\Delta = 0$  e os valores de  $\varepsilon$  são indicados na legenda interna.

Figura 25 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso  $\Gamma = 0$ , configuração inicial  $|00\rangle$ , variação de  $t_q$  e  $\Delta$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações do PQ 1 ( $n_1$ , coluna da esquerda) e do PQ 2 ( $n_2$ , coluna da direita) como função do tempo, regime  $\Gamma = 0$ .  $t_q$  e  $\Delta$  são definidos segundo: (A)  $t_q$  varia e  $\Delta = 0$ ; (B)  $t_q = 0$  e  $\Delta$  variável e em (C)  $t_q = \Delta$ . A variação dos valores de  $t_q$  e/ou  $\Delta$  está indicada na legenda interna da Figura. As energias dos níveis são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ .

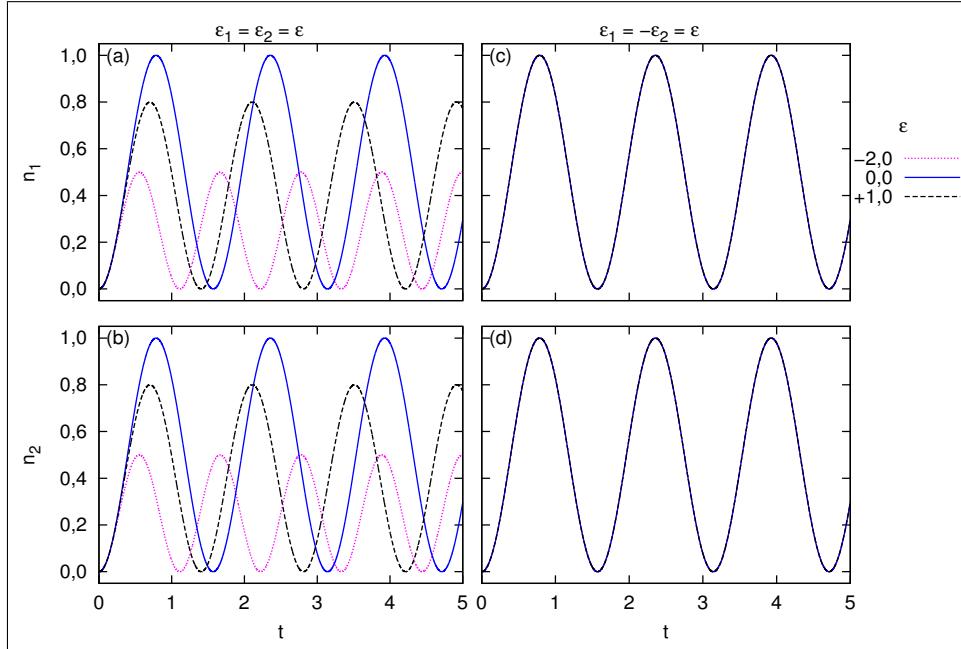
De acordo com as análises feitas para as figuras 23 e 25, sabemos que, com configuração inicial  $|00\rangle$  e  $\Delta \neq 0$ , apenas observaremos a ocorrência de CAR no sistema.

Verificamos na Fig. 26 que, quando as energias dos dois níveis são iguais (casos (a) e (b)), as oscilações apenas tem amplitude máxima para  $\varepsilon = 0$ . Para este valor de energia (curvas contínuas/azuis), os níveis dos PQs estão em ressonância com o nível  $\varepsilon_{SC} = 0$ , ao centro do GAP supercondutor<sup>2</sup>. Essa ressonância garante probabilidade máxima de tunelamento via CAR. Para as outras duas curvas dos gráficos (a) e (b), a amplitude máxima de oscilação é maior quanto menor o módulo de  $\varepsilon$  (a amplitude máxima da curva tracejada/preta é maior que da curva pontilhada/magenta). Além disso, as frequências também são alteradas de acordo com a diferença  $|\varepsilon - \varepsilon_{SC}|$ , sendo diretamente proporcionais a esta (maiores frequências para maiores energias, em módulo). De fato, se as energias dos PQs forem  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = +2$  teremos curvas de  $n_1$  e  $n_2$  coincidentes com as pontilhadas em (a) e (b), nas quais as energias são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -2$ .

Nos casos (c) e (d) da Fig. 26, em que as energias dos PQs tem sinais opostos, a amplitude máxima não se altera, sendo igual a 1 para as três curvas. As frequências também são as mes-

<sup>2</sup> A energia de  $\varepsilon_{SC}$  é zero porque o SC, que está aterrado, tem potencial químico  $\mu_{SC} = 0$ .  $\varepsilon_{SC}$  é o nível de energia onde podemos encontrar/formar os pares de Cooper no SC.

Figura 26 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC, caso  $\Gamma = 0$ , configuração inicial  $|00\rangle$ , variação de  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações dos PQs como função do tempo no regime  $\Gamma = 0$ . Os gráficos superiores mostram  $n_1$  e os inferiores  $n_2$ . O acoplamento entre os PQs se dá através do SC, pois  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$ . Para os gráficos (a) e (b) as energias variam com  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$ . Para (c) e (d) as energias  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  tem sinais opostos, isto é:  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 = \varepsilon$ . Os valores de  $\varepsilon$  estão indicados na legenda interna.

mas. Esse comportamento mostra que se as energias dos PQs forem  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ , a probabilidade de ocorrer CAR é a mesma, independentemente do valor de  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ .

O que confirmamos através dos resultados da Fig. 26 é que as amplitudes de oscilação de  $n_1$  e  $n_2$  são sempre máximas e iguais a 1 se as energias dos níveis se conservarem em relação a  $\varepsilon_{SC} = 0$ . Fica claro o motivo pelo qual nos casos (c) e (d), as curvas de ocupação não apresentam dependência com o valor de  $\varepsilon$ : a relação  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 0$  é sempre satisfeita<sup>3</sup>. Quando essa relação não é validada, as probabilidades da CAR acontecer diminuem (o que é visualizado na queda da amplitude máxima das oscilações em (a) e (b)).

A análise do comportamento do sistema DPQ/SC isolado ( $\Gamma = 0$ ) foi importante para construirmos noções básicas a cerca dos fenômenos inerentes ao sistema. Além disso, aprendemos a reconhecer esses fenômenos nos gráficos de ocupação eletrônica em função do tempo. Dessa forma podemos passar à discussão dos resultados que consideram a presença de reservatórios fermiônicos normais e não-interagentes.

<sup>3</sup> O que estamos dizendo é que: para  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$ ,  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon + \varepsilon = 2\varepsilon$ , que é zero se, e somente se,  $\varepsilon = 0$ . Por outro lado, se  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 = \varepsilon$ , quando fizermos a soma, obteremos  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon + (-\varepsilon)$ , que é sempre zero.

## 4.2 Casos com $\Gamma \neq 0$

Nessa seção são apresentados os resultados para os quais  $\Gamma \neq 0$ . Isso significa que reservatórios de carga estão acoplados ao sistema DPQ/SC, permitindo a passagem de corrente elétrica pelo mesmo. Conforme representado na Fig. 18, o PQ 1 está acoplado a um reservatório à sua esquerda ( $L$ ), de potencial químico  $\mu_L$ , enquanto o PQ 2 está acoplado a um reservatório à sua direita ( $R$ ), de potencial químico  $\mu_R$ . Dependendo desses potenciais, o sistema estará submetido a tensões elétricas diferentes. Na subseção 4.2.1 são apresentados os resultados para o sistema submetido a uma tensão alta, ou *high bias* (HB)<sup>4</sup>. Na subseção 4.2.2, analisamos o comportamento do sistema sob tensão zero, regime que chamamos de *zero bias* (ZB).

As correntes, como explicado no capítulo 3, são apresentadas em duas componentes:  $I_L$ , entre o reservatório à esquerda e o PQ 1,  $I_R$ , entre o PQ 2 e o reservatório à direita. O cálculo das correntes depende diretamente do valor das taxas de tunelamento entre os reservatórios e os PQs. Para o sistema DPQ/SC consideramos três configurações dos parâmetros  $\Gamma_L$  e  $\Gamma_R$ :

- (a)  $\Gamma_L = 0$  e  $\Gamma_R = 0,3$  - apenas o reservatório da direita acoplado;
- (b)  $\Gamma_L = 0,3$  e  $\Gamma_R = 0,5$  - ambos acoplados, mas taxas diferentes;
- (c)  $\Gamma_L = 0,3$  e  $\Gamma_R = 0,3$  - ambos acoplados, com taxas iguais.

Para níveis desacoplados de reservatórios, com  $\Gamma_i = 0$ , consideramos arbitrariamente a ocupação inicial deste como  $n_i(0) = 0$ .

### 4.2.1 Tensão alta (HB)

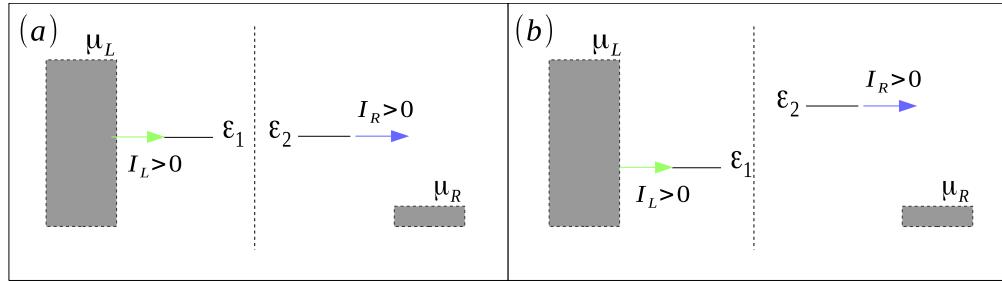
Os resultados apresentados nessa subseção consideram uma tensão alta (HB) aplicada ao sistema DPQ/SC. Esse regime de tensão é interessante pois garante apenas um sentido de deslocamento dos elétrons, o que é ideal numa primeira análise do sistema fora do equilíbrio.

Um esquema apresentado na Fig. 27 tem o objetivo de demonstrar esse sentido único de deslocamento. Neste trabalho o regime de tensão alta é construído matematicamente fazendo  $\mu_L \rightarrow +\infty$  e  $\mu_R \rightarrow -\infty$ , de modo que  $n_1(0) = 1$  e  $n_2(0) = 0$ . Dessa forma, o sentido da corrente será da esquerda para a direita (do PQ 1 para o PQ 2), sentido que tomamos arbitrariamente como positivo.

A Fig. 28 mostra ocupações e correntes elétricas, como função do tempo, para o sistema DPQ/SC sob HB. Para estes resultados considera-se o reservatório da esquerda desacoplado. Nesse caso, como o potencial químico de  $\mu_R$  é muito baixo em relação a  $\varepsilon_2$ , vamos tomar o estado inicial do sistema como  $|00\rangle$ . A energia dos níveis é  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ . Na Figura são apresentados três conjuntos de resultados para comparação: em (A), os parâmetros de acoplamento utilizados foram  $t_q = 2$  e  $\Delta = 0$ ; em (B), os resultados são para  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$  e no caso (C) fizemos  $t_q = \Delta = 2$ .

<sup>4</sup> O termo *bias* é utilizado para fazer distinção entre a tensão aplicada entre reservatórios e as tensões de *gate*, ou porta, aplicadas capacitivamente aos PQs. As tensões de gate nos permitem alterar a energia dos PQs podendo, dessa forma, alterar também o número de partículas dentro deles. A tensão bias também costuma ser chamada tensão fonte-dreno (do inglês *source-drain*).

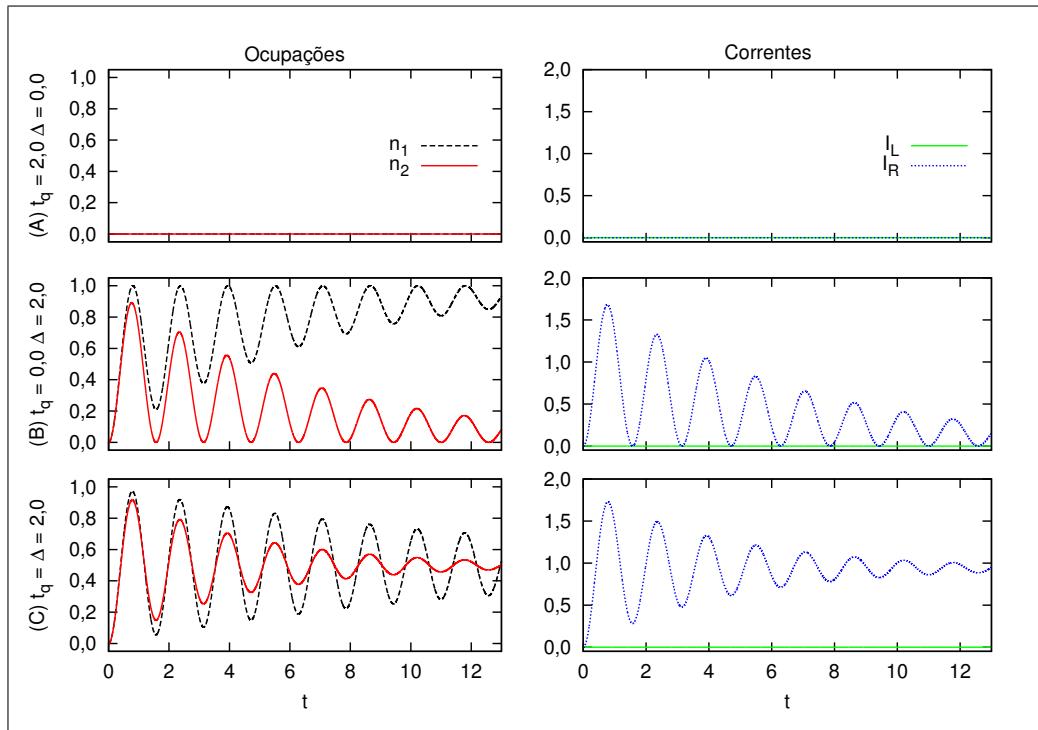
Figura 27 – Sinais de  $I_L$  e  $I_R$  no regime de tensão alta (HB), de acordo com a energia dos níveis acoplados a cada reservatório.



Fonte: Autores (2017).

No esquema representamos sentidos possíveis das correntes elétricas no sistema DPQ/SC, em regime HB, para diferentes energias dos PQs. Os PQs são representados por  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . O reservatório acoplado ao PQ 1 é o de potencial químico  $\mu_L$  e o acoplado ao PQ 2,  $\mu_R$ . São consideradas duas situações: (a)  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$  e (b)  $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$ . A interação entre os dois níveis está representada pela linha tracejada. O sentido de  $I_L$  está representado pelas setas verdes e o de  $I_R$  pelas azuis.

Figura 28 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime HB, com  $\Gamma_L = 0$ , variação de  $t_q$  e  $\Delta$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações (esquerda) e correntes elétricas (direita) em função do tempo em regime HB. O reservatório da esquerda não está acoplado e a configuração inicial do sistema é  $|00\rangle$ . Ocupações e correntes estão identificadas nas legendas internas. Os parâmetros de acoplamento são (A)  $t_q = 2$ ,  $\Delta = 0$ ; (B)  $t_q = 0$ ,  $\Delta = 2$ ; (C)  $t_q = \Delta = 2$ . As energias dos PQs são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e, além disso,  $\Gamma_R = 0,3$ .

As ocupações dos PQs na Fig. 28 (A), onde  $t_q = 2$  e  $\Delta = 0$ , não sofrem nenhuma alteração. Com ambos os PQs vazios, o tunelamento ativado por  $t_q$  não acontece. Mesmo na presença do reservatório  $R$  não é possível introduzir portadores no sistema, pois  $\mu_R \ll \varepsilon_2$ . Como consequência dessa ausência de cargas no PQ 2, a corrente  $I_R$  (coluna da direita) é nula para todo  $t$ .  $I_L$  é nula em todos os casos da Fig. 28 porque consideramos  $\Gamma_L = 0$ .

No caso (B), dada a condição inicial  $|00\rangle$  e o acoplamento  $\Delta = 2$ , é possível que ocorra CAR. De fato, a fase 0 entre as oscilações de  $n_1$  e  $n_2$  corrobora essa hipótese. A separação de um par de Cooper a partir do SC pode promover portadores simultaneamente aos PQs 1 e 2. Uma vez que o PQ 2 é populado, surge uma oscilação na corrente  $I_R$ , no gráfico à direita. Essa corrente se anula quando os elétrons voltam a formar um par de Cooper no SC. Isso é deduzido da coincidência entre os mínimos de  $n_2$  e  $I_R$  (podemos observar, por exemplo, o primeiro mínimo dos gráficos em (B), que acontece pouco antes de  $t = 2$ ). A oscilação de Rabi entre os PQs (e o SC) eventualmente vai cessar, com  $n_1$  convergindo para 1 e  $n_2$  para 0. Esse decaimento das oscilações se deve à presença do reservatório  $R$ , que introduz um processo de decoerência no sistema. Após algumas oscilações, percebemos que a tendência é que o elétron no PQ 2 vá para o reservatório  $R$ , com potencial químico baixo. Por outro lado, a tendência para o elétron no PQ 1 é que ele fique "preso", já que não existe reservatório acoplado diretamente ( $\Gamma_L = 0$ ) pelo qual ele possa ser removido. Um elétron no PQ 1 também não pode passar diretamente ao PQ 2, pois  $t_q = 0$ . Além disso, este não pode retornar ao SC pois, uma vez que a carga no PQ 2 vai para o reservatório, o sistema fica com um número ímpar de partículas, condição que não permite a ocorrência de CAR. Nessa análise compreendemos porque  $n_1$  converge para 1 no regime estacionário. A corrente  $I_R$  tende a zero porque depende diretamente de  $n_2$ . Uma vez que o PQ 2 fica vazio, a corrente só poderia ser diferente de zero se os elétrons do reservatório tivessem energia próxima de  $\varepsilon_2$ , permitindo injeção de elétrons no sistema.

As ocupações na Fig. 28 (C) começam a evolução de forma semelhante ao caso (B), indicando novamente que os PQs 1 e 2 são populados via CAR. Induzindo também oscilações na corrente  $I_R$ , que podem ser vistas no gráfico à direita. No entanto, após as primeiras oscilações fica claro que as ocupações  $n_1$  e  $n_2$  estão convergindo para 0,5, não mais para 1 e 0, como acontecia em (B). Essa mudança deve-se à presença do acoplamento direto entre os PQs,  $t_q = 2$ . Ele vai redistribuir a carga no sistema permitindo que a CAR aconteça novamente. Se pudéssemos traduzir as probabilidades em eventos, construiríamos a seguinte sequência: 1 - os PQs 1 e 2 são populados via CAR; 2 - elétron no PQ 2 é transferido para o reservatório  $R$ ; 3 - elétron no PQ 1 vai para o PQ 2 via NT; 4 - elétron no PQ 2 é transferido para o reservatório  $R$ ; 5 - PQs estão parcialmente no estado  $|00\rangle$  e podem ser populados via CAR.

A junção da CAR com o NT, no contexto específico da Fig. 28 (C), faz com que, em média, a ocupação  $n_2$  nunca seja 0. O fato de  $I_R$  ser diferente de zero, inclusive no estado estacionário, indica que encontramos uma configuração em que os elétrons fluem continuamente do sistema para o reservatório  $R$ <sup>5</sup>, usando o SC como reservatório.

<sup>5</sup> Isso não quer dizer que não há gasto de energia para promover essa corrente. O potencial químico de  $R$  é

Vamos analisar o que ocorre com o sistema quando o reservatório  $L$  é acoplado ao PQ 1, admitindo que o potencial químico do mesmo é  $\mu_L \gg 0$ . Para o regime HB, a configuração inicial mais provável é  $|10\rangle$ , pois o potencial químico do reservatório  $R$  é  $\mu_R \ll 0$ .

A Fig. 29 compara ocupações e correntes para valores diferentes de  $\Gamma_L$  e  $\Gamma_R$ . Nos gráficos (a) e (b), temos  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ , ambos não-nulos. Para (c) e (d) consideramos  $\Gamma_L = \Gamma_R$ , também não-nulos. As energias dos níveis são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e os acoplamentos entre os PQs são  $t_q = \Delta = 2$ . Embora os dois acoplamentos estejam presentes, o estado inicial  $|10\rangle$  favorece as transferências por NT, o que é confirmado pelas oscilações invertidas (com fase  $\pi$ ) entre  $n_1$  e  $n_2$  nos gráficos (a) e (c). Comparando os dois resultados vemos que eles são similares a não ser pela pequena diferença entre os máximos de  $n_2$ . Os picos de oscilação de  $n_2$  são menores em (a) porque  $\Gamma_R$  é maior do que em (c), fazendo o sistema perder coerência mais rapidamente. Mesmo com essa diferença durante o transiente, em ambos os casos as ocupações convergem para 0,5.

As correntes, nos gráficos (b) e (d), mostram  $I_L \neq 0$ , dado o acoplamento do reservatório  $L$  ao sistema. Conforme discutimos através dos esquemas na Fig. 27, as correntes  $I_L$  e  $I_R$  são sempre positivas no regime HB. Observamos ainda  $I_R > I_L$  para o caso  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  (b), ao passo que para  $\Gamma_L = \Gamma_R$  (d) temos  $I_L = I_R$ . Apesar do aumento de  $\Gamma_i$  implicar num maior amortecimento das oscilações, este também leva a maiores picos de corrente. Por isso,  $I_R$  tem um máximo acima de 2,5 em (b) (com  $\Gamma_R = 0,5$ ) enquanto para  $\Gamma_i = 0,3$  o valor máximo das correntes está próximo de 1,5.

Para entender melhor a origem da diferença entre valores estacionários no gráfico (b) vamos analisar a Fig. 30. Nela apresentamos ocupações e correntes para acoplamento assimétrico do sistema com os reservatórios,  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ . São comparados resultados considerando a ausência ( $\Delta = 0$ , (a) e (b)) e a presença ( $\Delta = t_q$ , (c) e (d)) do SC no sistema. Os gráficos (c) e (d) repetem os resultados mostrados em (a) e (b) na Fig. 29.

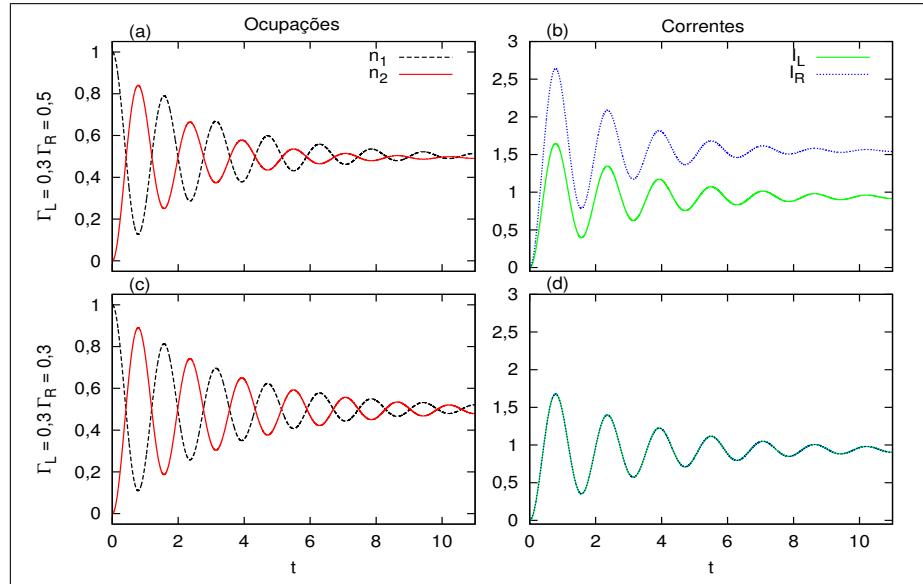
Se o SC está ausente ((a) e (b)), as transições entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  no gráfico (a) são provocadas apenas por NT. As duas ocupações convergem para valores próximos de 0,4, com alternância entre os máximos de  $n_1$  e  $n_2$  durante o transiente. Em (c) a introdução do SC provoca o aumento dos valores estacionários para 0,5. As consequências destas pequenas diferenças entre (a) e (c) refletem-se nos comportamentos das correntes em (b) e (d). Na presença do SC os mínimos de  $I_R$  são maiores que os de  $I_L$  e as correntes continuam sempre diferentes para tempos longos.

Repetindo as configurações da Fig. 29 (c) e (d) ( $\Gamma_L = \Gamma_R$ ) com  $\Delta = 0$ , o comportamento observado não será alterado. Isso demonstra que, por mais que a fase entre as oscilações indique que o NT é o processo de transferência dominante, a ação do SC por CAR ainda pode influenciar o comportamento do sistema. De fato, a diferença entre as populações observadas na Fig. 29 (a) durante o transiente é provocada pelo acoplamento assimétrico com os reservatórios, que permite trocas entre SC e PQs. Essa pequena influência da CAR via assimetria de acoplamento é suficiente para produzir  $I_R > I_L$  também no regime estacionário.

---

mantido constante em  $\mu_R \rightarrow -\infty$  com custo energético.

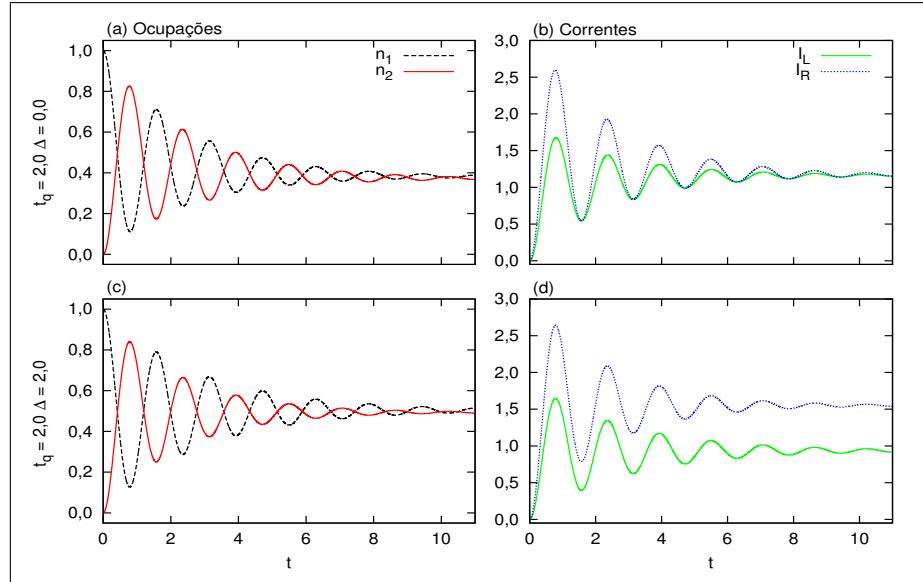
Figura 29 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime HB, comparação entre  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  e  $\Gamma_L = \Gamma_R$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações e correntes em função do tempo em regime de HB. Comparação entre as configurações  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  ((a) e (b)) e  $\Gamma_L = \Gamma_R$  ((c) e (d)). Além disso,  $t_q = \Delta = 2$  e  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ .

Figura 30 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime HB, com  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ , comparação  $\Delta = 0$  e  $\Delta = t_q$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações e correntes em função do tempo em regime de HB. Comparação entre as configurações  $\Delta = 0$  ((a) e (b)) e  $\Delta = t_q$  ((c) e (d)), ambos considerando  $\Gamma_R = 0,5 > \Gamma_L = 0,3$ .  $t_q = 2$  e  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ .

### 4.2.2 Tensão zero (ZB)

Nesta subseção apresentamos resultados para o sistema DPQ/SC submetido a tensão zero (ZB). Os potenciais químicos dos reservatórios são  $\mu_L = \mu_R = 0$ . Como condição de contorno para o problema, definimos as ocupações iniciais  $n_1(t)$  e  $n_2(t)$  para  $t = 0$ . Cronologicamente admitimos que os acoplamentos  $t_q \in \Delta$ , bem como qualquer outro acoplamento entre níveis, apenas são acionados em  $t = 0$ . Além disso, consideramos que níveis e reservatórios são acoplados adiabaticamente. Para um tempo suficientemente longo, um acoplamento  $\Gamma_i$  de qualquer intensidade definirá a população de um nível  $i$  em  $t = 0$ .

O valor de  $n_i(0)$  depende do potencial químico  $\mu_i$ , da energia do nível  $\varepsilon_i$  e também da taxa de tunelamento  $\Gamma_i$ , que define a largura do nível. Matematicamente, podemos escrever:

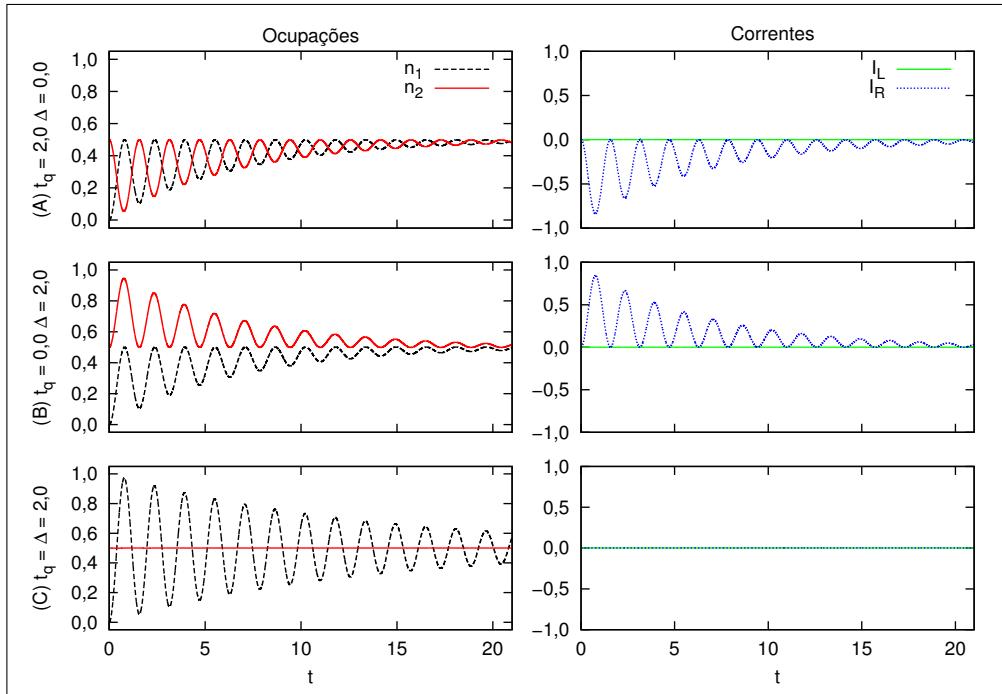
$$n_i(0) = \frac{1}{\pi} \left\{ \arctan \frac{2(\mu_i - \varepsilon_i)}{\Gamma_i} + \frac{\pi}{2} \right\}. \quad (4.4)$$

Os primeiros resultados para o sistema em ZB são apresentados na Fig. 31. Na coluna da esquerda são mostradas as ocupações ( $n_1$  e  $n_2$ ) e na coluna da direita as correntes ( $I_L$  e  $I_R$ ), ambos em função do tempo. A ocupação inicial do PQ 1, como discutimos na seção 4.2, é arbitrariamente zero ao fazermos  $\Gamma_L = 0$ . A ocupação inicial do PQ 2 é calculada pela Eq. (4.4). A corrente  $I_L$  é nula em todos os casos analisados ((A), (B) e (C)) devido à condição  $\Gamma_L = 0$ .

Na Fig. 31 (A), com  $\Delta = 0$  e  $t_q = 2$ , as oscilações nas ocupações indicam trocas entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  por NT. Para o regime HB (Fig. 28 (A)), nenhuma oscilação era observada para  $n_1$  e  $n_2$ . A mudança é ocasionada pelo valor inicial de  $n_2$ , que é 0,5 em ZB. No regime estacionário, ambas as ocupações convergem para 0,5. O sinal da corrente  $I_R$  correspondente (coluna da direita, Fig. 31 (A)) mostra que ocorre entrada de carga no sistema através do reservatório  $R$ . Nos resultados para o regime HB (ver Fig. 27) convencionamos que uma corrente positiva indicaria movimento de cargas da esquerda para a direita.  $I_R$  negativa indica, portanto, que o sentido de deslocamento das cargas é do reservatório  $R$  para o PQ 2. Durante o transiente, sempre que a ocupação  $n_2$  retorna ao valor inicial, 0,5, a corrente  $I_R$  se anula.  $I_R$  converge para zero também no estado estacionário, com as ocupações se estabilizando em 0,5. Essa combinação de valores estacionários sugere que uma carga oscilando entre os dois PQs eventualmente vai impedir novas trocas entre o PQ 2 e o reservatório  $R$ .

Na situação (B) sabemos que a dinâmica observada entre  $n_1$  e  $n_2$  se dá devido a atuação do SC, via  $\Delta$ .  $n_1$  exibe o mesmo comportamento mostrado em (A), embora devido à CAR e não ao NT.  $n_2$ , por outro lado, parte de 0,5 e tem seu valor máximo próximo de 1. Podemos entender esse valor máximo de  $n_2$  como uma soma das probabilidades de ocupação via reservatório e via SC. A CAR requer quantidades de carga iguais nos dois níveis e, em função da ocupação inicial do PQ 2,  $n_2(0) = 0,5$ , a probabilidade desse fenômeno acontecer nesta configuração é de no máximo 50%. Por isso a ocupação máxima de  $\varepsilon_1$  é 0,5, já que outra fonte de portadores além

Figura 31 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime ZB, com  $\Gamma_L = 0$  e variação de  $t_q$  e  $\Delta$ .



Fonte: Autores (2017).

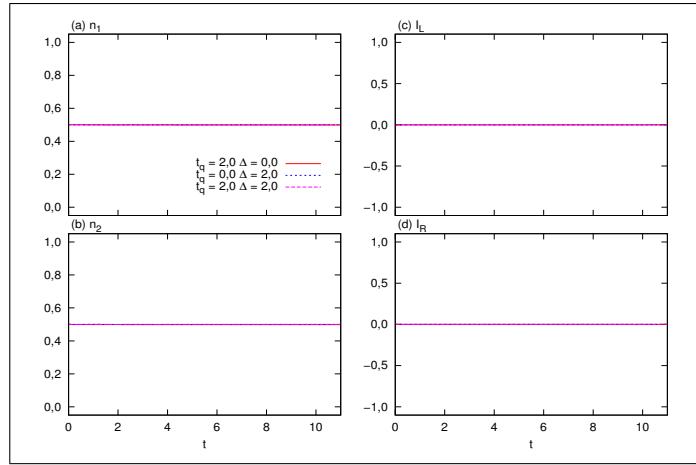
Ocupações dos PQs e correntes elétricas em função do tempo em regime ZB. As curvas são identificadas pelas legendas internas. Na fileira (A) consideramos para os dois gráficos  $t_q = 2$  e  $\Delta = 0$ ; em (B),  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$  e, para (C),  $t_q = \Delta = 2$ . As energias dos níveis são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e a taxa de tunelamento dos elétrons entre o PQ 2 e o reservatório à direita é  $\Gamma_R = 0,3$ .  $n_2(0)$  é determinado pela Eq. (4.4).

do SC não é considerada ( $t_q = 0$  e  $\Gamma_L = 0$ ). O sinal positivo da corrente  $I_R$ , no gráfico à direita, mostra que o reservatório está removendo portadores do sistema, ao invés de injetar. Mesmo quando  $I_R = 0$  (para tempos longos), o valor das ocupações  $n_1$  e  $n_2$  tende a 0,5, sugerindo que o fluxo de cargas com o reservatório é interrompido pela oscilação de um único par de Cooper entre os PQs e o SC.

Para o caso (C), onde os dois acoplamentos são combinados ( $t_q = \Delta$ ),  $n_2$  se apresenta como uma reta constante próxima de 0,5.  $n_1$ , por outro lado, oscila com amplitude inicial próxima de 1. O decaimento da oscilação é extremamente lento em comparação com os casos (A) e (B), embora  $\Gamma_R$  não tenha sido alterado. No gráfico à direita,  $I_R \approx 0$ , consequência de  $n_2$  não sofrer alterações no período considerado. Como  $n_2$  não oscila, não é possível distinguir NT de CAR. No entanto, a presença dos dois fenômenos em conjunto é o que provoca picos de oscilação próximos a 1 em  $n_1$ , como aconteceu para  $n_2$  no caso (B).

Considerando a presença de ambos os reservatórios em regime ZB, e energias  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ , encontramos na Fig. 32 ocupações constantes em 0,5, o que também foi observado para  $n_2$  na Fig. 31 (C). Similarmente, as correntes  $I_L$  e  $I_R$  são zero. Note que observamos os mesmos resultados tanto para  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  como para  $\Gamma_L = \Gamma_R$ .

Figura 32 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC, regime ZB, com  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ .



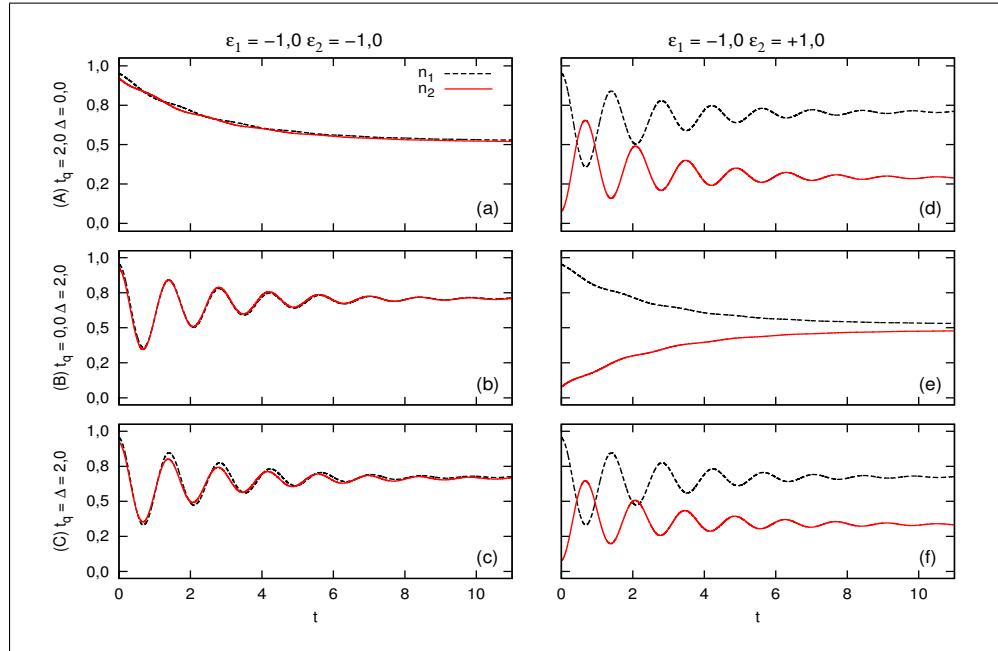
Fonte: Autores (2017).

Ocupações e correntes elétricas em função do tempo em regime ZB. As energias dos níveis são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e ambos os reservatórios estão acoplados ao sistema. Cada gráfico corresponde a uma grandeza:  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $I_L$  e  $I_R$ . Os valores dos parâmetros  $t_q$  e  $\Delta$  são diferentes de acordo com as cores/tipo de linha (indicados internamente). Os acoplamentos com os reservatórios são  $\Gamma_L = 0,3$  e  $\Gamma_R = 0,5$ .

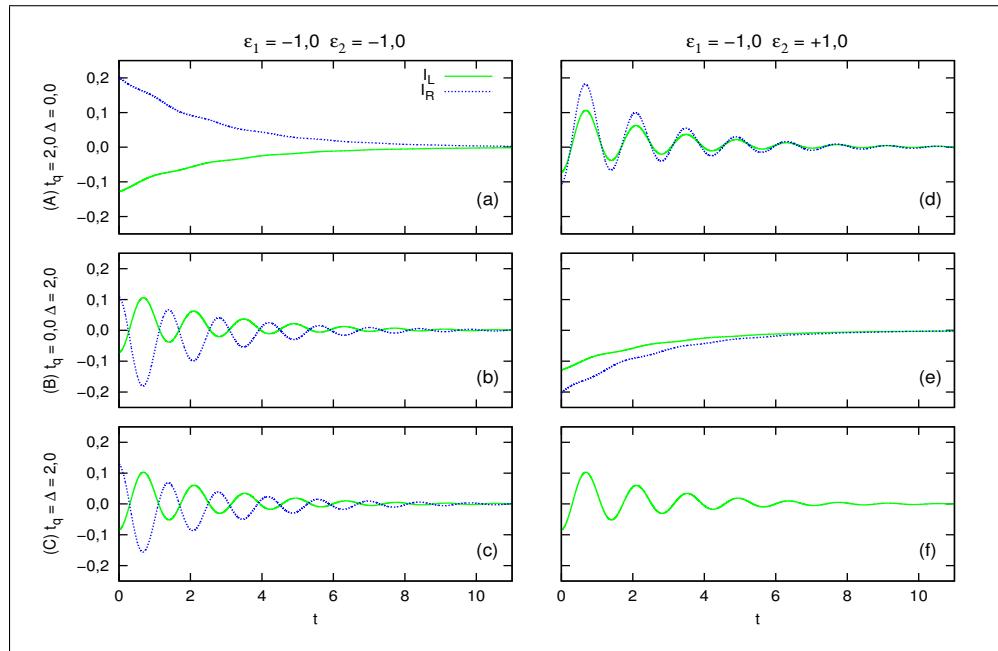
A Fig. 32 demonstra que os valores iniciais de ocupação, calculados pela Eq. (4.4), são os próprios valores estacionários. Esse também era o caso para os resultados da Fig. 31, no entanto, a ausência do reservatório  $L$  fazia com que as ocupações iniciais de  $n_1$  e  $n_2$  fossem diferentes, o que permitiu o surgimento de dinâmica transitória.

Na Fig. 33 são mostradas as ocupações em função do tempo para  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  diferentes de zero. Também são considerados diferentes valores de  $t_q$  e  $\Delta$ , conforme descrito na legenda da figura.

Em (a), (b) e (c) as energias dos PQs são menores que  $\mu_L$  e  $\mu_R$ . Com isso, os valores iniciais de  $n_1$  e  $n_2$  são próximos de 1. No caso (a), com  $t_q = 2$ , as ocupações decaem até um valor próximo de 0,5. Podemos perceber oscilações de pequena amplitude entre as duas curvas, as quais surgem devido à condição  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$ , que dá origem aos valores iniciais distintos. Quando as taxas são iguais ( $\Gamma_L = \Gamma_R$ ),  $n_1$  e  $n_2$  são exatamente iguais, independentemente dos parâmetros  $t_q$  e  $\Delta$ . No gráfico (b), com  $\Delta = 2$  e  $t_q = 0$ , surgem oscilações bem definidas a partir dos mesmos valores iniciais do caso (a). A fase entre as oscilações é 0, o que indica transições eletrônicas via CAR. A condição inicial  $n_1(0) \approx n_2(0)$  é propícia à ocorrência de CAR. O resultado (c), para o qual tomamos  $t_q = \Delta = 2$ , é praticamente o mesmo mostrado na Fig. 33 (b), com oscilações em fase entre  $n_1$  e  $n_2$ . Essa semelhança entre os resultados (b) e (c) deixa claro que o comportamento do sistema nesta configuração de energia deve-se principalmente à CAR. O acoplamento assimétrico do sistema aos reservatórios permite o surgimento de uma ligeira diferença entre  $n_1$  e  $n_2$  no caso (c), já que produz valores iniciais diferentes que se propagam ao longo da evolução temporal, ficando mais evidentes na presença de  $\Delta = t_q$ . Quando  $\Gamma_L = \Gamma_R$  os comportamentos observados em (b) e (c) são idênticos.

Figura 33 – Evolução temporal de  $n_1$  e  $n_2$  no sistema DPQ/SC, regime ZB e  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  não-nulos.

Fonte: Autores (2017).

Figura 34 – Evolução temporal de  $I_L$  e  $I_R$  no sistema DPQ/SC, regime ZB e  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  não-nulos.

Fonte: Autores (2017).

Ocupações dos PQs (Fig. 33) e correntes (Fig. 34) em função do tempo, regime ZB. Nas duas figuras os parâmetros utilizados são iguais. Em (a), (b) e (c) as energias são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -1$  enquanto para (d), (e) e (f), fizemos  $\varepsilon_1 = -1$  e  $\varepsilon_2 = +1$ . Os parâmetros de acoplamento são: (A)  $t_q = 2$  e  $\Delta = 0$ ; (B)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$  e (C)  $t_q = \Delta = 2$ . Além disso,  $\Gamma_L = 0,3$  e  $\Gamma_R = 0,5$ .

Para os resultados (d), (e) e (f) da Fig 33, as energias dos PQs são  $\varepsilon_1 = -1$  e  $\varepsilon_2 = +1$ . No regime ZB, estas condições conduzem a uma configuração inicial do sistema próxima de  $|10\rangle$ , condição favorável ao NT. A configuração energética, por sua vez, é propícia à CAR, porque  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$  sempre satisfaz a condição  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 0$ . No gráfico (d), com  $\Delta = 0$ , só podem ocorrer transições via NT. As oscilações invertidas entre  $n_1$  e  $n_2$  também são indicação de tunelamento direto. Os valores estacionários das ocupações, ao contrário dos casos da primeira coluna, são distintos, com  $n_1 \approx 0,8$  e  $n_2 \approx 0,2$ . Por outro lado, no item (e), na presença do parâmetro  $\Delta$ , as curvas  $n_1$  e  $n_2$  apresentam decaimento, sem oscilações expressivas, até valores próximos de 0,5. As curvas são invertidas mas, mesmo assim, não se pode falar em tunelamento direto entre os PQs, pois  $t_q = 0$ . O resultado (f), com  $t_q = \Delta = 2$ , é similar ao resultado (d), confirmando a tendência do sistema pelo NT. Nessa configuração de energia,  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 \neq 0$ , o SC não tem participação nos processos internos de transferência de carga.

Em resumo, os resultados da Fig. 33, para  $n_1$  e  $n_2$ , mostram que o valor inicial das ocupações é o fator que determina qual processo será predominante quando a tensão é nula, a CAR ou NT. Os resultados são semelhantes para  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ .

Por fim, na Fig. 34 analisamos as correntes elétricas correspondentes às ocupações da Fig. 33, nas mesmas configurações. No regime ZB, as correntes  $I_L$  e  $I_R$ , em geral, oscilam em torno de zero. Essa mudança de sinal, como discutimos anteriormente, evidencia a alternância no sentido de deslocamento das cargas pelo sistema. A mudança de sentido acontece na mesma frequência em que acontecem as transições entre os PQs, pois são essas trocas que alteram as populações dos níveis, fator que determina o sentido da corrente. Em ZB, todas as correntes convergem a zero no estado estacionário.

De maneira geral, os resultados da Fig. 34 acompanham os comportamentos observados para a Fig. 33, com oscilações similares nos gráficos (b) e (c) e, da mesma forma, em (d) e (f). Para as correntes, entretanto, *a priori* não é possível fazer uma análise em função das fases entre as oscilações, ou dos valores estacionários (que são todos iguais). A característica mais importante dos gráficos (a), (b) e (c) da Fig. 34 é a inversão de sinal entre as duas correntes, isto é,  $I_L$  e  $I_R$  alternam entre valores positivos e negativos até convergirem a zero. Na configuração  $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 = -1$ , por outro lado, não há alternância de sinal. Com  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$  as correntes  $I_L$  e  $I_R$  são exatamente iguais (com sinais iguais ou opostos).

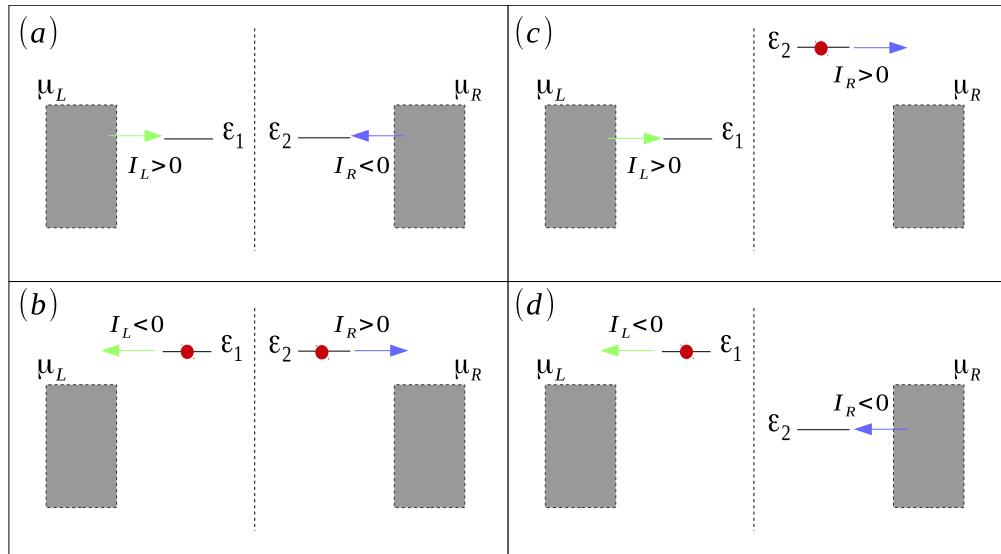
Com o auxílio dos esquemas da Fig. 35 vamos tentar verificar como as correntes no sistema DPQ/SC em ZB assumem os sentidos esperados de acordo com as energias dos PQs. Nos esquemas (a) e (b) representamos o sistema configurado em regime ZB, com as energias  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  iguais e com mesmo sinal. Em (a), as energias são menores que  $\mu_L$  e  $\mu_R$ , representando as situações analisadas nos gráficos (a), (b) e (c) das Figuras 33 e 34. Em (b) as energias são maiores que os potenciais químicos dos reservatórios. Podemos verificar que nesta configuração de energias, as correntes elétricas são invertidas porque ocorre injeção ou remoção de cargas simultaneamente no/do sistema. As ocupações demonstraram que as transições ocorrem via CAR. Assim, quando os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  depopulam via CAR, liberam espaço para a entrada de

novos elétrons no sistema. Quando  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  estiverem preenchidos, podem ser transferidos ao SC por CAR, criando correntes de entrada no sistema. Se ambos os níveis estão vazios, um par de Cooper pode ser separado no SC, populando os dois níveis e, dessa forma, gerando correntes de saída para cada reservatório. Por isso os sinais das correntes são opostos para energias  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ .

Nos esquemas (c) e (d) da Fig. 35 são representadas situações onde as energias dos níveis tem sinais opostos. Como os gráficos (d), (e) e (f) da Fig. 33 mostraram, a transferência de carga entre os PQs se dá por NT. Como consequência, as correntes apresentam sempre sinais iguais. Detalhadamente, podemos dizer que a carga entra no PQ 1 pelo reservatório  $L$ , tunela para o PQ 2 via NT e do PQ 2 sai para o reservatório  $R$ . O contrário é igualmente provável e ocorre diversas vezes durante o transiente em ZB. O esquema (c) demonstra exatamente a configuração adotada nos casos (d), (e) e (f) da Fig. 34, onde observamos correntes  $I_L$  e  $I_R$  com sinais iguais.

Sendo assim, podemos dizer que se as correntes tem sinais opostos, as transições internas ocorrerem por CAR e, se os sinais das correntes forem iguais, as transições prováveis são via NT.

Figura 35 – Sentidos das correntes  $I_L$  e  $I_R$  em tensão zero (ZB), de acordo com as energias dos níveis acoplados a cada reservatório.



Fonte: Autores (2017).

Em cada esquema estão representados os reservatórios  $L$  e  $R$  (por  $\mu_L$  e  $\mu_R$ , respectivamente) e os PQs (pelos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ ). São consideradas quatro configurações de energia: (a)  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 < 0$  (b)  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 > 0$  (c)  $\varepsilon_1 < 0$  e  $\varepsilon_2 > 0$  e (d)  $\varepsilon_1 > 0$  e  $\varepsilon_2 < 0$ . O acoplamento entre PQ 1 e PQ 2 está representado pela linha vertical tracejada. O sentido da corrente  $I_L$  está representado pelas setas verdes, o de  $I_R$  em azul. O ponto vermelho indica que o nível deve estar preenchido para a corrente apresentar o sentido mostrado.

Com isso concluímos a análise dos resultados encontrados para o sistema DPQ/SC.

# 5 Resultados: ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor com aplicação de luz

Neste capítulo são discutidos resultados obtidos para o sistema DPQ/SC/Luz. A descrição detalhada deste sistema foi dada na seção 2.2, do Capítulo 2. Os resultados estão apresentados de acordo com a relação entre o sistema e os reservatórios de carga. Na seção 5.1 os resultados consideram o sistema desacoplado de reservatórios normais. Quando os reservatórios estão presentes, seção 5.2, os resultados estão dispostos de acordo com a tensão bias aplicada. Na subseção 5.2.1 supomos uma tensão alta aplicada ao sistema, ou HB. Na subseção 5.2.2 consideramos que a tensão aplicada é zero, ou ZB.

## 5.1 Caso $\Gamma = 0$ .

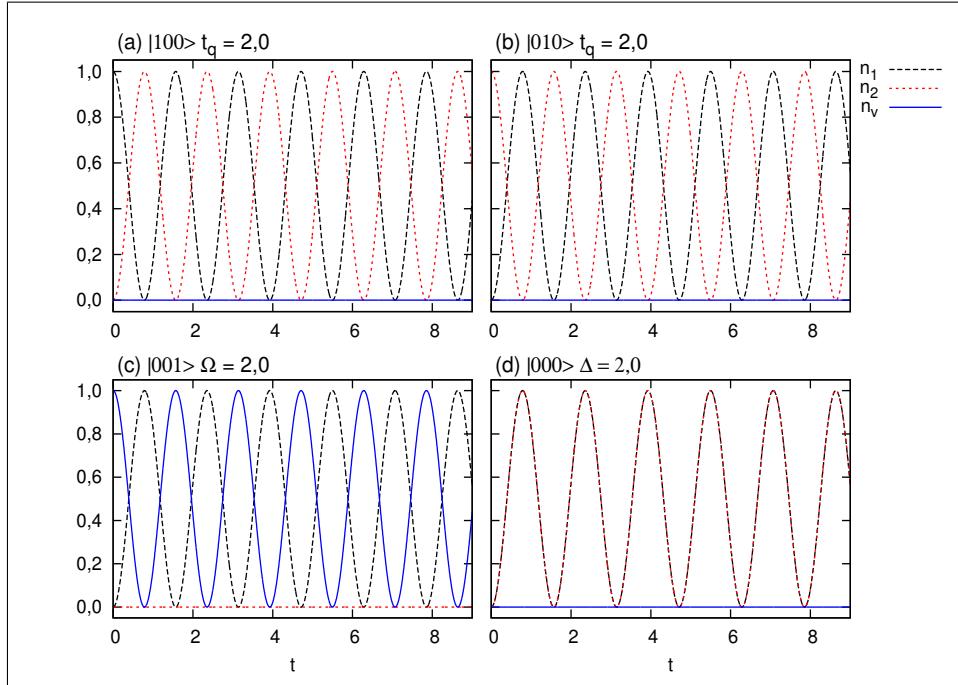
Consideramos, primeiramente, que o acoplamento do sistema DPQ/SC/Luz aos reservatórios é tão fraco que pode ser aproximado como zero. Matematicamente, tomamos  $\Gamma_L = 0$  e  $\Gamma_R = 0$ , de modo que as correntes elétricas são nulas. Nossa estudo fica restrito então à análise da evolução temporal das ocupações  $n_i(t)$  dos níveis eletrônicos.

Como condição inicial do problema, definimos o valor das ocupações de cada nível em  $t = 0$ . Utilizaremos a notação  $|n_1 n_2 n_v\rangle$ , onde  $n_1$ ,  $n_v$  e  $n_2$  são as ocupações dos níveis  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_2$ , nas bandas de condução e valência do PQ 1 e na banda de condução do PQ 2, respectivamente. Em particular, adotaremos os seguintes estados iniciais:  $|000\rangle$ ,  $|100\rangle$ ,  $|010\rangle$  e  $|001\rangle$ .

Os resultados da Fig. 36 consideram cada um desses estados iniciais. Para cada estado, um dos parâmetros de acoplamento interno,  $t_q$ ,  $\Delta$  ou  $\Omega$ , é fundamental para promover o surgimento de oscilações de Rabi entre dois níveis específicos. Algumas das interações vistas são as mesmas observadas para o sistema DPQ/SC no capítulo 4.

Na Fig. 36 (a) e (b) observamos oscilações de Rabi periódicas entre as curvas  $n_1$  e  $n_2$ . Pela fase entre as oscilações ( $\pi$ ), concluímos que a carga inicialmente em  $\varepsilon_1$ , na banda de condução do PQ 1, é transferida para o nível  $\varepsilon_2$ , na banda de condução do PQ 2 (e vice-versa). Aqui temos apenas tunelamento (NT) entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  visto que apenas  $t_q \neq 0$ . As probabilidades de transição são máximas, dada a ressonância entre as energias dos níveis,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ . O nível  $\varepsilon_v$ , na banda de valência do PQ 1, permanece vazio durante todo o período analisado, já que  $\Omega = 0$ . A mudança da configuração inicial apenas é responsável por inverter os valores das curvas de  $n_1$  e  $n_2$  entre os resultados (a) e (b).

Figura 36 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, caso  $\Gamma = 0$ , estados iniciais variados.



Fonte: Autores (2017).

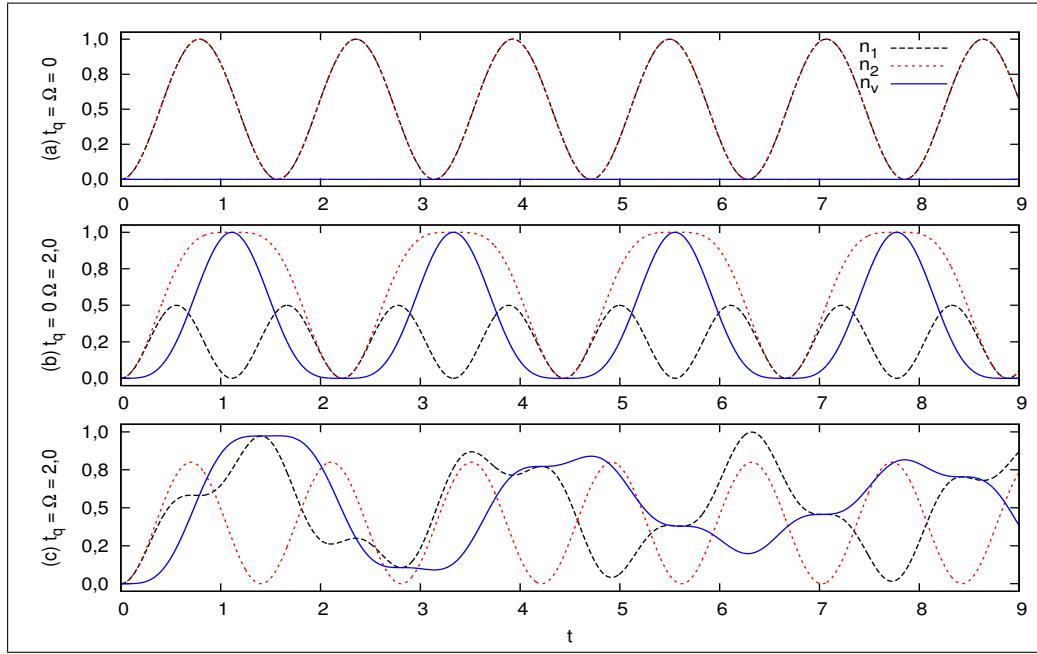
Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  em função de  $t$  no regime  $\Gamma = 0$ . Cada gráfico apresenta diferentes configurações de parâmetros e estados iniciais. No gráfico (a), a configuração inicial do sistema é  $|100\rangle$  e os parâmetros de acoplamento são  $t_q = 2$ ,  $\Delta = 0$  e  $\Omega = 0$ ; (b)  $|010\rangle$  com  $t_q = 2$  e  $\Delta = \Omega = 0$ ; (c)  $|001\rangle$  com  $t_q = \Delta = 0$  e  $\Omega = 2$ ; (d)  $|000\rangle$  com  $t_q = 0$ ,  $\Delta = 2$  e  $\Omega = 0$ . As energias dos níveis são:  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

Na Fig. 36 (c), a configuração inicial é  $|001\rangle$  com um elétron no nível  $\varepsilon_v$ , na banda de valência do PQ 1. Similarmente ao que é observado em (a) e (b), oscilações de Rabi de fase  $\pi$  entre as curvas  $n_1$  e  $n_v$  indicam transferência da carga entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$ . A luz laser incidida continuamente sobre o PQ 1 é responsável pelo acoplamento dos dois níveis, de modo que as transições acontecem através da absorção ou emissão de fótons (*OE, de optical excitation*). A amplitude da oscilação é máxima quando a frequência do laser estiver em ressonância com a frequência associada ao gap do PQ 1, isto é, é  $\omega = (\varepsilon_1 - \varepsilon_v)/\hbar$ .

Na Fig. 36 (d) temos  $\Delta \neq 0$  e  $t_q = \Omega = 0$ . As oscilações entre  $n_1$  e  $n_2$  estão em fase e são devidas à CAR. De fato, este é o processo esperado quando o único acoplamento ativo é  $\Delta$  e as ocupações dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  são iguais - que é o caso para  $|000\rangle$ . Um par de Cooper no nível  $\varepsilon_{sc} = 0$  no SC se separa (*splitting*) com cada carga sendo transferida a um dos níveis de condução. Somadas, as energias desses níveis devem ser zero para garantir probabilidade máxima na transição via CAR, o que é observado na amplitude máxima de oscilação no gráfico (c). A frequência das oscilações depende diretamente dos parâmetros de acoplamento entre os níveis (ver equação (4.2)). Como  $t_q$ ,  $\Omega$  e  $\Delta$  tem a mesma intensidade, as frequências de oscilação são as mesmas para todas as curvas não-nulas da Fig. 36.

Na Fig. 37 investigamos diferentes combinações dos parâmetros de acoplamento para um dado estado inicial. O estado inicial considerado é  $|000\rangle$  e o parâmetro  $\Delta$  fixado em  $\Delta = 2$ .

Figura 37 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, caso  $\Gamma = 0$ , com  $|000\rangle$  e  $\Delta = 2$ , variação de  $t_q$  e  $\Omega$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$ , como função do tempo em regime  $\Gamma = 0$ . Em todos os casos, o estado inicial é  $|000\rangle$  e o acoplamento entre  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  e o SC é fixo em  $\Delta = 2$ .  $t_q$  e  $\Omega$  são: (a)  $t_q = \Omega = 0$ ; (b)  $t_q = 0$  e  $\Omega = 2$ ; (c)  $t_q = \Omega = 2$ . A energia dos níveis são:  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

Sabemos, pela análise da Fig. 36 (d), que a combinação de estado inicial  $|000\rangle$  e de parâmetro  $\Delta$  não-nulo promove ocupação dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  via CAR. Essa situação está representada novamente, na Fig. 37 (a), para a qual os parâmetros  $t_q$  e  $\Omega$  são nulos. Colocando em termos da representação de muitos corpos, o sistema oscila entre o estado  $|000\rangle$  e o estado  $|110\rangle$ .

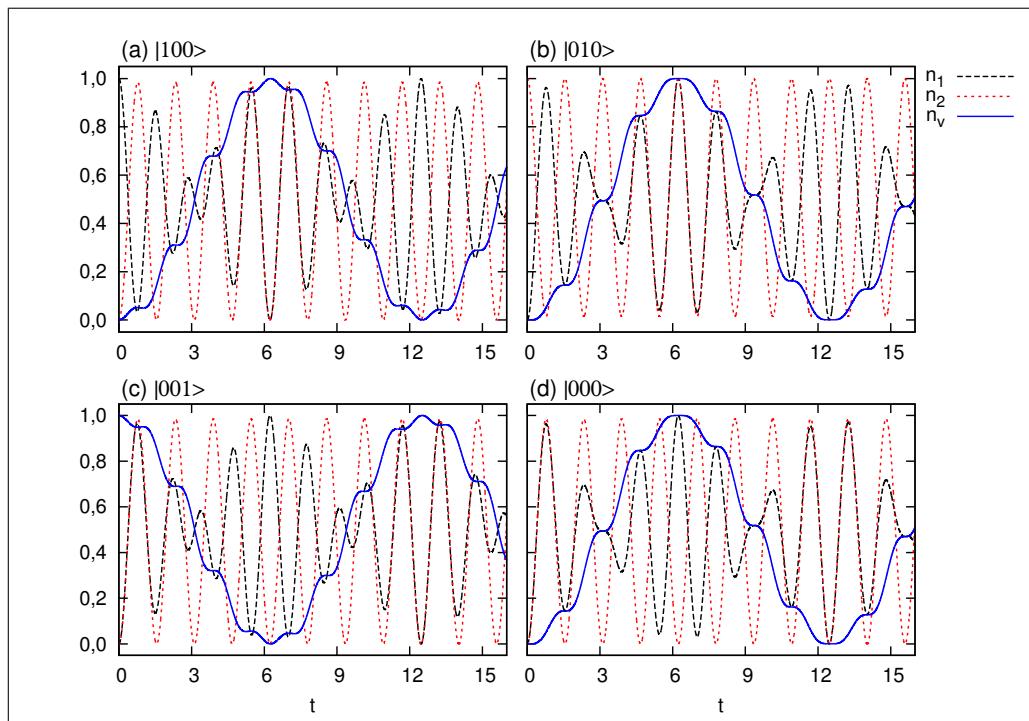
Na Fig. 37 (b) fazemos  $\Omega \neq 0$ , o que torna possível a troca de carga entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  no PQ 1, a OE. No entanto, a ocorrência dessa transição depende da presença de um elétron em um destes níveis (1 ou v). Por esse motivo, observamos primeiramente o aumento simultâneo de  $n_1$  e  $n_2$ , indicando CAR. Próximo a  $t = 1$ ,  $n_2$  atinge um platô em 1, sugerindo que a carga fica presa em  $\varepsilon_2$  por certo intervalo de tempo. Durante a formação do platô em  $n_2$ ,  $n_1$  é zero e  $n_v$  atinge o máximo em 1, devido a OE.

Na Fig. 37 (c), todos os acoplamentos internos estão presentes de modo que  $t_q = \Delta = \Omega = 2$ . A dinâmica é claramente mais complexa que nos casos anteriores, mas alguns pontos podem ser destacados. Tal como no caso (b), só percebemos atividade de  $n_v$  após  $n_1$  e  $n_2$  atingirem valores próximos de 50%. Porém, diferente do que acontecia em (b), o acoplamento direto ( $t_q = 2$ ) modifica as ocupações dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , não permitindo o surgimento do platô em  $n_2$ : ao invés de “aprisionada” em  $\varepsilon_2$ , a carga pode ser transferida para  $\varepsilon_1$ , por NT. Na sequência,

os processos evoluem de forma tão intrincada, que não foi possível observar um tempo  $t$  para o qual o sistema retorne ao estado inicial  $|000\rangle$ , mesmo quando a figura é estendida para tempos mais longos. Entretanto, essa mesma combinação de fenômenos de transição mantém  $n_2$  com período e amplitude máxima constantes.

As figuras 36 e 37 demonstraram as relações básicas entre os parâmetros de acoplamento, os estados iniciais e os fenômenos de transferência de carga no sistema. De diversas análises semelhantes que ainda poderiam ser feitas para o sistema isolado ( $\Gamma = 0$ ), escolhemos discutir os resultados da Fig. 38. Os parâmetros são  $\Omega = 0,5$ ,  $t_q = \Delta = 2$  e diversos estados iniciais.

Figura 38 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, caso  $\Gamma = 0$ , com  $t_q = \Delta = 2$ ,  $\Omega = 0,5$  e variação da configuração inicial.



Fonte: Autores (2017).

Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  como função do tempo com  $\Gamma = 0$ . A energia dos níveis é fixa em  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ . Em todos os casos,  $t_q = \Delta = 2$  e  $\Omega = 0,5$ . Os estados iniciais são (a)  $|100\rangle$  (b)  $|010\rangle$  (c)  $|001\rangle$  e (d)  $|000\rangle$ .

Duas frequências de oscilação são identificadas para as curvas  $n_1$  na Fig. 38: uma rápida, com frequência próxima a frequência de oscilação de  $n_2$ , e uma oscilação mais lenta, marcada pela evolução de  $n_v$  (mínimos e/ou máximos da curva azul/contínua marcando os ciclos da curva preta/tracejada). Com isso temos  $n_1$  formando um padrão de oscilações característico conhecido como *batimentos*<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Os batimentos são formados pela superposição de duas oscilações com frequências próximas,  $f_A$  e  $f_B$ , tal que sua frequência é dada por  $f_b = |f_A - f_B|$ .  $n_2$ , por exemplo, tem período de oscilação  $T_2 \approx 1,57 t_0$  (onde  $t_0$  é a unidade de tempo), sendo sua frequência  $f_2 = 1/T_2 = 0,64 f_0$  (unidade de frequência,  $f_0 = 1/t_0$ ).  $n_v$ , por sua vez, é composto por duas oscilações: uma mais rápida da ordem de  $n_2$ , de frequência  $f_{vr}$ , e outra mais

De acordo com o estado inicial, a CAR ou o NT iniciam a dinâmica de cargas no sistema. No caso (a), por exemplo, as primeiras oscilações entre  $n_1$  e  $n_2$  tem fase  $\pi$ , indicando NT. O mesmo pode ser observado no gráfico (b). Em (c), a fase entre as oscilações inicialmente é zero, o que implica CAR. Situação que observamos também para o gráfico (d). Nos quatro casos, entretanto, quando  $n_1$  e  $n_v$  atingem valores próximos a 0,5 (em torno de  $t = 3,0$ ), ocorre a inversão dos processos de espalhamento. As oscilações que exibiam fase zero passam a ter fase  $\pi$ , indicando inversão da CAR para o NT, e vice-versa.

Entendemos que esta inversão de processos de transferência é guiada pelo acoplamento óptico. O parâmetro  $\Omega$ , que acopla  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$ , é pequeno em relação a  $t_q$  e  $\Delta$ , de modo que não consegue inibir a CAR ou o NT entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , mas consegue alterar a ocupação do nível  $\varepsilon_1$  suficientemente para gerar a troca entre os processos.

Cabe notar novamente  $n_2$ , com frequências e amplitudes de oscilação idênticas em todos os casos da Fig. 38. Isso acontece porque os dois processos responsáveis por popular o nível  $\varepsilon_2$  acontecem intercaladamente, e não simultaneamente, com probabilidades iguais (graças a  $t_q = \Delta$ ). O balanço ideal entre os dois processos, promovido pela ação lenta do acoplamento óptico com o nível  $\varepsilon_v$ , não permite que os valores máximos ou mínimos de  $n_2$  sejam alterados.

## 5.2 Casos com $\Gamma \neq 0$

Para obter as correntes elétricas no sistema DPQ/SC/Luz vamos considerá-lo acoplado a dois reservatórios fermiônicos não-interagentes. O acoplamento é descrito esquematicamente na Fig. 20: o reservatório  $L$  se acopla ao nível  $\varepsilon_v$  no PQ 1, enquanto  $R$  se acopla à  $\varepsilon_2$ , no PQ 2. As taxas<sup>2</sup> de transferência de carga entre reservatórios e PQs são  $\Gamma_L$  e  $\Gamma_R$  para *Left* e *Right*, respectivamente. Os resultados estão divididos em duas subseções: 5.2.1, para resultados onde a bias aplicada ao sistema é alta (HB) e 5.2.2, para quando é zero (ZB).

### 5.2.1 Tensão alta

Para uma situação de tensão alta ou HB, tomamos o potencial químico de  $L$  como muito maior que o potencial químico de  $R$ , isto é:  $\mu_L \gg 0$  e  $\mu_R \ll 0$ . Nesse regime de tensão a configuração inicial do sistema será  $|001\rangle$ <sup>3</sup>.

lenta,  $f_{vl}$ , que forma uma espécie de envelope em torno de  $n_1$ . O período da oscilação mais lenta é  $T_l = 12,5 t_0$  e, como consequência,  $f_{vl} \approx 0,08 f_0$ . Esse valor está bem distante de  $f_2$ , indicando que os batimentos são formados em  $n_1$  pela superposição da frequência  $f_2$  (de  $n_2$ ) com a frequência mais rápida de  $n_v$ . Estimamos  $f_{vr} = 1/2,05 = 0,49 f_0$  e, subtraindo  $f_2$  e  $f_{vr}$ , obtemos  $f_b = 0,150 f_0$ . A partir do gráfico também extraímos o período dos batimentos  $T_b \approx 6,28 t_0$  e a frequência obtida nessa estimativa será  $f_b = 1/T_b = 0,159 f_0$ , valor que tem boa concordância com aquele obtido a partir de  $|f_2 - f_{vr}|$ .

<sup>2</sup> Algumas vezes utilizamos “acoplamento” como sinônimo de “taxa”, para nos referirmos a  $\Gamma_\alpha$ . Esses termos estão relacionados já que:  $\Gamma_\alpha = 2\pi\rho_\alpha|V_\alpha|^2$ , sendo  $V_\alpha$ , de fato, o parâmetro de acoplamento entre nível e reservatório.

<sup>3</sup> Essa escolha não é aleatória. Supondo que o acoplamento entre nível e reservatório acontece adiabaticamente, durante um tempo suficientemente longo, (de  $-\infty$  a  $t = 0$ , por exemplo), o nível  $\varepsilon_v$ , com energia muito menor que  $\mu_L$ , estará preenchido ao final desse processo. Antes de  $t = 0$ ,  $\varepsilon_1$  não está acoplado a nenhuma fonte, por

Na Fig. 39 são apresentadas ocupações dos níveis em função do tempo para  $\Omega = 0,5$ , com diferentes valores dos acoplamentos  $t_q$  e  $\Delta$  e considerando também  $R \Gamma_R = 0$ .

Na Fig. 39 (a),  $t_q$  e  $\Delta$  são nulos, o que significa que não há interação entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . Como a transferência de carga entre  $R$  e  $\varepsilon_2$  também está suprimida,  $n_2$  é constante em zero.  $n_1$  e  $n_v$  oscilam invertidas, com frequência proporcional a  $\Omega$ . Como demonstrado nos resultados da seção 5.1, esse perfil de oscilações de Rabi indica troca de carga entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$ , via OE. Diferente dos resultados para  $\Gamma = 0$ , a amplitude das oscilações diminui devido ao acoplamento do sistema ao reservatório. Para tempos longos,  $n_1$  e  $n_v$  tendem para 1. Analisando linearmente a sequência de eventos temos: carga inicialmente em  $\varepsilon_v$  é transferida para  $\varepsilon_1$  por OE; o nível  $\varepsilon_v$  fica vazio e o reservatório  $L$  pode injetar uma nova carga no sistema; a nova carga impede que  $\varepsilon_1$  seja desocupado, ao mesmo tempo que impede entrada de novas cargas pelo reservatório; os processos se encerrem com o sistema no estado  $|101\rangle$ .

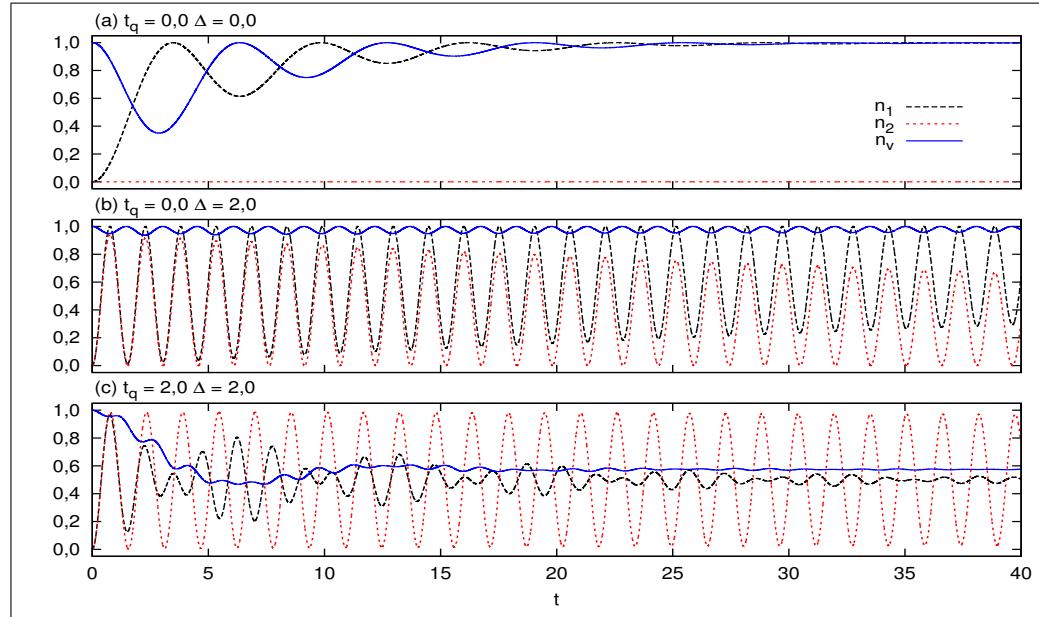
Na Fig. 39 (b) temos  $\Delta = 2$ . A fase entre as oscilações de  $n_1$  e  $n_2$  nos permite afirmar que os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  são populados inicialmente por CAR. Com  $\Delta$  suficientemente maior que  $\Omega$ , o acoplamento forte de  $\varepsilon_1$  com o SC faz com que a probabilidade de OE entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  seja pequena em relação à CAR. Por isso  $n_v$  apresenta uma oscilação curta, próxima de 1 (ocupação inicial deste nível). Para  $n_1$  e  $n_2$ , a amplitude das oscilações só diminui significativamente para tempos longos, em comparação com o caso (a). Percebemos que o reservatório  $L$  está lentamente provocando a queda dessas amplitudes, mesmo acoplado indiretamente aos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . Curiosamente, apesar de  $\varepsilon_v$  se acoplar diretamente a  $L$ , a amplitude da oscilação de  $n_v$  praticamente não diminui no período observado<sup>4</sup>.

Na Fig. 39 (c) os parâmetros são  $t_q = \Delta = 2$ . Mesmo com a queda na amplitude, em  $n_1$  ainda é possível reconhecer o perfil de batimentos observados na Fig. 38(c). No entanto, para este caso é mais difícil perceber a influência de  $n_v$  sobre o comportamento de  $n_1$ . Ao contrário do caso (b), as curvas de  $n_1$  e  $n_2$  continuam oscilando enquanto  $n_v$  já atingiu o estado estacionário. Esse comportamento indica que das três configurações, apenas nesta a perda de coerência é mais rápida para  $\varepsilon_v$  que para os outros níveis. A inversão dos processos de CAR e NT ainda pode ser reconhecida, através da mudança na fase entre as oscilações das curvas  $n_1$  e  $n_2$ . Como o estado inicial do sistema é  $|001\rangle$ , o primeiro processo é a CAR. Próximo a  $t = 5$  as oscilações passam a ser invertidas, indicando NT. O fator de maior destaque neste resultado é a duração das oscilações  $n_2$ : mesmo com um tempo de observação estendido, a queda na amplitude é quase imperceptível.

Tomamos o sistema com as mesmas configurações da Fig. 39 mas fazendo  $\Gamma_R \neq 0$  obtemos os resultados da Fig. 40.

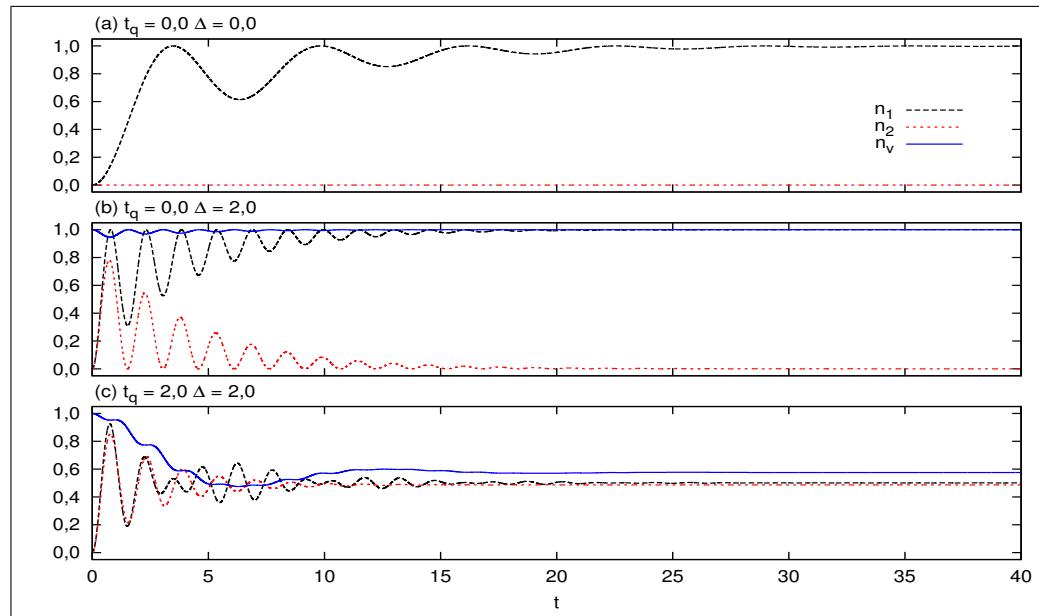
isso  $n_1(0) = 0$ . Já  $\varepsilon_2$  tem energias muito maiores que  $\mu_R$ . Como os tunelamentos são elásticos,  $R$  não pode popular  $\varepsilon_2$ . Combinando as análises para cada nível, teremos  $|001\rangle$ .

<sup>4</sup> Os valores estacionários esperados são:  $n_1 \approx 1$ ,  $n_2 \approx 0$  e  $n_v \approx 1$ . Como na Fig. 39 (b) o único meio de popular o nível  $\varepsilon_2$  é através do SC, à medida que a decoerência é introduzida a probabilidade de CAR diminui, fazendo com a ocupação  $n_2$  eventualmente seja nula. Como o reservatório  $L$  introduz novas cargas no nível de valência  $\varepsilon_v$  e o laser permanece ligado, a tendência é que as ocupações  $n_1$  e  $n_v$  no regime estacionário indiquem que os níveis do PQ 1 estarão ambos ocupados

Figura 39 – Evolução temporal de  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  para DPQ/SC/Luz em HB com  $\Gamma_R = 0$  e  $\Omega = 0,5$ .

Fonte: Autores (2017).

Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$ , como função do tempo em regime HB, com  $\Gamma_R = 0$ . Em todos os casos,  $\Omega = 0,5$  e o estado inicial é  $|001\rangle$ . Os acoplamentos são: (a)  $t_q = \Delta = 0$ , (b)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$  e (c)  $t_q = \Delta = 2$ . A energia dos níveis é fixa em  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

Figura 40 – Evolução temporal de  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  para DPQ/SC/Luz em HB com  $\Gamma_R \neq 0$  e  $\Omega = 0,5$ .

Fonte: Autores (2017).

Comparação com a Fig. 39. Mesmas configurações exceto por  $\Gamma_R = 0,5$ .

Comparando o gráfico (a) das Fig. 39 e Fig. 40, vemos que esta última não sofreu alterações, pois os parâmetros utilizados são os mesmos da primeira. Com  $t_q$  e  $\Delta$  nulos, não existe um canal pelo qual as cargas possam passar do PQ 1 para o PQ 2. Dessa forma, a ausência, ou a presença, do reservatório  $R$  acoplado ao PQ 2 não altera as ocupações de  $n_1$  e  $n_v$ , no PQ 1.

Comparando também os gráficos (b) e (c) entre a Fig. 39 e a Fig. 40, vemos que a principal diferença está na duração das oscilações de  $n_2$ . Na Fig. 39 (b) e (c), as oscilações em  $n_2$  se estendiam após tempos tão longos quanto  $t = 40 t_0$ . Na Fig. 40, no entanto, as oscilações cessam em torno de  $t = 15t_0$ , devido à decoerência introduzida pela presença do reservatório  $R$ . No caso (b),  $\Delta = 2$  e  $t_q = 0$ , o nível  $\varepsilon_2$  interage com  $\varepsilon_1$  através do SC. Inicialmente, ambos estão vazios e são populados por CAR. No entanto, na presença do reservatório  $R$ ,  $\varepsilon_2$  é esvaziado.  $\varepsilon_1$ , por outro lado tem ocupação  $n_1 = 1$ . Como a ocupação de ambos é diferente, CAR fica impedida. Com  $n_1 = 1$ , OE entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  também fica impedida. Por isso, no regime estacionário, o sistema configurado na Fig. 40 (b) se encontrará no estado  $|101\rangle$ .

Como dissemos anteriormente, a perda de coerência nos resultados da Fig. 40 (c) é drástica em relação ao caso análogo da Fig. 39. Além disso, destacamos os valores estacionários em relação ao caso (b). Ao invés de 1 ou 0, as três curvas se tornam constantes em valores próximos de 0,5. Essa mudança é consequência da presença de  $t_q$ , que não permite que a carga se acumule no nível  $\varepsilon_1$ , sendo possível sua transferência a  $\varepsilon_2$  por NT. Com isso, novos processos de OE e CAR estarão sempre ocorrendo, fazendo as ocupações se estabilizarem em 0,5.

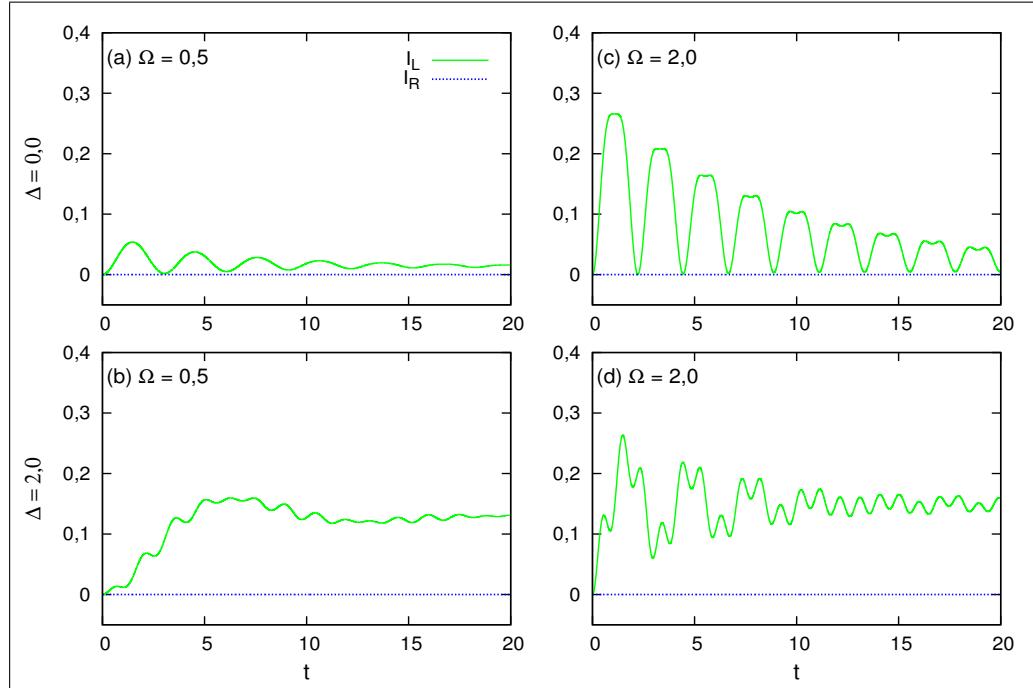
Analisamos também as correntes elétricas no sistema para o regime HB. Os gráficos da Fig. 41 mostram as correntes  $I_L$  e  $I_R$  em função do tempo no sistema. Variamos os acoplamentos  $\Delta$  e  $\Omega$  com  $t_q$  fixo. Além disso,  $\Gamma_R = 0$ .

Como esperado, em todos os gráficos da Fig. 41 temos  $I_R = 0$ , devido a  $\Gamma_R = 0$ . Além disso, observamos que a corrente  $I_L$  é positiva em todos os casos. O sinal positivo foi padronizado como fluxo real de elétrons da esquerda para a direita.  $I_L$  positiva indica, dessa forma, que os elétrons estão entrando no sistema através do reservatório  $L$ .

Na Fig. 41 (a)-(b) o acoplamento  $\Omega$  é fixo igual a 0,5, enquanto o parâmetro  $\Delta$  é alterado de 0 em (a) para 2 em (b). Poderíamos dizer também que no caso (a) o sistema não pode sofrer transições via CAR enquanto em (b) elas são possíveis. Essa alteração no parâmetro  $\Delta$  provoca mudanças tanto na forma, quanto nos valores da corrente  $I_L$ , entre o reservatório  $L$  e o nível  $\varepsilon_v$ . Na Fig. 41 (a) observamos uma oscilação uniforme, com um período de oscilação bem definido, cujo amortecimento conduz  $I_L$  para valores próximos de zero. Em (b) observamos uma curva disforme, onde não distinguimos com clareza uma frequência de oscilação única, ou mesmo um perfil como o dos batimentos observados na Fig. 38 (c). Além disso, o valor estacionário de  $I_L$  aparenta ser entre 0,1 e 0,2  $I_0$ . O valor não-nulo demonstra que a injeção de cargas no sistema através de  $L$  é contínua.

Se analisarmos agora as mudanças em  $I_L$  da Fig. 41 (a) para 41 (c), onde alteramos o valor de  $\Omega$ , com  $\Delta = 0$ , encontramos um padrão de oscilações ainda mais distinto. Na Fig. 41 (c), as oscilações com formação de platôs em  $I_L$ , se assemelham a trens de pulsos quadrados,

Figura 41 – Evolução temporal das correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regime HB, com  $\Gamma_R = 0$  e  $\Omega$  e  $\Delta$  variáveis.



Fonte: Autores (2017).

Correntes  $I_L$  e  $I_R$  em função do tempo em regime HB.  $\Delta = 0$  nos gráficos (a) e (c) e  $\Delta = 2$  em (b) e (d). O valor de  $\Omega$  está indicado em cada gráfico. Em todos os casos  $t_q = 2$ ,  $\Gamma_R = 0$  e as energias dos níveis são  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

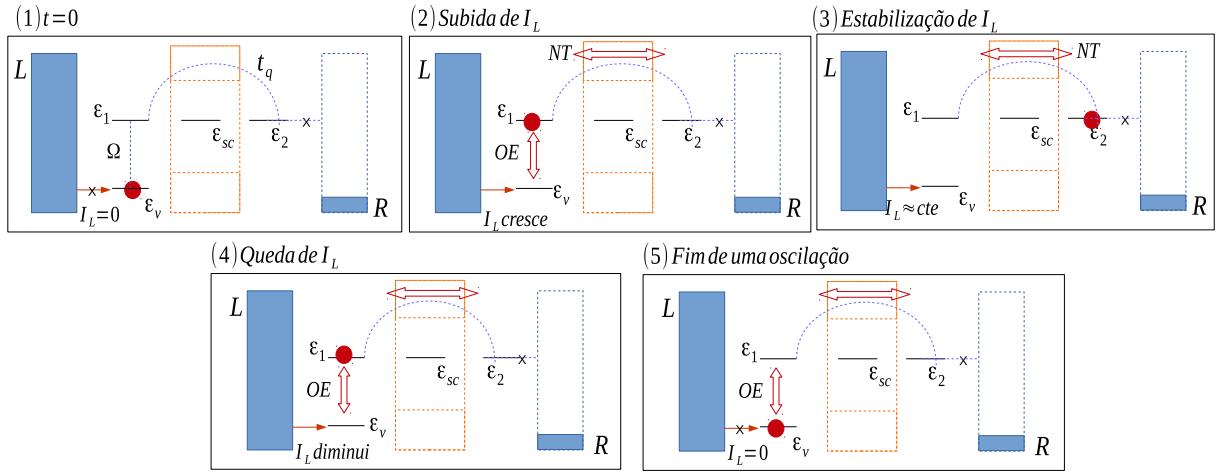
encontrados em diversas situações na eletrônica convencional. A formação destes platôs pode ser compreendida utilizando o esquema da Fig. 42.

Em  $t = 0$ , situação (1),  $I_L$  é nula porque a configuração inicial do sistema, com um elétron na banda de valência do PQ 1 não permite a entrada de outras cargas no nível. Via OE o nível  $\varepsilon_1$  é populado, deixando  $\varepsilon_v$  vazio - situação representada em (2). Por isso  $I_L$  cresce, indicando aumento da probabilidade de injeção de carga no sistema. A situação (3) mostra a transferência da carga de  $\varepsilon_1$  para  $\varepsilon_2$ , via NT. Durante este processo,  $I_L$  atinge o valor máximo. Enquanto uma segunda transição por NT traz a carga de volta a  $\varepsilon_1$ , a corrente permanece constante, formando o primeiro platô em 41 (c). Quando a carga em  $\varepsilon_1$  começa a ser transferida de volta a  $\varepsilon_v$ , por OE (4),  $I_L$  diminui até que a transição se completa - situação (5) - e a corrente será nula novamente.

É de suma importância que as transições de OE e NT sejam mais rápidas que o tunelamento entre  $L$  e  $\varepsilon_v$  para que este padrão de oscilações seja obtido. Essa diferença permite que as transições ocorram várias vezes antes que o reservatório consiga efetivamente inserir novas cargas no sistema. Os gráficos de ocupação obtidos (não mostrados) para esta configuração mostram que todos os níveis estarão ocupados no estado estacionário, o que explica  $I_L \rightarrow 0$  para tempos longos.

Analizando, por fim, o resultado (d) da Fig. 41, para o qual todos os acoplamentos estão

Figura 42 – Esquema detalhando a formação de platôs na evolução temporal da corrente  $I_L$  no sistema DPQ/SC/Luz na Fig. 41.



Fonte: Autores (2017).

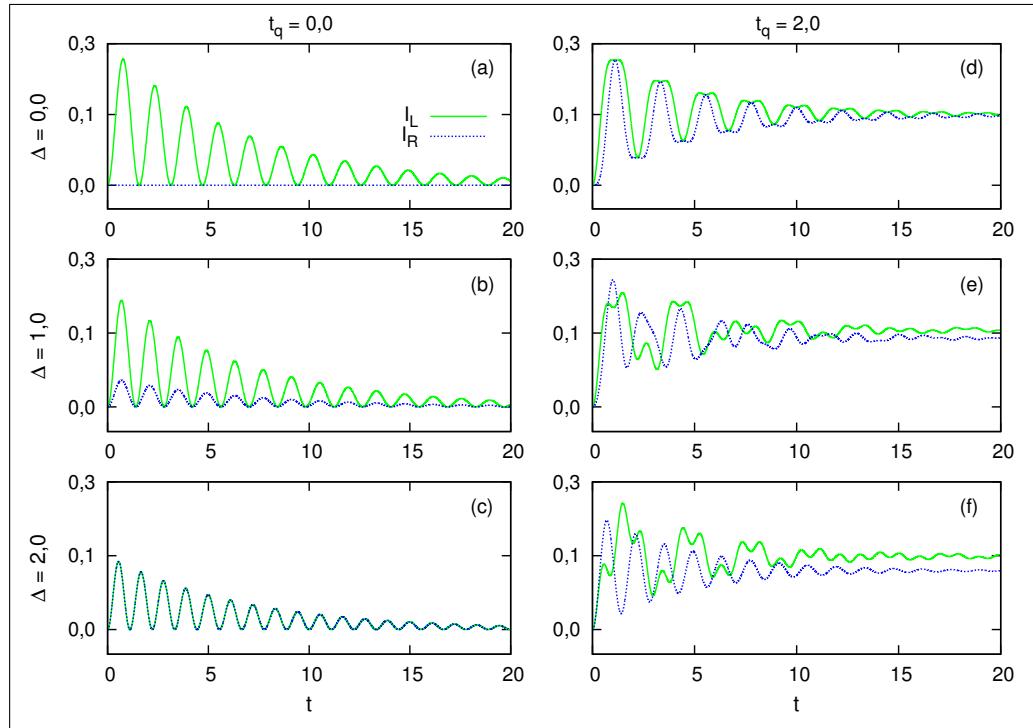
Esquema demonstrando como se formam platôs na corrente  $I_L$  no DPQ/SC/Luz em regime HB quando  $\Gamma_R = 0$  (resultado da Fig. 41 (c)). (1) Em  $t = 0$  o sistema se encontra no estado  $|100\rangle$ . Os parâmetros  $t_q$  e  $\Omega$  são iguais, indicando que os processos de OE e NT devem ter a mesma duração. O SC está desacoplado,  $\Delta = 0$ . (2) OE causa aumento de  $I_L$  por despopular o nível  $\varepsilon_v$ . (3) A carga transita entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  via NT. Durante esse processo  $I_L$  atinge o valor máximo e um platô se forma, devido à duração do mesmo. Quando esse processo se completa e  $\varepsilon_1$  é ocupado novamente,  $I_L$  começa a diminuir (4). Ela chega a zero novamente quando  $n_v = 1$  em (5).

presentes,  $I_L$  oscila com mais de uma frequência, o que sugere alternância entre os processos de transferência de carga (NT e CAR), como concluímos das ocupações na Fig. 38. Note que o pico máximo de  $I_L$  em (d) tem um valor muito próximo do primeiro platô em (c). Isso porque a corrente  $I_L$  é determinada inicialmente pela ocupação do nível  $\varepsilon_v$ . Como  $\Omega$  é o mesmo nos dois casos (e igual aos demais parâmetros, nunca menor), o mínimo de ocupação do nível  $\varepsilon_v$  é praticamente o mesmo nos dois casos, gerando o mesmo valor máximo na corrente de entrada ( $I_L$  positiva). Tal como no caso (b), o valor estacionário de  $I_L$  não é nulo devido ao processo de CAR retirar cargas do sistema para o SC e com isso alimentar a entrada de cargas através de  $L$ .

Agora permitiremos a saída de carga para o reservatório  $R$  fazendo  $\Gamma_R \neq 0$ . Comparamos as situações em que  $t_q = 0$  e  $t_q = 2$ . Os resultados estão apresentados na Fig. 43, para a qual  $\Omega = 2$  e  $\Delta$  é variável.

Na Fig. 43 (a) a corrente  $I_R$  nula evidencia o regime de tensão alta. O potencial químico  $\mu_R$  é muito menor que a energia do nível  $\varepsilon_2$  e por isso não é possível haver corrente  $I_R$  negativa, que indicaria a entrada de carga no sistema através do reservatório  $R$ . Por outro lado, com  $t_q = \Delta = 0$ , também não é possível popular o nível  $\varepsilon_2$  por NT ou CAR. Fica claro porque observamos oscilações apenas para  $I_L$ : transferência de carga entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  via OE. No caso (b), com  $\Delta \neq 0$ , a amplitude de oscilação de  $I_L$  diminui devido à ocorrência de CAR entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . O processo de CAR popula os níveis  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_1$  parcialmente, reduzindo a probabilidade de OE entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$ . Consequentemente,  $I_L$  tende a diminuir. Além disso, como  $\varepsilon_2$  é populado

Figura 43 – Evolução temporal das correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regime HB, comparação  $t_q = 0$  e  $t_q = 2$ , com variação de  $\Delta$ .



Fonte: Autores (2017).

Correntes  $I_L$  e  $I_R$  em função do tempo para o regime HB. Os gráficos da coluna da esquerda ((a), (b) e (c)) consideram  $t_q = 0$  enquanto os da coluna da direita ((d), (e) e (f)), tomam  $t_q = 2$ .  $\Delta$  é: 0 em (a) e (d), 1 em (b) e (e) e 2 em (c) e (f). O acoplamento com os reservatórios é tal que com  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ . Outros parâmetros relevantes são  $\Omega = 2$ ,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

por CAR surge uma corrente positiva  $I_R$ .  $I_R$  é menor que  $I_L$  porque  $\Omega > \Delta$ , fazendo a OE ser mais rápida que a CAR e permitindo uma ocupação desigual de  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_v$ . Em (c), com  $\Delta = \Omega$ , as probabilidades de OE e CAR são iguais. Como os fenômenos agora ocorrem com a mesma taxa, ocorrem durante o mesmo intervalo de tempo, limitados pela ocupação máxima de  $\varepsilon_1$  (que tem probabilidade de ser populado igualmente pelos dois fenômenos). Todos esses fatores, mais a igualdade entre  $\Gamma_L$  e  $\Gamma_R$ , culminam com a igualdade entre as correntes  $I_L$  e  $I_R$ . De acordo com a convenção de sinais que estabelecemos,  $R$  retira do sistema a mesma quantidade de carga que é injetada por  $L$ , em um mesmo intervalo de tempo. Note que nos casos (a)-(c), com  $t_q = 0$ , a ausência de NT acaba permitindo acumulo de carga no nível  $\varepsilon_1$ , eventualmente bloqueando a ocorrência de OE e CAR e conduzindo os valores das correntes para zero no estado estacionário.

Sendo assim, nos gráficos da coluna da direita na Fig. 43, para os quais  $t_q \neq 0$ , a ocorrência de NT provoca continuamente a redistribuição das cargas entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , permitindo novas trocas por OE e CAR. Isso resulta em valores estacionários de  $I_L$  e  $I_R$  não-nulos, indicando que a passagem de cargas através do sistema não é interrompida. No caso (d) temos  $\Delta = 0$ , portanto não ocorre CAR. Vemos que  $I_R$  sai de zero alguns instantes depois de  $I_L$ . Esse atraso se dá

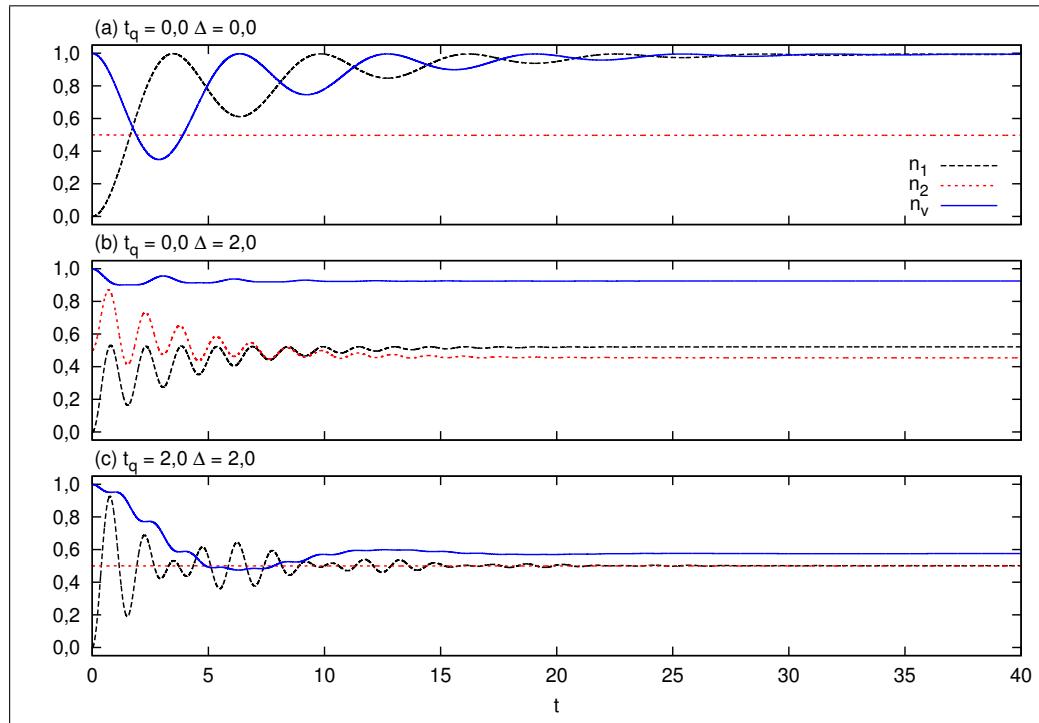
porque o nível  $\varepsilon_2$  só é populado, via NT, depois que  $\varepsilon_1$  for populado por OE. A partir daí temos um comportamento semelhante ao da Fig. 41, com formação de platôs em  $I_L$ , mas que, por  $\Gamma_R \neq 0$  conta com uma corrente  $I_R$  diferente de zero. Conforme  $\Delta$  aumenta (gráficos (e) e (f)), a ocorrência de CAR intercalada ao NT e ao OE, se reflete em padrões de oscilações mais complexos das correntes elétricas. A junção dos três fenômenos com probabilidades iguais em (f) ( $t_q = \Delta = \Omega = 2$ ), por outro lado, provoca separação dos valores estacionários das correntes, mesmo numa situação em que os acoplamentos com os reservatórios são iguais. O fato de  $I_L > I_R$  indica fuga de corrente para o SC.

### 5.2.2 Tensão zero

São apresentados nesta subseção os resultados para o sistema DPQ/SC/Luz submetido a tensão zero - ZB, com  $\mu_L = \mu_R = 0$ .

Na Fig. 44 são mostradas as evoluções temporais das ocupações do sistema em regime ZB, em uma configuração idêntica a da Fig. 40, isto é,  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  e  $\Omega = 0,5$ . A legenda descreve os valores de  $t_q$  e  $\Delta$  em cada gráfico da Fig. 44.

Figura 44 – Evolução temporal das ocupações no sistema DPQ/SC/Luz, regime ZB, com  $\Gamma_L \neq \Gamma_R$  e  $\Omega = 0,5$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$ , como função do tempo em regime ZB. Em todos os casos,  $\Omega = 0,5$  e o estado inicial é  $|001\rangle$ . Os acoplamentos são: (a)  $t_q = \Delta = 0$ , (b)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$  e (c)  $t_q = \Delta = 2$ . A energia dos níveis é fixa em  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

Na Fig. 44 a ocupação inicial do nível  $\varepsilon_v$ , na valência do PQ 1 é 1. O fato de o potencial químico do reservatório  $L$  ter sido reduzido de  $\mu_L \rightarrow +\infty$ , em HB, para  $\mu_L = 0$  em ZB, não afeta a ocupação esperada para este nível isolado. Isso porque a energia do nível  $\varepsilon_v = -50$  ainda é muito menor que zero.  $n_2(0)$ , por outro lado, é 0,5 em todos os casos, já que este nível ( $\varepsilon_2 = 0$ ) está em ressonância com  $\mu_R = 0$ .  $n_1(0) = 0$ , arbitrariamente, já que  $\varepsilon_1$  não está acoplado diretamente a nenhum reservatório comum.

Especificamente, no caso (a),  $t_q = \Delta = 0$ , a ocupação inicial de  $\varepsilon_2$  não modifica o comportamento de  $n_1$  e  $n_v$  em relação à Fig. 40 (a). A oscilação de Rabi vista no gráfico, descreve a troca de cargas entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$ , conduzida opticamente através de  $\Omega$ . Sua duração é determinada por  $\Gamma_L$ . Mesmo na presença do reservatório  $R$ ,  $n_2$  é uma reta constante em 0,5. Como o nível  $\varepsilon_2$  não está acoplado a nenhum outro nível, sua ocupação inicial permanece inalterada.

Na Fig. 44 (b),  $\Delta > \Omega$  e por isso observamos oscilações características da CAR (fase 0) entre  $n_1$  e  $n_2$ , com amplitude maior do que as oscilações entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$ , via OE. Mesmo com uma pequena amplitude, é possível identificar que  $n_v$  diminui apenas quando  $n_1$  aumenta, caracterizando OE. Como  $n_2(0) = 0,5$ , a CAR tem apenas 50% de chance de popular o nível  $\varepsilon_1$ , por isso o valor máximo de  $n_1$  deixou de ser 1, como visto na Fig. 40 (b), para um valor próximo de 0,5 neste caso.  $\varepsilon_2$ , que pode ser populado por CAR ou pelo reservatório  $R$ , apresenta um pico mais próximo de 1. Entretanto, neste caso, o valor estacionário de ocupação é  $\approx 0,5$ , contra 0 no regime HB.

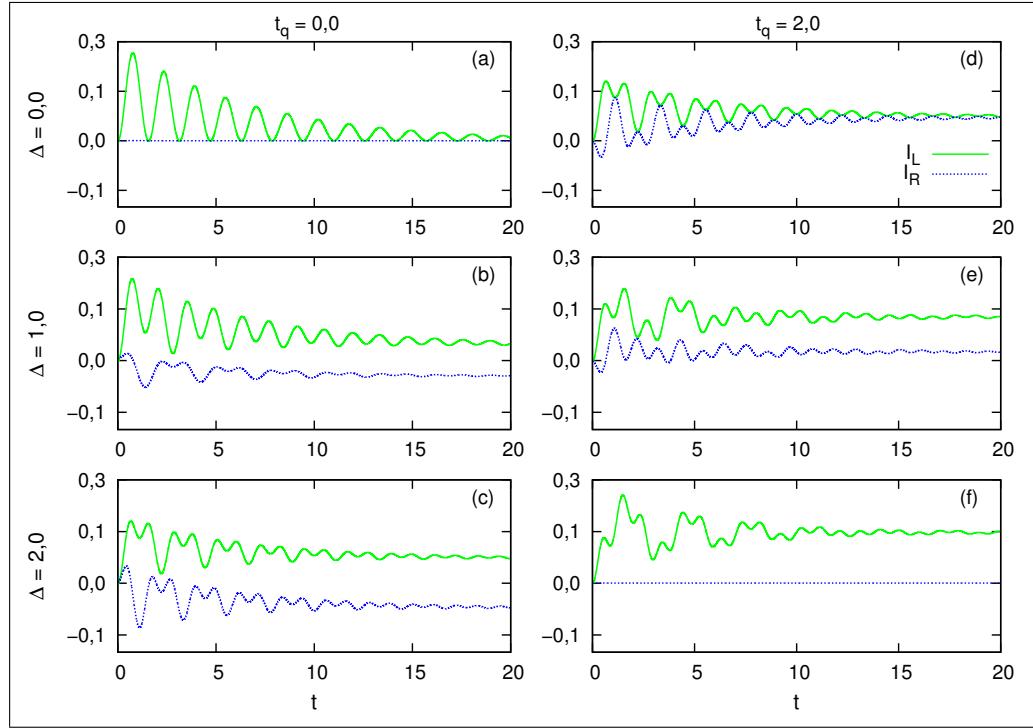
Por fim, no gráfico (c) da Fig. 44, para o qual  $t_q = \Delta = 2$ , observamos comportamentos em  $n_1$  e  $n_2$  idênticos àqueles vistos no caso HB, na Fig. 40 (c). A ocorrência de NT, devido à alteração de  $t_q$  para 2, combinada à ressonância entre  $\varepsilon_2$  e  $R$  é percebida na curva  $n_2$ , para a qual não são mais vistas oscilações.

Para analisar as correntes elétricas em ZB, apresentamos a Fig. 45, similar a 43 em HB. Os gráficos da coluna da esquerda são para  $t_q = 0$  e os da direita para  $t_q = 2$ . O acoplamento entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  é fixo como  $\Omega = 2$  e o acoplamento  $\Delta$  varia conforme a legenda da própria figura.

Na Fig. 45 (a),  $I_L$  oscila com frequência proporcional a  $\Omega$ .  $I_R$  é constante em zero, porque a carga no nível  $\varepsilon_2$  não é alterada. Diferente do resultado apresentado na Fig. 43 (a), para HB, onde a ocupação do nível era sempre  $n_2 = 0$ , a ocupação aqui é constante em 0,5. Sem alteração da carga nos níveis diretamente acoplados, não observaremos alteração na corrente respectiva.

O acoplamento ao SC com diferentes intensidades produz efeitos semelhantes para o caso  $t_q = 0$ , como pode ser visto nos gráficos (b) e (c).  $I_L$  apresenta oscilações que indicam uma redução gradual da frequência, com perda de amplitude. É importante reconhecer que  $I_L$  continua sempre positiva para os gráficos da Fig. 45, tal como era para os resultados da Fig. 43. Esse fato também é consequência direta da mudança de potencial químico no reservatório  $L$  ser irrelevante em relação à energia do nível  $\varepsilon_v$ . A diferença entre  $\mu_L$  e  $\varepsilon_v$ , mesmo em ZB, não permite corrente saindo do sistema para o reservatório  $L$ . Sendo assim, as oscilações de  $I_R$  para valores negativos, nos casos (b) e (c), indicam que a carga em  $\varepsilon_2$  está diminuindo e, com isso, permitindo a entrada de mais carga no nível a partir do reservatório  $R$ . Pela ausência de NT é

Figura 45 – Evolução temporal das correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regime ZB, comparação  $t_q = 0$  e  $t_q = 2$ , com variação de  $\Delta$ .



Fonte: Autores (2017).

Correntes  $I_L$  e  $I_R$  em função do tempo para regime ZB. Os gráficos da coluna da esquerda ((a), (b) e (c)) consideram  $t_q = 0$  enquanto os da coluna da direita ((d), (e) e (f)), tomam  $t_q = 2$ .  $\Delta$  é: 0 em (a) e (d), 1 em (b) e (e) e 2 em (c) e (f). O acoplamento com os reservatórios é tal que com  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ . Outros parâmetros relevantes são  $\Omega = 2$ ,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

possível inferir que a carga é transferida de  $\varepsilon_v$  para  $\varepsilon_1$  por OE. Em seguida, combinada com outra carga em  $\varepsilon_2$ , formam um par de Cooper em  $\varepsilon_{sc} = 0$ . Isso cria um fluxo contínuo de cargas dos reservatórios para o SC, fato que está demonstrado pelos valores estacionários, positivo de  $I_L$  e negativo de  $I_R$ .

Nos gráficos (d), (e) e (f) da Fig. 45 temos  $t_q = 2$  para diferentes valores de  $\Delta$ . Quando  $\Delta = 0$ , no gráfico (d),  $I_L$  apresenta evolução idêntica a do caso (c), onde  $t_q = 0$  e  $\Delta = 2$ . Devido à igualdade entre  $t_q$  e  $\Delta$  nos dois casos, o NT e a CAR promovem a mesma população ao nível  $\varepsilon_1$ . As oscilações observadas para o nível  $\varepsilon_1$  são iguais nos dois casos, provocando o mesmo reflexo nas oscilações das ocupações do nível  $\varepsilon_v$ . Consequentemente, o comportamento de  $n_v$  é refletido na corrente  $I_L$ . De fato, para este modelo efetivo, a CAR e o NT são fenômenos simétricos. Podemos perceber que  $I_R$  em (d) é invertida com relação ao resultado em (c). Em (c), o SC vai popular o nível  $\varepsilon_2$  rapidamente, gerando uma corrente positiva. Em (d), pode haver transferência por NT de  $\varepsilon_2$  para  $\varepsilon_1$ , o que origina uma corrente inicialmente negativa. O valor estacionário de  $I_R$  em (d) indica que, em média, a corrente é da esquerda para a direita, com a saída de cargas do nível  $\varepsilon_2$  para o reservatório  $R$ . Isso é exatamente o contrário do que

foi observado no caso (c).

Na Fig. 45 (e), onde  $\Delta < t_q$ , as correntes sofrem uma alteração leve em relação ao caso (d), para o qual  $\Delta = 0$ . Acontece um aumento na amplitude de  $I_L$ , acompanhado igualmente por uma redução na amplitude de  $I_R$ . As formas e frequências são praticamente as mesmas. O aumento  $I_L$  deve-se a uma maior desocupação do nível  $\varepsilon_1$ , que aumenta a amplitude das oscilações de OE e culmina com uma maior entrada de carga no nível  $\varepsilon_v$ . Assim, a combinação da CAR e do NT está reduzindo a população do nível  $\varepsilon_1$  em relação ao caso (d).

No caso (f), com  $t_q = \Delta = 2$ , a corrente  $I_L$  tem amplitude ainda maior que no caso (e), apresentando, aliás, o maior valor estacionário entre os analisados na Fig. 45. Esse valor indica que esta é a configuração do sistema que permite maior passagem de corrente entre o reservatório  $L$  e o PQ 1, pelo menos no que diz respeito a valores estacionários.  $I_R$ , por sua vez, é constante e igual a zero. Esse comportamento indica, mais uma vez, que a carga no nível  $\varepsilon_2$ , permanece inalterada em média. Pelo sinal de  $I_L$  sabemos que novas cargas sempre entram no nível  $\varepsilon_v$  para, em seguida, serem transferidas para  $\varepsilon_1$  por OE. As cargas que entram no sistema não retornam a  $L$ , nem saem para  $R$ , já que  $I_R = 0$ . Logo, a resposta é mais uma vez o SC. O balanço entre CAR e NT transformou o SC em um dreno extremamente eficiente, mas até que o próprio reservatório  $R$ , se considerarmos os valores estacionários de  $I_L$  em relação às demais configurações do sistema.

Para concluir nossa análise em função da tensão aplicada, apresentamos as Fig.s 46 e 47. Nelas comparamos resultados em HB e ZB sendo que, na Fig. 46  $t_q = 0$ , e na Fig. 47,  $t_q = 2$ . Em ambos os casos,  $\Delta = \Omega = 2$  e  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ .

De maneira geral, verificamos que  $n_2$  (linha vermelha pontilhada) determina exatamente a forma de  $I_R$  (azul tracejada). Além disso,  $I_L$  (verde contínua) apresenta a mesma forma de  $n_v$  (azul contínua), mas com sinal contrário. Fica claro, tanto na Fig. 46 quanto na Fig. 47, que o regime de tensão não altera estas relações, entre as ocupações e as correntes.

Especificamente, a Fig. 46 (com  $t_q = 0$ , isto é, sem NT), mostra que tanto ocupações quanto correntes são completamente diferentes dependendo da tensão aplicada. Vemos que a mudança no valor inicial de  $n_2$  (de 0 em HB, para 0,5 em ZB) é o fator fundamental nessa mudança, porque modifica as probabilidades para a CAR e para a OE. Todas essas diferenças estão representadas também nas correntes elétricas. Vale dizer que apenas neste regime, em que  $t_q = 0$ , com  $\Delta = \Omega$ , foi possível obter correntes  $I_L$  e  $I_R$  exatamente iguais, no mesmo sentido. Apenas para HB, Fig. 46 (b).

Sobre a Fig. 47 (com  $t_q = \Delta = \Omega = 2$ ), as mesmas ocupações são obtidas para  $\varepsilon_v$  em HB e ZB. Dessa forma, a corrente  $I_L$  observada também é igual em (b) e (d). Em contrapartida,  $n_2$  tem comportamentos bem distintos de (a) para (c). A oscilação vista em HB é substituída por uma reta constante em 0,5 em ZB. Note que essa reta não é o comportamento de  $n_2$  em ZB, na Fig. 46 (c), o que demonstra que o NT tem papel determinante nesse resultado, e não apenas a tensão zero.

Figura 46 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regimes HB e ZB, com  $t_q = 0$  e  $\Delta = \Omega = 2$ .

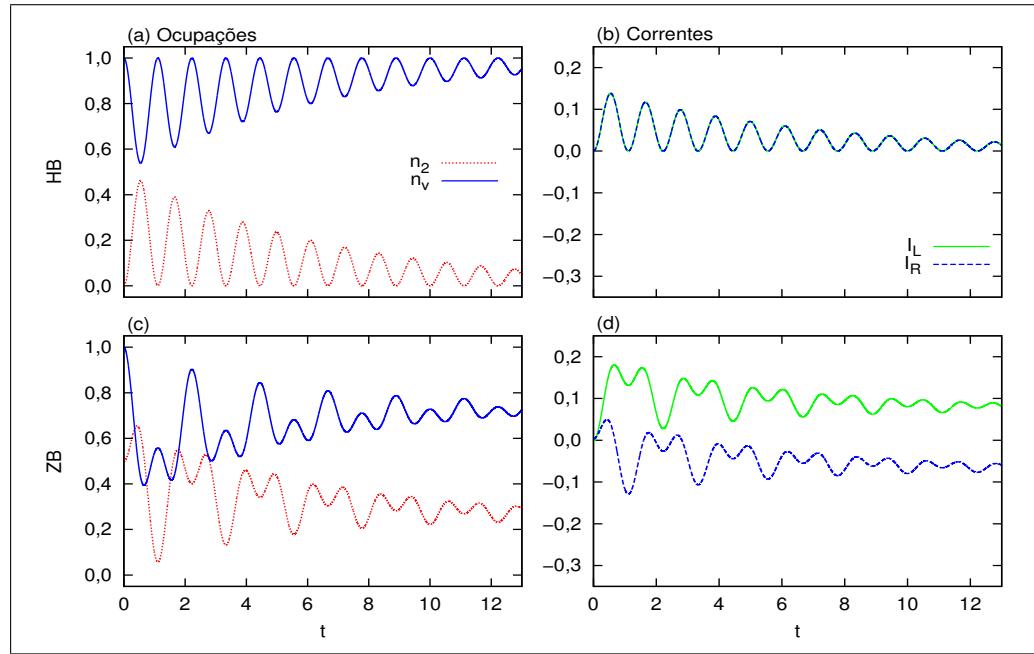
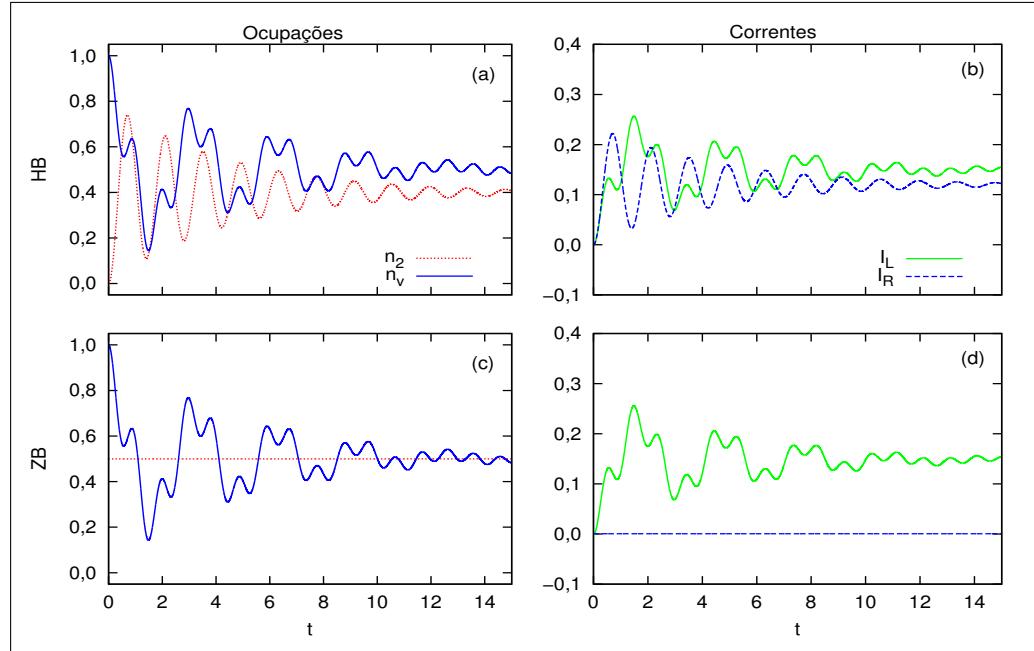


Figura 47 – Evolução temporal das ocupações e correntes no sistema DPQ/SC/Luz, regimes HB e ZB, com  $t_q = \Delta = \Omega = 2$ .



Fonte: Autores (2017).

Ocupações  $n_2$  e  $n_v$  e correntes  $I_L$  e  $I_R$ , em função do tempo. Os gráficos (a) e (b) são para HB e (c) e (d) para ZB. Na Fig. 46,  $t_q = 0$ . Em 47,  $t_q = 2$ . Nos dois casos  $\Delta = \Omega = 2$ . Os gráficos da esquerda são para as ocupações e da direita para as correntes. Outros parâmetros relevantes são:  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ ,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$  e  $\varepsilon_v = -50$ .

Nas Figuras 46 e 47 consideramos  $\Gamma_L$  e  $\Gamma_R$  iguais. No item (d) da Fig. 47, para o qual a corrente  $I_R$  é nula durante todo o intervalo observado, se fizermos  $\Gamma_R$  ligeiramente maior, a corrente ainda permanece constante em zero. Isso demonstra que a taxa de tunelamento entre  $\varepsilon_2$  e  $R$  não é responsável por esse comportamento. Ela apenas será relevante se seu valor for comparável aos de  $t_q$  e  $\Delta$ .

Aqui são encerradas as discussões sobre o sistema DPQ/SC/Luz para as situações em que  $\Omega$  é menor ou comparável a  $t_q$  e/ou  $\Delta$ . No capítulo 6, a seguir, discutimos o transporte de carga no mesmo sistema para o contexto em que o acoplamento óptico no PQ 1 é mais forte que os acoplamentos entre os níveis de condução ( $\Omega > t_q$  e/ou  $\Omega > \Delta$ ).

# 6 Resultados: interação com dubletos no sistema duplo ponto quântico - supercondutor com aplicação de luz

Neste capítulo discutimos o transporte de carga no sistema DPQ/SC/Luz considerando a estrutura fina formada pela interação radiação-matéria. Vamos demonstrar como a interação radiação-matéria no PQ 1 cria novos canais de condução no sistema e como os fenômenos de transporte acontecem através deles<sup>1</sup>. Sabemos que os níveis eletrônicos acoplados opticamente se separam em subníveis ou dubletos ((102), (111), (137)): um com energia  $\varepsilon_i + \Omega$  e outro com energia  $\varepsilon_i - \Omega$ . Nos resultados deste capítulo, fizemos sempre  $\Omega = 3$ , de modo que, se  $\varepsilon_1 = +1$ , as energias dos subníveis serão  $\varepsilon_+ = +4$  e  $\varepsilon_- = -2$ . As transições internas podem acontecer via NT (com  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ), por CAR (com  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ ) ou por ambos ( $t_q = \Delta = 0,5$ ). Tal como nos demais resultados deste trabalho, as análises são feitas para o sistema isolado ( $\Gamma = 0$ ), submetido a tensão alta (HB) e a tensão zero (ZB). Os resultados contemplam ocupações e correntes em função de  $\varepsilon_2$  e do tempo.

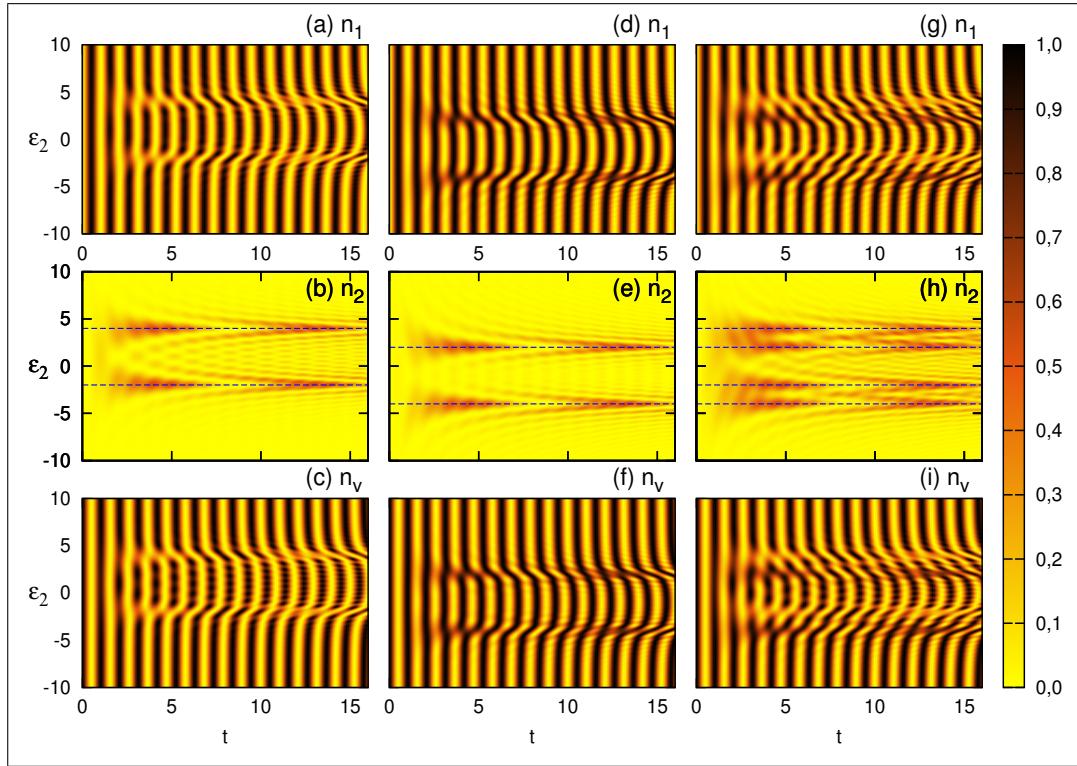
## 6.1 Caso $\Gamma = 0$ .

Para o sistema isolado,  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0$ , as ocupações em função de  $\varepsilon_2$  e de  $t$  são apresentadas na Fig. 48. A configuração inicial utilizada foi  $|001\rangle$ . As cores representam os valores das ocupações, no eixo vertical está mostrada a variação de  $\varepsilon_2$  e no horizontal a variação do tempo. Os gráficos são identificados entre  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  através das legendas internas.

Na primeira coluna da Fig. 48, os resultados consideram apenas NT entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  ( $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ). Nos gráficos (a) e (c) temos um padrão em faixas pretas (1) e amarelas (0), devido às oscilações de Rabi entre  $n_v$  e  $n_1$ . Como o sistema está isolado, não perde coerência e as amplitudes não diminuem, mesmo para tempos longos. As oscilações demonstram a transferência de carga entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  por OE. Para dois valores específicos de  $\varepsilon_2$ , surgem perturbações nesse padrão de oscilações, tanto em (a) como em (c), que se estendem por todo período de observação. No gráfico (b), percebemos que essas modificações em  $n_1$  e  $n_v$  são acompanhadas por um aumento em  $n_2$ . As linhas tracejadas em azul destacam os valores de  $\varepsilon_2$  para os quais esse crescimento em  $n_2$  é máximo.

<sup>1</sup> Na realidade, os dubletos também são formados nos casos das seções 5.1 e 5.2, sempre que a interação óptica está presente, isto é, sempre que  $\Omega \neq 0$ . Como veremos adiante, a configuração de parâmetros (com  $t_q$  e  $\Delta$  consideravelmente maiores ou comparáveis a  $\Omega$ ) é que não permitia a observação desse fenômeno, devido à ocorrência de uma interferência destrutiva. Essa situação foi considerada também na seção sobre Dubletos de Autler-Townes no capítulo de Introdução.

Figura 48 – Ocupações no sistema DPQ/SC/Luz em função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, caso  $\Gamma = 0$ , demonstrando interação com dubletos.



Fonte: Autores (2017).

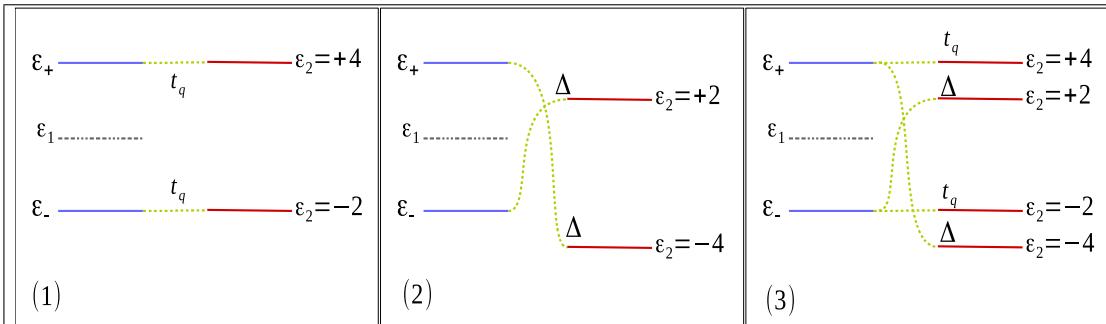
Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  como função de  $\varepsilon_2$  e de  $t$ , regime  $\Gamma = 0$ . A escala de cores indica os valores das ocupações. A escala vertical de cada gráfico mostra a variação de  $\varepsilon_2$  e a horizontal, a variação do tempo. O acoplamento entre os níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  é fixo,  $\Omega = 3,0$ . Os parâmetros de acoplamento são: (a), (b), (c)  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ; (d), (e), (f)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ ; (g), (h), (i)  $t_q = \Delta = 0,5$ . Outros parâmetros são:  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0$ ,  $\varepsilon_1 = +1$  e  $\varepsilon_v = -100$ . O estado inicial é  $|001\rangle$ .

Sabemos que as transições por NT tem probabilidade máxima de acontecer se os níveis estiverem em ressonância. Por isto, com  $\varepsilon_1 = +1$ , esperávamos inicialmente que ocorresse um crescimento significativo de  $n_2$  quando  $\varepsilon_2$  fosse também igual a  $+1$ . Mas não é o comportamento que observamos no gráfico (b). Além de não haver nenhum crescimento significativo para energia  $\varepsilon_2 = +1$ ,  $n_2$  cresce para outros dois valores de  $\varepsilon_2$ .

Esse comportamento pode ser compreendido se observarmos o esquema (1) da Fig. 49. Nele retratamos o nível  $\varepsilon_1$ , originalmente com energia  $+1$  e diferentes valores de  $\varepsilon_2$ . Como já discutido na introdução deste capítulo, a interação entre a luz aplicada e o PQ 1 cria uma estrutura fina de níveis que está acoplada via  $\Omega$ . O nível  $\varepsilon_1$  se desdobra em outros dois níveis, ou subníveis, formando o dubleto  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_-$ , representado na figura. Assim, ao invés da ressonância entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , para observarmos NT devemos procurar ressonâncias entre  $\varepsilon_2$  e os subníveis  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_-$ . Esse comportamento, com duas transições por NT em  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_-$ , foi previsto no gráfico (a) da Fig. 21, no Capítulo 2, quando estudamos as autoenergias do sistema DPQ/SC/Luz. Com  $\Omega = 3,0$ , essas ressonâncias acontecem quando  $\varepsilon_2$  for  $+4$  e/ou  $-2$ , que são os valores

representados na Fig. 48 (b) pelo tracejado azul. Fica claro então que, quando  $\varepsilon_2$  assume esses valores na Fig. 48, a probabilidade de NT passa a ser máxima e a ocupação  $n_2$  em (b) sobe, causando redução das ocupações em  $n_1$  (a) e  $n_v$  (c).

Figura 49 – DPQ/SC/Luz: Dubletos para  $\varepsilon_1 = +1$  e interação com CAR e NT.



Fonte: Autores (2017).

Formação de dubletos no nível  $\varepsilon_1 = +1$  e interação dependendo dos valores de  $t_q$  e  $\Delta$ .  $\Omega = 3,0$  em todos os casos, por isso, os subníveis são  $\varepsilon_+ = +4$  e  $\varepsilon_- = -2$ . Os parâmetros de acoplamento são tais que: (1)  $t_q \neq 0$  e  $\Delta = 0$ ; (2)  $t_q = 0$  e  $\Delta \neq 0$ ; (3)  $t_q = \Delta \neq 0$ .  $\varepsilon_2$  pode assumir qualquer valor. Em cada gráfico da Figura está demonstrado para quais valores de  $\varepsilon_2$  seria possível CAR ou NT com probabilidade máxima.

Para os gráficos da segunda coluna da Fig. 48, (d), (e) e (f), foram utilizados os parâmetros  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ . Aqui novamente podemos citar a análise feita no Capítulo 2, onde a Fig. 21 (b) mostrou que, com  $t_q = 0$  e  $\Delta < \Omega$ , devemos esperar transições eletrônicas via CAR para dois valores distintos de  $\varepsilon_2$ . Conforme demonstrado no esquema (2) da Fig. 49, para  $\Omega = 3$ , os valores de  $\varepsilon_2$  para os quais acontecem as transições entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  e o SC são  $+2$  e  $-4$ <sup>2</sup>. Por isso, no gráfico (e), vemos  $n_2$  aumentar em torno destes valores específicos de  $\varepsilon_2$ .

Os resultados (f), (g) e (h) da Fig. 48 são para  $t_q = \Delta = 0,5$ . Os gráficos mostram que o NT e a CAR acontecem de forma independente quando  $\varepsilon_2$  assume o valor necessário. Conforme aprendemos a partir da análise dos autovalores do sistema DPQ/SC/Luz na Fig. 21 (c), se  $\varepsilon_1 \neq 0$ , devemos esperar quatro transições possíveis para a situação  $t_q = \Delta < \Omega$ . Como demonstrado no esquema (3) da Fig. 49, os processos de NT e CAR podem acontecer independentemente pois não existe sobreposição dos canais de condução, já que tomamos  $\varepsilon_1 = +1$ . Em suma, essa separação entre os quatro valores só é obtida quando o acoplamento óptico  $\Omega$  é suficientemente maior que os acoplamentos entre os dois níveis de condução, isto é,  $\Omega > t_q$  e  $\Omega > \Delta$ , de modo a superar a interferência destrutiva entre os dubletos e os desdobramentos dos níveis devidos à estes acoplamentos.

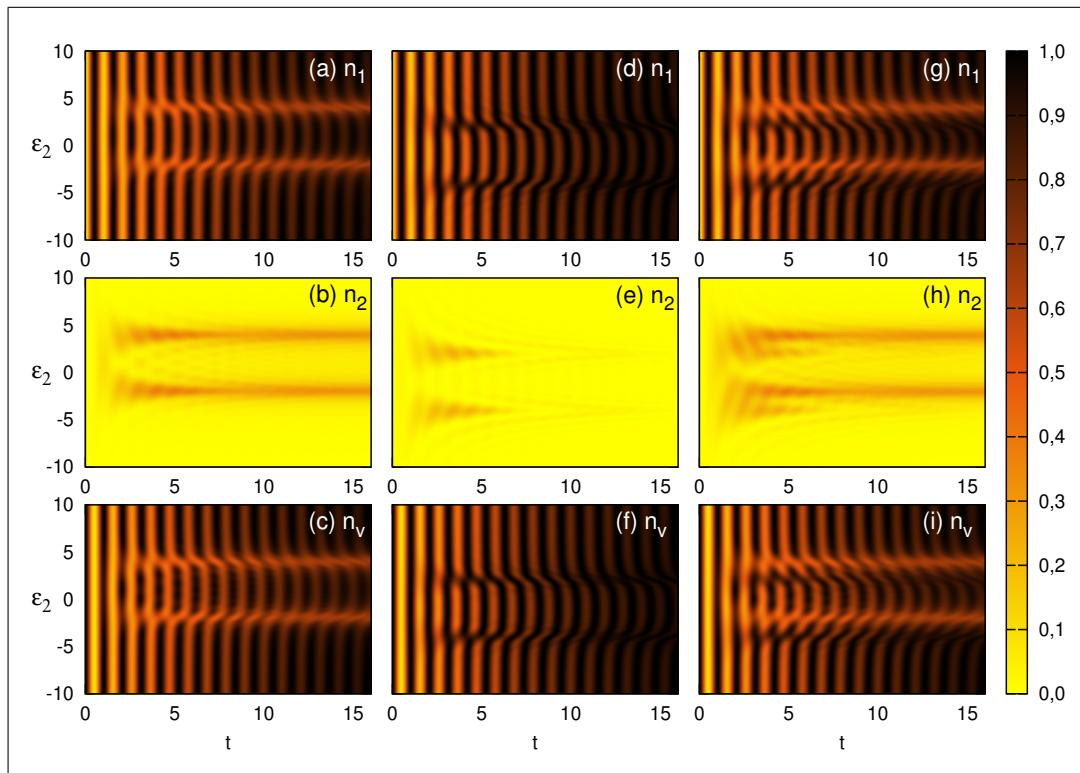
<sup>2</sup> Para máxima probabilidade de CAR, a energia dos níveis acoplados ao SC devem ser iguais a  $\varepsilon_{sc}$  quando somadas. Neste caso, como  $\varepsilon_{sc} = 0$ , temos  $\varepsilon_{\pm} + \varepsilon_2 = 0$  e por isso,  $\varepsilon_2 = -\varepsilon_{\pm}$ .

## 6.2 Tensão alta

Vamos considerar agora que os reservatórios fermiônicos normais  $L$  e  $R$  estão acoplados a  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_2$ , respectivamente, com taxas de tunelamento iguais,  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ .

Para os resultados das Figuras 50 e 51 os potenciais químicos dos reservatórios são tais que a tensão aplicada ao sistema é alta (regime de tensão alta, ou High Bias, já discutido na seção 5.2.1). Na Fig. 50 são apresentadas as ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$  em função da variação da energia  $\varepsilon_2$  e do tempo, nos mesmos moldes da Fig. 48.

Figura 50 – Ocupações no sistema DPQ/SC/Luz em função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime HB, demonstrando interação com dubletos.



Fonte: Autores (2017).

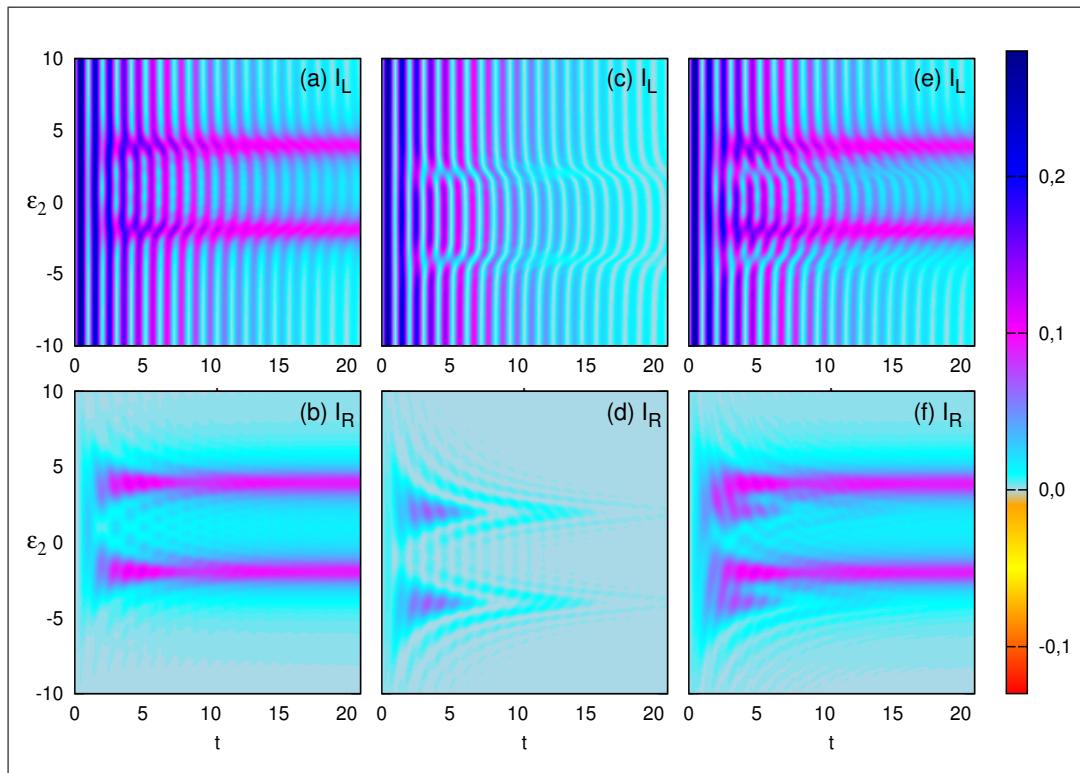
Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$ , como função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime HB. A escala de cores indica as probabilidades de ocupação de cada nível. Para cada gráfico,  $\varepsilon_2$  varia segundo a escala vertical e  $t$  segundo a escala horizontal. O acoplamento óptico entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  é  $\Omega = 3,0$ .  $t_q$  e  $\Delta$  são: (a), (b), (c)  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ; (d), (e), (f)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ ; (g), (h), (i)  $t_q = \Delta = 0,5$ . Além disso,  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ ,  $\varepsilon_1 = +1$  e  $\varepsilon_v = -100$ . O estado inicial do sistema é  $|001\rangle$ .

O padrão de oscilações invertidas entre  $n_1$  (a) e  $n_v$  (c) na Fig. 50 indica transferência de cargas entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  por OE. Tal como no caso  $\Gamma = 0$ , as interferências causadas pelas transições via NT entre os dubletos e o nível  $\varepsilon_2$  acontecem para os mesmos valores (+4 e -2) e persistem durante todo o intervalo observado. As cores escuras observadas para tempos longos em (a) e

(c) indicam acumulo de carga no PQ 1, exceto quando  $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\pm}$ , onde o aumento de  $n_2$  diminui  $n_1$ . Para estes valores, o comportamento de  $n_2$  em (b) é praticamente o mesmo observado na Fig. 48, indicando que a ocupação é diferente de zero mesmo em tempos longos.

Nos resultados da segunda coluna da Fig. 50, o padrão oscilatório característico de OE entre  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  se repete entre (d) e (f). Entretanto, em (e), fica claro que as transições entre  $\varepsilon_2$  e o dubleto cessam rapidamente, não provocando tanta interferência sobre  $n_1$  e  $n_v$  como acontecia para NT. Sabemos que a CAR é interrompida se um dos níveis acumular carga em relação ao outro.  $n_2$  diminui devido a presença do reservatório  $R$ , enquanto a carga no dubleto começa a acumular, devido à entrada de mais cargas a partir do reservatório  $L$ . Esse fluxo só é interrompido quando a OE não puder mais ocorrer (quando  $n_1$  e  $n_v$  forem iguais a 1). Com a CAR proibida, a ocupação de  $n_2$  vai a zero, pois  $\mu_R$  é muito menor que os valores que estamos considerando para  $\varepsilon_2$  (para CAR, +2 e -4) de modo que não é possível entrada de carga no nível.

Figura 51 – Correntes no sistema DPQ/SC/Luz em função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime HB, demonstrando interação com dubletos.



Fonte: Autores (2017).

Correntes  $I_L$  e  $I_R$  como função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime HB. As cores descrevem os valores das correntes. As variações de  $\varepsilon_2$  e  $t$  estão dispostas nas escalas vertical e horizontal de cada gráfico, respectivamente.  $\Omega = 3,0$  e os outros parâmetros de acoplamento são: (a) e (b)  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ; (c) e (d)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ ; (e) e (f)  $t_q = \Delta = 0,5$ . Outros parâmetros são:  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ ,  $\varepsilon_1 = +1$  e  $\varepsilon_v = -100$ .

Os gráficos (g), (h) e (i) da Fig. 50 combinam exatamente os padrões encontrados nas primeira e segunda colunas. Na comparação direta entre os dois efeitos, no regime de HB, o NT entre os dubletos e  $\varepsilon_2$  é mais favorável que a CAR, que contribui durante pouco tempo no transporte.

Na Fig. 51 temos correntes  $I_L$  e  $I_R$  respectivas às ocupações da Fig. 50. Sendo assim (a) e (b) correspondem aos resultados para  $t_q = 0,5$   $\Delta = 0$ , (c) e (d) para  $\Delta = 0,5$   $t_q = 0$  e, (e) e (f), para  $t_q = \Delta = 0,5$ .

Para  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$  em (a) e (b), as correntes  $I_L$  e  $I_R$  são iguais e positivas quando  $\varepsilon_2$  assume valores próximos de +4 e -2. Corroborando as conclusões sobre as ocupações em (a), (b) e (c) da Fig. 50, uma corrente constante não-nula se estabelece para tempos longos.

Já os resultados de (c) e (d) da Fig. 51, onde  $\Delta = 0,5$  e  $t_q = 0$ , mostram, por comparação com (d)-(f) da Fig. 50, que  $I_L$  e  $I_R$  vão a zero quando as transições por CAR são interrompidas (note que a  $I_R$  tem o mesmo padrão de  $n_2$ ).

Quando o NT e a CAR são possíveis, casos (e) e (f) da Fig. 51, as correntes também demonstram independentemente os fenômenos de NT e CAR de acordo com  $\varepsilon_2$ . Note que durante toda a evolução das correntes nos gráficos da Fig. 51,  $I_L$  e  $I_R$  são sempre positivas. Pela convenção de sinais que adotamos, da forma como os reservatórios são configurados no regime HB, obtemos o sentido de deslocamento das cargas esperado, da esquerda para direita ( $L \rightarrow DPQ \rightarrow R$ ).

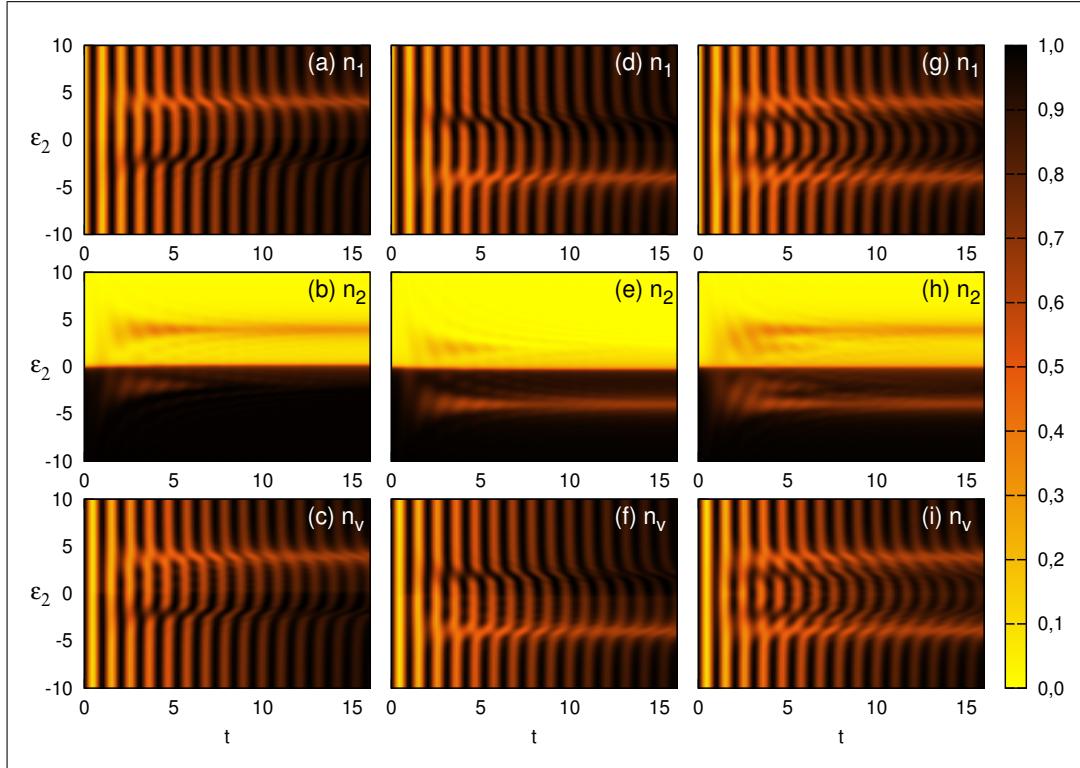
### 6.3 Tensão zero

São apresentados nesta seção os resultados para o sistema DPQ/SC/Luz submetido a tensão zero - ZB, com  $\mu_L = \mu_R = 0$ . As ocupações são mostradas na Fig. 52 e as correntes na Fig. 54. Os potenciais químicos são  $\mu_L = \mu_R = 0$ . Exceto pela tensão aplicada (ZB) e, consequentemente, os valores iniciais de ocupação, todas as configurações são semelhantes as das Fig.s 50 e 51.

Em comparação com as Figuras 48 e 50 vemos que  $n_2$  na Fig. 52 é modificada especialmente para  $\varepsilon_2 < 0$ . Note que em todos os gráficos,  $n_2$  é majoritariamente colorido de preto para  $\varepsilon_2 < 0$ . Isso ocorre devido a entrada de carga no nível  $\varepsilon_2$  proveniente do reservatório  $R$ , visto que  $\varepsilon_2 \leq \mu_R = 0$ . Dito isso, vamos analisar separadamente os resultados da Fig. 52.

Os esquemas da Fig. 53 mostram como acontecem as transições quando  $\varepsilon_2$  assume a energia  $\varepsilon_+ = +4$ , com  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ . As transições por OE entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  não permitem que o subnível  $\varepsilon_+$  seja populado (1). Na presença de NT, essa carga pode ser transferida a  $\varepsilon_2$ , que está em ressonância (2). Com  $\varepsilon_2 > \mu_R$ , a carga em  $\varepsilon_2$  pode sair pelo reservatório  $R$  (3) deixando o sistema pronto para repetir este mesmo ciclo de transições. Isso é o que nos dizem os gráficos de ocupação em (a), (b) e (c) na Fig. 52 para valores próximos de  $\varepsilon_2 = +4$ . A análise do esquema da Fig. 53 também é suficiente para compreendermos o que é observado para das correntes  $I_L$  e  $I_R$  em (a) e (b) da Fig. 54: para  $\varepsilon_2 = \varepsilon_+$ ,  $I_L$  e  $I_R$  assumem valores positivos

Figura 52 – Ocupações no sistema DPQ/SC/Luz em função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime ZB, demonstrando interação com dubletos.



Fonte: Autores (2017).

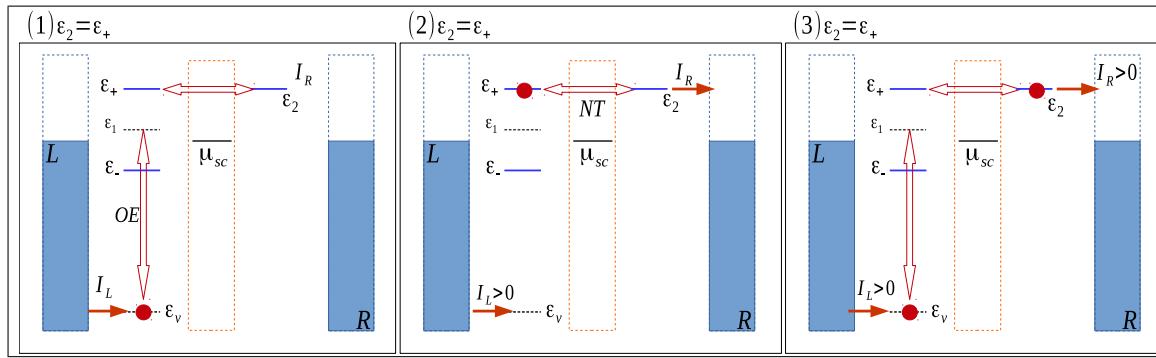
Ocupações  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_v$ , como função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime ZB. As cores indicam as ocupações de cada nível. Em cada gráfico temos variação de  $\varepsilon_2$  na escala vertical e  $t$  na horizontal.  $\Omega = 3,0$  e  $t_q$  e  $\Delta$  são: (a), (b), (c)  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ; (d), (e), (f)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ ; (g), (h), (i)  $t_q = \Delta = 0,5$ . Além disso,  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$  com  $\varepsilon_1 = +1$  e  $\varepsilon_v = -100$ .

durante todo o intervalo observado, evidenciando mais uma vez o deslocamento líquido de cargas no sistema da esquerda para a direita.

As ocupações em (a), (b) e (c) na Fig. 52 também demonstram uma alteração quando  $\varepsilon_2 = \varepsilon_-$ . Alteração esta que também está representada nas correntes  $I_L$  e  $I_R$  nos gráficos (a) e (b) da Fig. 54 para valores de  $\varepsilon_2$  próximos de  $-2$ . Com o auxílio dos esquemas da Fig. 55 podemos compreender porque esta alteração não é duradoura como quando  $\varepsilon_2 = \varepsilon_+$ .

No primeiro esquema da Fig. 55 está representada a transição entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  por OE, que produz as oscilações observadas nos gráficos (a) e (c) da Fig. 52. Como o nível  $\varepsilon_2$ , com essa energia ( $-2$ ) já está ocupado inicialmente, existe uma possibilidade de NT com o subnível  $\varepsilon_-$  e, por isso, vemos uma pequena e breve diminuição de  $n_2$  no gráfico (b) da Fig. 52. Por causa dessa pequena redução da ocupação é que visualizamos o surgimento de uma pequena corrente  $I_R$  negativa para  $\varepsilon_2 = -2$  no gráfico (b) da Fig. 54. Com o passar do tempo as ocupações  $n_1$  e  $n_2$  saturam em 1 devido às transições ópticas e à injeção de cargas provenientes do reservatório. Isso faz com que  $I_R$  se anule para tempos acima de  $t = 10$ . Por outro lado, o esquema (2) da Fig. 55 mostra que a corrente  $I_L$  é diferente de zero durante um certo tempo

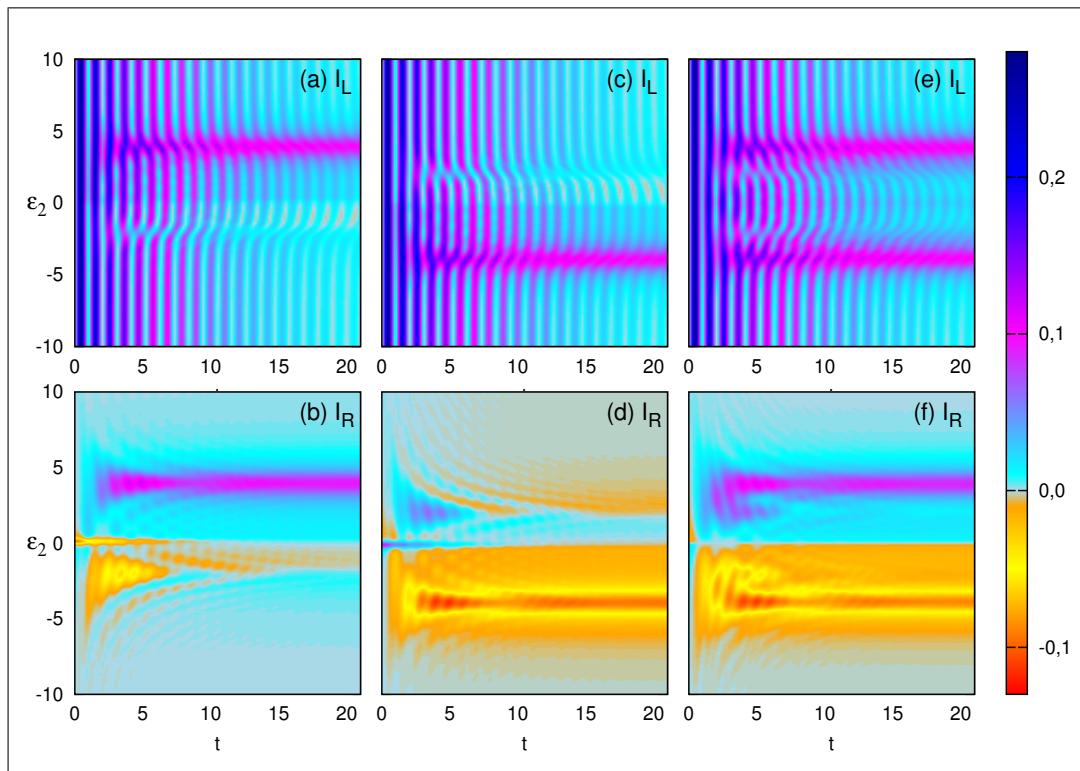
Figura 53 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando NT entre  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_+$  para sistema em ZB.



Fonte: Autores (2017).

Transições por NT entre  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_2$  para o sistema DPQ/SC/Luz em ZB. (1) mostra a transição por OE entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$ . Em (2) está representada a transição entre  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_2$  por NT. Em (3), surge uma corrente  $I_R$  positiva com a saída da carga para o reservatório  $R$ .

Figura 54 – Correntes no sistema DPQ/SC/Luz em função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime ZB, demonstrando interação com dubletos.

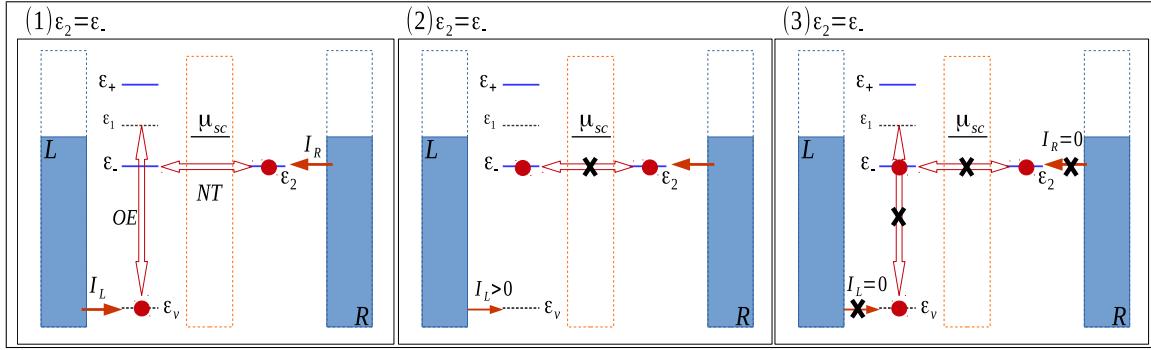


Fonte: Autores (2017).

Correntes  $I_L$  e  $I_R$  como função de  $\varepsilon_2$  e do tempo, regime ZB. Os valores das correntes são indicados pelas cores. As variações de  $\varepsilon_2$  e  $t$  são mostradas nas escalas vertical e horizontal de cada gráfico, respectivamente.  $\Omega = 3,0$  enquanto  $t_q$  e  $\Delta$  são: (a)-(b)  $t_q = 0,5$  e  $\Delta = 0$ ; (c)-(d)  $t_q = 0$  e  $\Delta = 0,5$ ; (e)-(f)  $t_q = \Delta = 0,5$ . Outros parâmetros são:  $\Gamma_L = \Gamma_R = 0,3$ ,  $\varepsilon_1 = +1$  e  $\varepsilon_v = -100$ .

para  $\varepsilon_2 = \varepsilon_-$ , mas que também converge para valores próximos de zero para tempos longos. No item (3) compreendemos que isso acontece porque a transição por OE também é bloqueada pelo acumulo de carga em  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$ .

Figura 55 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando NT entre  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_-$  para sistema em ZB.



Fonte: Autores (2017).

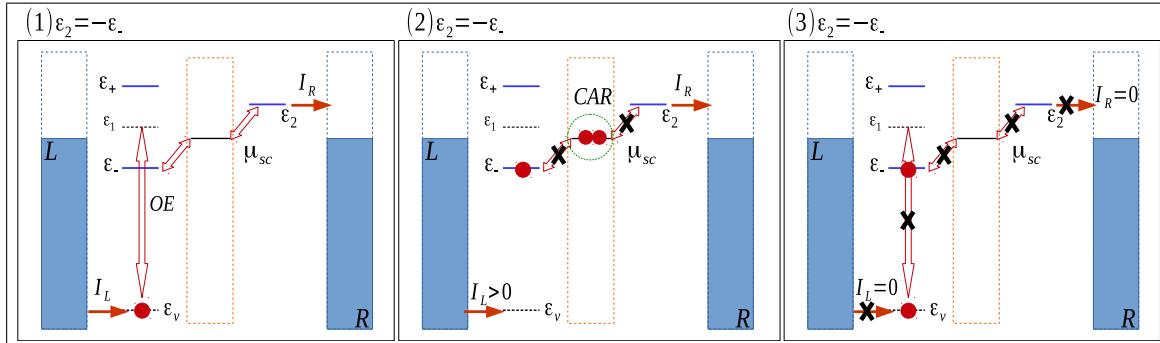
Transições por NT entre  $\varepsilon_-$  e  $\varepsilon_2$  para o sistema DPQ/SC/Luz em ZB. (1) Transição entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  por OE.  $\varepsilon_2$  está ocupado inicialmente devido a posição do nível em relação a  $\mu_R$ . (2) Com o nível  $\varepsilon_-$  populado por OE, o NT com  $\varepsilon_2$  fica bloqueado porque ambos estão ocupados. (3) O fluxo de cargas através de  $L$  interrompido pelo acúmulo de carga em  $\varepsilon_1$ .

Os gráficos (d), (e) e (f) da Fig. 52 consideram as modificações das ocupações por transições via CAR. Novamente temos comportamentos distintos para  $\varepsilon_2 > 0$  e  $\varepsilon_2 < 0$ . Sendo assim, vamos utilizar outros dois esquemas: na Fig. 56 temos o caso  $\varepsilon_2 = -\varepsilon_-$  e na Fig. 57 consideramos  $\varepsilon_2 = -\varepsilon_+$ . Esses esquemas também vão auxiliar no entendimento dos comportamentos observados para  $I_L$  e  $I_R$  nos gráficos (c) e (d) da Fig. 54.

No esquema da Fig. 56 demonstramos que o aumento pequeno de  $n_2$  no gráfico (e) da Fig. 52 se deve ao bloqueio da CAR. Com  $\varepsilon_2 > 0$ , a ocupação inicial deste nível é próxima de zero. Antes da transição de  $\varepsilon_v$  para  $\varepsilon_1$  por OE, existe uma pequena probabilidade de que um par de Cooper se separe no SC e ocupe simultaneamente os níveis  $\varepsilon_-$  e  $\varepsilon_2 = +2$  (esquema 1). Essa pequena probabilidade é que faz com que  $n_2$  não seja exatamente zero para este valor da energia  $\varepsilon_2$ . Como em (2) o nível  $\varepsilon_-$  é ocupado por OE,  $\varepsilon_2$  fica com uma carga diferente de  $\varepsilon_-$ . Note que  $\varepsilon_2 > \mu_R$ , logo a ocupação inicial deste nível é zero. Dessa forma, a CAR fica bloqueada. As correntes  $I_L$  e  $I_R$  convergem para zero nos gráficos (c) e (d) da Fig. 54 quando  $\varepsilon_2 = +2$ .  $I_L$  pelo acúmulo de carga em  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  e,  $I_R$ , porque o nível  $\varepsilon_2$  está vazio. Inclusive, os rastros laranja na corrente  $I_R$  gráfico (d) mostram que a proximidade entre  $\varepsilon_2 = +2$  e  $\mu_R = 0$  pode permitir entrada de carga no PQ 2, devido à largura do nível  $\varepsilon_2$ .

Com o auxílio dos esquemas mostrados na Fig. 57 é possível compreender como surge uma corrente  $I_R$  negativa e persistente no tempo na Fig. 54 (d), ainda que  $\varepsilon_2 = -4$ , ou seja, menor que  $\mu_R$ . O gráfico de  $n_2$  em (e) da Fig. 52 mostra que o nível  $\varepsilon_2$  está sendo continuamente esvaziado. Simultaneamente, uma corrente  $I_R$  negativa surge no gráfico (d) da Fig. 54. O que fica claro pelos esquemas da Fig. 57 é que, depois que o subnível  $\varepsilon_+$  é populado por OE

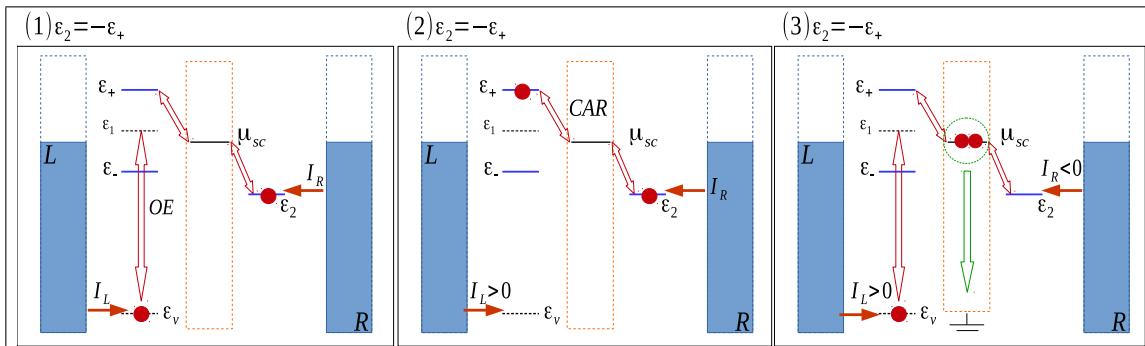
Figura 56 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando CAR entre  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_-$  para sistema em ZB.



Fonte: Autores (2017).

Transições por CAR entre  $\varepsilon_-$  e  $\varepsilon_2$  para o sistema DPQ/SC/Luz em ZB. (1) Transição entre  $\nu e_v$  e  $\varepsilon_1$  por OE. Com  $t_q = 0$  e  $\Delta \neq 0$  pode ocorrer uma transição entre  $\varepsilon_-$  e  $\varepsilon_2 = +2$  por CAR. (2) As ocupações diferentes entre  $\varepsilon_-$ , ocupado por OE, e  $\varepsilon_2$  com energia maior que  $\mu_R$ , bloqueiam a CAR. (3)  $I_L$  vai a zero pelo acumulo de carga em  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_v$  e  $I_R$  porque o nível  $\varepsilon_2$  está desocupado.

Figura 57 – DPQ/SC/Luz: Esquema demonstrando CAR entre  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_+$  para sistema em ZB.



Fonte: Autores (2017).

Transições por CAR entre  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_2$  para o sistema DPQ/SC/Luz em ZB. (1) Transição entre  $\varepsilon_v$  e  $\varepsilon_1$  por OE.  $\varepsilon_2$  está ocupado inicialmente pois  $\varepsilon_2 < \mu_R$ . Neste caso, a CAR pode acontecer entre  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_2 = -4$ . (2) As ocupações iguais em  $\varepsilon_+$ , ocupado por OE, e  $\varepsilon_2$ , ocupado pelo reservatório induzem a CAR. (3) Com a formação de um par de Cooper em  $\varepsilon_{sc}$  no SC, os níveis  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_2$  ficam livres. Esse processo continua indefinidamente, fazendo  $I_L$  positiva e  $I_R$  negativa - de  $R$  para o sistema.

(esquema 1), um par de Cooper pode ser formado pela junção dessa carga com a carga no nível  $\varepsilon_2$  (esquema 2), populado pelo reservatório  $R$ . Como o SC está aterrado, esse processo acontece repetidas vezes, gerando uma corrente  $I_L$  positiva e uma corrente  $I_R$  negativa - de  $R$  para o sistema.

Mais uma vez, os efeitos individuais do NT e da CAR sobre ocupações e correntes aparecem combinados nos gráficos das terceiras colunas das Figuras 52 e 54, para as quais fizemos  $t_q = \Delta = 0,5$ . De fato, cada processo de transição consegue gerar, para um valor específico de  $\varepsilon_2$ , correntes persistentes e não-nulas, em um regime de tensão para o qual esse não é o comportamento esperado. Quando a tensão aplicada é zero, espera-se que as correntes sejam nulas

no regime estacionário, o que claramente não é o caso quando observamos os gráficos (e) e (f) da Fig. 54 para  $\varepsilon_2 = \pm 4$ .

Por fim, falta comentar que, nos gráficos da corrente  $I_R$  (b), (d) e (f), é possível observar modificações na correntes para  $\varepsilon_2 = 0$ . Essas transições acontecem porque  $\varepsilon_2$  entrou em ressonância com o máximo de energia do reservatório ( $\varepsilon_2 = \mu_R$ ), o que provoca transições entre estes dois níveis. Nos gráficos (b), (e) e (h) da Fig. 52, uma fina linha laranja surge para  $\varepsilon_2 = 0$ , mostrando que o valor estacionário de  $n_2$  é constante em 0,5.

Fica evidente neste capítulo que a presença dos dubletos de Autler-Townes influencia no transporte eletrônico através do sistema. No regime ZB, especificamente, conseguimos encontrar uma configuração onde a reflexão de Andreev cruzada acontece através de um canal distinto formado pelo acoplamento de  $\varepsilon_2$  a um dos níveis que formam o dubleto, com a observação de uma corrente persistente, não-nula inclusive no regime estacionário, direcionada dos reservatórios fermiônicos para o sistema.

## 7 Conclusões

Neste trabalho utilizamos o formalismo de funções de Green de não-equilíbrio para estudar o transporte de cargas em uma junção PQ-SC-PQ, também conhecida como separador de pares de Cooper (Cooper-Pairs Splitter).

Inicialmente, contemplamos o dispositivo formado apenas pelo acoplamento de reservatórios fermiônicos, normais e não-interagentes, aos PQs que compõe a junção (DPQ/SC). Analisando a evolução temporal das ocupações eletrônicas dos PQs ( $n_1$  e  $n_2$ ), fomos capazes de identificar assinaturas dos mecanismos de espalhamento que ocorrem através da junção. A análise da fase entre as oscilações de Rabi que surgem para cada nível indica que, se a fase entre  $n_1$  e  $n_2$  é  $\pi$ , ocorre tunelamento ressonante (NT) e, se a fase entre as oscilações é zero, ocorre reflexão de Andreev cruzada (CAR). Os resultados também demonstram que a configuração inicial do sistema, com um número par ou ímpar de cargas nos PQs, determina qual dos dois processos predominará sobre a dinâmica observada.

Além disso, observamos o efeito das diferentes configurações de energia dos PQs sobre as oscilações das ocupações. Para o sistema desacoplado dos reservatórios ( $\Gamma = 0$ ), a configuração energética dos níveis implica em mudanças na amplitude de probabilidade das ocupações em função do tempo. Por exemplo, o aumento da diferença entre as energias dos níveis diminui a probabilidade do NT. Por outro lado, para a ocorrência de CAR, verificamos que as energias devem ser antissimétricas (iguais, com sinais opostos) para garantir a máxima probabilidade do processo de transferência. Estudando a influência de diferentes tensões fonte-dreno (bias) aplicadas ao sistema, observamos que o papel da configuração energética adotada muda de um caso para outro, pois as ocupações iniciais de cada PQ são alteradas de acordo com a relação entre o potencial químico do reservatório e a energia do nível diretamente acoplado.

Adicionalmente, adaptando o sistema DPQ/SC para interação com uma excitação óptica, propusemos a inserção desta junção na estrutura de um fotodíodo. Neste caso, o sistema denominado como DPQ/SC/Luz é composto efetivamente por três níveis eletrônicos. Um nível na banda de valência do PQ 1 se acopla a um reservatório fermiônico à esquerda, enquanto o nível de condução do PQ 2 se acopla a um reservatório fermiônico comum à direita. Um nível na banda de condução no PQ 1 se conecta ao PQ 2 através do SC e pela excitação óptica ao nível na banda de valência. Aplicando luz laser sobre o PQ 1 foram observados diversos efeitos interessantes, conforme descrevemos a seguir, que surgem de acordo com a relação entre a intensidade do laser aplicado ( $\Omega$ ) e a intensidade dos acoplamentos entre os níveis de condução ( $t_q$  e  $\Delta$ ) nos dois PQs.

Quando a intensidade do laser aplicado é consideravelmente menor que a intensidade dos acoplamentos entre os dois PQs ( $\Omega < t_q$  e  $\Omega < \Delta$ ), foi observado um padrão de oscilações que mostra uma inversão periódica entre os processos de CAR e NT.

Quando as intensidades dos acoplamentos são comparáveis ( $\Omega \approx t_q$  e  $\Omega \approx \Delta$ ), foram obser-

vados comportamentos interessantes, especialmente para o regime de bias zero. Neste encontramos situações em que os valores estacionários das correntes elétricas são diferentes de zero, embora esperado inicialmente que convergissem para zero. Na situação limite em que os três acoplamentos são idênticos, foi observada a maior amplitude da corrente de entrada, entre o reservatório da esquerda e o PQ 1, acompanhada da supressão da corrente de saída, entre o PQ 2 e o reservatório à direita - embora o PQ 2 não esteja vazio. O resultado demonstra indiretamente a formação de uma corrente supercondutora através da associação entre a foto-excitação e os fenômenos de espalhamento na junção (NT e CAR). Esse resultado não foi verificado para um regime de bias alta. Além destes resultados, no regime de acoplamentos comparáveis, é digna de nota também a observação da formação de um padrão de pulsos quadrados na corrente de saída em um regime de tensão alta, ao se desconsiderar a presença do SC.

Por fim, quando o acoplamento radiação-matéria é mais forte que os demais acoplamentos entre os PQs e o SC ( $\Omega > t_q$  e  $\Omega > \Delta$ ), observamos nas correntes e ocupações como função do tempo e da energia do PQ 2, a separação dos níveis opticamente excitados no PQ 1 em dubletos de Autler-Townes. A evidência desse desdobramento dos níveis eletrônicos é a observação de NT e CAR mediadas pelo laser aplicado, através dos níveis esperados para composição do dubleto. Os níveis são função da frequência de Rabi associada às oscilações. O nível de condução no PQ 2, fracamente acoplado ao PQ 1 e ao SC, executa a função de provar a formação do dubleto ao mesmo tempo em que forma novos canais de condução de carga.

Este é o primeiro trabalho a analisar a separação de pares de Cooper assistida por fôtons em uma junção PQ-SC-PQ, em regime de não-equilíbrio. Um artigo com estes resultados teóricos está em fase de elaboração<sup>1</sup>. A inclusão de um SC em um fotodiodo híbrido de PQs, permite observar novos mecanismos de formação de fotocorrente e sugere novas possibilidade de aplicações. Por isso, esperamos que a publicação futura de nossos resultados estimule o surgimento de propostas experimentais que explorem o potencial do sistema para aplicações tecnológicas.

Como propostas futuras para este trabalho, citamos o tratamento do transporte com resolução de spin, que pode demonstrar a potencialidade de um dispositivo semelhante para a spin-trônica. A relação com os dubletos também faz promissora a ideia de incluir uma tensão de gate variável no tempo sobre o PQ 2, com intuito de melhor aproveitar os múltiplos canais de condução.

<sup>1</sup> ASSUNCAO, M. O.; SOUZA, F. M. Crossed Andreev reflection via Autler-Townes doublet in a quantum dot-supercondutor junction. Em elaboração.

## Referências

- 1 EKIMOV, A. I.; ONUSHCHENKO, A. A. Quantum size effect in three-dimensional microscopic semiconductor crystals. *JETP Letters*, v. 34, n. 6, p. 345, Julho 1981.
- 2 REED, M. et al. Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure. *Physical Review Letters*, v. 60, n. 6, p. 535, Fev 1988. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.535>>.
- 3 PAL, D. et al. Quantum dot-size variation and its impact on emission and absorption characteristics: An experimental and theoretical modeling investigation. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 41, n. Part 1, 2A, p. 482, Fev 2002.
- 4 MAKSYM, P. A.; CHAKRABORTY, T. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. *Physical Review Letters*, v. 65, n. 1, p. 108, Jul 1990. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.108>>.
- 5 PUSTILNIK, M.; GLAZMAN, L. Kondo effect in quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 16, n. 16, p. R513, Abr 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/16/R01>>.
- 6 MONREAL, R. C.; FLORES, F.; MARTIN-RODERO, A. Nonequilibrium transport in molecular junctions with strong electron-phonon interactions. *Physical Review B*, v. 82, n. 23, p. 235412, Dez 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.235412>>.
- 7 GOLOVACH, V. N.; KHAETSKII, A.; LOSS, D. Phonon-induced decay of the electron spin in quantum dots. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 1, p. 016601, Jun 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.016601>>.
- 8 BURKARD, G. et al. Spin-entangled electrons in mesoscopic systems. *Physics-Uspekhi*, v. 44, n. 10S, p. 126, Out 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1070/1063-7869/44/10S/S28>>.
- 9 KOPPENS, F. H. L. et al. Driven coherent oscillations of a single electron spin in a quantum dot. *Nature*, v. 442, n. 7104, p. 766, Ago 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature05065>>.
- 10 ATKINSON, P. et al. Site-control of InAs quantum dots using ex-situ electron-beam lithographic patterning of GaAs substrates. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 45, n. 4A, p. 2519, Abr 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JJAP.45.2519>>.
- 11 BRULS, D. M. et al. Determination of the shape and indium distribution of low-growth-rate InAs quantum dots by cross-sectional scanning tunneling microscopy. *Applied Physics Letters*, v. 81, n. 9, p. 1708, Ago 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1504162>>.
- 12 SUPRAN, G. J. et al. *High-performance Near-infrared Light-emitting Devices using Core-shell (PbS-CdS) Colloidal Quantum-dots*. Cambridge, MA, 2013. Disponível em: <<https://goo.gl/piiroF>>.
- 13 KAMAT, P. V. Quantum dot solar cells: The next big thing in photovoltaics. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, v. 4, n. 6, p. 908, Mar 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/jz400052e>>.

- 14 KAMAT, P. V. Quantum dot solar cells: Semiconductor nanocrystals as light harvesters. *The Journal of Physical Chemistry C*, v. 112, n. 48, p. 18737, Dez 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/jp806791s>>.
- 15 WANG, H. et al. Efficiency enhancement of organic solar cells by inserting PbS quantum dots film as the infrared absorption layer. *Materials Letters*, v. 187, p. 136, Jan 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.10.070>>.
- 16 LI, H. et al. Carbon quantum dots/TiO<sub>x</sub> electron transport layer boosts efficiency of planar heterojunction perovskite solar cells to 19%. *Nano Letters*, v. 17, n. 4, p. 2328, Mar 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b05177>>.
- 17 LIU, S. et al. Top-emitting quantum dots light-emitting devices employing microcontact printing with electricfield-independent emission. *Scientific Reports*, v. 6, n. 1, p. 22530, Abr 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep22530>>.
- 18 SILVA, A. C. A. et al. Biological analysis and imaging applications of CdSe/CdS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>/CdS core-shell magic-sized quantum dot. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*, v. 12, n. 5, p. 1421, Jul 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.nano.2016.01.001>>.
- 19 BAKALOVA, R. et al. Quantum dots as photosensitizers? *Nature Biotechnology*, v. 22, n. 11, p. 1360, Nov 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nbt1104-1360>>.
- 20 WOLF, S. A. et al. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future. *Science*, v. 294, p. 1488 (8), Novembro 2001.
- 21 AWSCHALOM, D. D. et al. Quantum spintronics: Engineering and manipulating atom-like spins in semiconductors. *Science*, v. 339, n. 6124, p. 1174, Mar 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1231364>>.
- 22 DELFT, D. van; KES, P. The discovery of superconductivity. *Physics Today*, v. 63, n. 9, p. 38, Set 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3490499>>.
- 23 TINKHAM, M. *Introduction to Superconductivity*. 2 ed. ed. Mineola, N.Y.: Dover Publications, 2004. 480 p.
- 24 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Physical Review*, v. 108, n. 5, p. 1175, Dez 1957. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175>>.
- 25 BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high- $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *K.A. Z. Physik B - Condensed Matter*, v. 64, n. 2, p. 189, Jun 1986. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01303701>>.
- 26 TAKAHASHI, H. et al. Large enhancement of  $t_c$  in the 134 k superconductor HgBa<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> under high pressure. *Physica C: Superconductivity*, v. 218, n. 1, p. 1, 1993. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0921-4534\(93\)90256-P](https://doi.org/10.1016/0921-4534(93)90256-P)>.
- 27 KATSAROS, G. et al. Hybrid superconductor-semiconductor devices made from self-assembled SiGe nanocrystals on silicon. *Nature Nanotechnology*, v. 5, n. 6, p. 458, Maio 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2010.84>>.

- 28 BEENAKKER, C. W. J. Quantum transport in semiconductor-superconductor microjunctions. *Physical Review B*, v. 46, n. 19, p. 12841(R), Nov 1992.
- 29 BENDING, S. J.; KLITZING, K. v.; PLOOG, K. Two-dimensional electron gas as a flux detector for a type-II superconducting film. *Physical Review B*, v. 42, n. 16, p. 9859, Dez 1990. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.9859>>.
- 30 DE FRANCESCHI, S. et al. Hybrid superconductor - quantum dot devices. *Nature Nanotechnology*, v. 5, p. 703, Set 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2010.173>>.
- 31 DAM, J. A. van et al. Supercurrent reversal in quantum dots. *Nature*, v. 442, n. 7103, p. 667, Ago 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature05018>>.
- 32 HOFSTETTER, L. et al. Cooper pair splitter realized in a two-quantum-dot Y-junction. *Nature*, Springer Nature, v. 461, n. 7266, p. 960, Out 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature08432>>.
- 33 SU, Z. et al. Andreev molecules in semiconductor nanowire double quantum dots. nov 2016. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1611.00727>>.
- 34 CLEUZIOU, J.-P. et al. Carbon nanotube superconducting quantum interference device. *Nature Nanotechnology*, v. 1, n. 1, p. 53, Out 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2006.54>>.
- 35 WANG, Z. et al. Viewing Majorana bound states by Rabi oscillations. *Scientific Reports*, v. 5, n. 11686, p. 8, Julho 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep11686>>.
- 36 OHM, C.; HASSLER, F. Majorana fermions coupled to electromagnetic radiation. *New Journal of Physics*, v. 16, n. 015009, Jan 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/1/015009>>.
- 37 COLCLOUGH, M. S. et al. Radio-frequency SQUID operation using a ceramic high-temperature superconductor. *Nature*, v. 328, n. 6125, p. 47, Jul 1987. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/328047a0>>.
- 38 CHANG, C.-Y.; HSU, C.-M.; JENG, J.-T. Integrated directly-coupled SQUID magnetometer and gradiometer. *Physics Procedia*, v. 36, p. 144, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.phpro.2012.06.061>>.
- 39 ANDREEV, A. F. The thermal conductivity of the intermediate state in superconductors. *Soviet Physics JETP*, v. 19, n. 5, p. 1228, Novembro 1964.
- 40 RUSSO, S. *Crossed Andreev reflection and electron transport in ferromagnetic hybrid structures*. 124 p. Tese (Doutorado) — Delft University of Technology, Delft, 2007. Casimir PhD Series.
- 41 SILVA, J. F.; VERNEK, E. Andreev and Majorana bound states in single and double quantum dot structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 28, n. 43, p. 435702, Set 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/43/435702>>.
- 42 PILLET, J.-D. et al. Andreev bound states in supercurrent-carrying carbon nanotubes revealed. *Nature Physics*, v. 6, n. 12, p. 965, Nov 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1811>>.

- 43 DIRKS, T. et al. Transport through Andreev bound states in a graphene quantum dot. *Nature Physics*, v. 7, n. 5, p. 386, Fev 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1911>>.
- 44 GONG, W.-J. et al. Andreev reflections in a Y-shaped junction with Majorana zero mode. *Current Applied Physics*, v. 16, n. 7, p. 673, Jul 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cap.2016.03.020>>.
- 45 HERRMANN, L. G. et al. Carbon nanotubes as Cooper-pair beam splitters. *Physical Review Letters*, v. 104, n. 2, Jan 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.026801>>.
- 46 HILTSCHER, B. et al. Adiabatic pumping in a double-dot Cooper-pair beam splitter. *Physical Review B*, v. 84, n. 15, Out 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.155403>>.
- 47 LEIJNSE, M.; FLENSBERG, K. Parity qubits and poor man's Majorana bound states in double quantum dots. *Physical Review B*, v. 86, n. 134528, p. 7, Out 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.134528>>.
- 48 QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 83, n. 4, p. 1057, Out 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/revmodphys.83.1057>>.
- 49 BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton: Princeton University Press, 2013. 264 p. Disponível em: <<https://doi.org/10.1515/9781400846733>>.
- 50 MAJORANA, E. Ettore majorana scientific papers. In: \_\_\_\_\_. Springer Berlin Heidelberg, 2006. cap. A symmetric theory of electrons and positrons, p. 201–233. Tradução de: Teoria Simmetrica dell'elettrone e del positrone por Luciano Maiani. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/978-3-540-48095-2\\_10](https://doi.org/10.1007/978-3-540-48095-2_10)>.
- 51 MATTUCK, R. D. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*. Segunda. Nova York: Dover Publications, 1992. 464 p.
- 52 STANESCU, T. D.; TEWARI, S. Majorana fermions in semiconductor nanowire: fundamentals, modeling, and experiment. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 25, n. 23, p. 233201 (1–29), Maio 2013. Topical Review. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/23/233201>>.
- 53 ALICEA, J. New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems. *Reports on Progress in Physics*, v. 75, n. 076501, p. 1–36, Junho 2012. Review. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0034-4885/75/7/076501>>.
- 54 SAU, J. D.; CLARKE, D. J.; TEWARI, S. Controlling non-Abelian statistics of Majorana fermions in semiconductor nanowires. *Physical Review B*, v. 84, n. 9, p. 094505, Set 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.094505>>.
- 55 KITAEV, A. Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, v. 44, n. Supplement, p. 131–136, outubro 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1070/1063-7869/44/10S/S29>>.

- 56 FLENSBERG, K. Non-Abelian operations on Majorana fermions via single-charge control. *Physical Review Letters*, v. 106, n. 9, Mar 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.090503>>.
- 57 SAU, J. D.; SARMA, S. D. Realizing a robust practical Majorana chain in a quantum-dot-superconductor linear array. *Nature Communications*, v. 3, p. 964, Jul 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/ncomms1966>>.
- 58 LIU, D. E.; BARANGER, H. U. Detecting a Majorana-fermion zero mode using a quantum dot. *Physical Review B*, v. 84, n. 201308(R), p. 4, Nov 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.201308>>.
- 59 VERNEK, E. et al. Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 89, n. 16, Abr 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.89.165314>>.
- 60 GONG, W.-J. et al. Universal transport properties of a quantum dot system with a laterally-coupled Majorana zero mode. *Current Applied Physics*, v. 15, n. 4, p. 520, Abr 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cap.2015.01.033>>.
- 61 CHEN, H.-J.; ZHU, K.-D. All-optical scheme for detecting the possible Majorana signature based on QD and nanomechanical resonator systems. *SCIENCE CHINA - Physics, Mechanics & Astronomy*, v. 58, n. 5, p. 050301, Maio 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11433-014-5637-4>>.
- 62 CHEN, H.-J.; ZHU, K.-D. Surface plasmon enhanced sensitive detection for possible signature of Majorana fermions via a hybrid semiconductor quantum dot-metal nanoparticle system. *Scientific Reports*, v. 5, n. 1, Ago 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep13518>>.
- 63 XIA, J.-J.; DUAN, S.-Q.; ZHANG, W. Detection of Majorana fermions by Fano resonance in hybrid nanostructures. *Nanoscale Research Letters*, v. 10, n. 1, Maio 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1186/s11671-015-0914-3>>.
- 64 MOORE, G. E. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, v. 38, n. 8, Abril 1965.
- 65 CAO, Q. et al. End-bonded contacts for carbon nanotube transistors with low, size-independent resistance. *Science*, v. 350, n. 6256, p. 68–72, Outubro 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.aac8006>>.
- 66 STAJIC, J. The future of quantum information processing. *Science*, v. 339, n. 6124, p. 1163, Mar 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.339.6124.1163>>.
- 67 FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, v. 21, n. 6/7, p. 467–488, 1982. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02650179>>.
- 68 BENIOFF, P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. *Journal of Statistical Physics*, v. 22, n. 5, p. 563, Maio 1980. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01011339>>.

- 69 SHOR, P. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, IEEE Comput. Soc. Press, 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/SFCS.1994.365700>>.
- 70 VANDERSYPEN, L. M. K. et al. Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. *Nature*, v. 414, n. 6866, p. 883–887, Dezembro 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/414883a>>.
- 71 XU, N. et al. Quantum factorization of 143 on a dipolar-coupling nuclear magnetic resonance system. *Physical Review Letters*, v. 108, n. 13, Mar 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.130501>>.
- 72 DATTANI, N. S.; BRYANS, N. Quantum factorization of 56153 with only 4 qubits. nov. 2014. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1411.6758>>.
- 73 SHOR, P. W. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. *Physical Review A*, v. 52, n. 4, p. R2493, Out 1995. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.R2493>>.
- 74 CALDERBANK, A. R.; SHOR, P. W. Good quantum error-correcting codes exist. *Physical Review A*, v. 54, n. 2, p. 1098, Ago 1996. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.1098>>.
- 75 CALDERBANK, A. R. et al. Quantum error correction and orthogonal geometry. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 3, p. 405, Jan 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.405>>.
- 76 JONES, J. A.; MOSCA, M.; HANSEN, R. H. Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer. *Nature*, v. 393, n. 6683, p. 344, Maio 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/30687>>.
- 77 HÉTET, G. et al. Electro-optic quantum memory for light using two-level atoms. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 2, p. 023601, Janeiro 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.023601>>.
- 78 THOMPSON, C. The revolutionary quantum computer that may not be quantum at all. *Wired*, Maio 2014. Disponível em: <<https://www.wired.com/2014/05/quantum-computing/>>.
- 79 BERMAN, G. P. et al. *Introduction to Quantum Computers*. Cingapura: World Scientific, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/3808>>.
- 80 POPKIN, G. Quest for qubits. *Science*, v. 354, n. 6316, p. 1090, Dez 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.354.6316.1090>>.
- 81 ENGEL, H.-A.; RECHER, P.; LOSS, D. Electron spins in quantum dots for spintronics and quantum computation. *Solid State Communications*, v. 119, n. 4-5, p. 229, Jul 2001. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(01\)00110-7](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(01)00110-7)>.
- 82 PRESS, D. et al. Complete quantum control of a single quantum dot spin using ultrafast optical pulses. *Nature*, v. 456, n. 7219, p. 218, Nov 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature07530>>.

- 83 ECONOMOU, S. E. et al. Scalable qubit architecture based on holes in quantum dot molecules. *Physical Review B*, v. 86, n. 8, Ago 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.085319>>.
- 84 BENNY, Y. et al. Coherent optical writing and reading of the exciton spin state in single quantum dots. *Physical Review Letters*, v. 106, p. 040504, Janeiro 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.040504>>.
- 85 MONROE, C.; KIM, J. Scaling the ion trap quantum processor. *Science*, v. 339, n. 6124, p. 1164, Mar 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1231298>>.
- 86 NAKAMURA, Y.; PASHKIN, Y. A.; TSAI, J. S. Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box. *Nature*, v. 398, n. 6730, p. 786, Abr 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/19718>>.
- 87 HASSLER, F. et al. Anyonic interferometry without anyons: how a flux qubit can read out a topological qubit. *New Journal of Physics*, v. 12, n. 12, p. 125002, Dez 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/12/125002>>.
- 88 LI, J. et al. Dynamical Autler-Townes control of a phase qubit. *Scientific Reports*, v. 2, Set 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep00645>>.
- 89 DEVORET, M. H.; SCHOELKOPF, R. J. Superconducting circuits for quantum information: An outlook. *Science*, v. 339, n. 6124, p. 1169, Mar 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1231930>>.
- 90 NAYAK, C. et al. Non-Abelian anyons and topological quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, v. 80, n. 3, p. 1083, Sep 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1083>>.
- 91 STERN, A.; LINDNER, N. H. Topological quantum computation - from basic concepts to first experiments. *Science*, v. 339, p. 1179, Março 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1231473>>.
- 92 HECK, B. van. *Quantum computation with Majorana modes in superconducting circuits*. 216 p. Tese (Doutorado) — Leiden University, Maio 2015.
- 93 ZHANG, P.; NORI, F. Coherent manipulation of a Majorana qubit by a mechanical resonator. *Physical Review B*, v. 92, n. 11, Set 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.115303>>.
- 94 LARSEN, T. et al. Semiconductor-nanowire-based superconducting qubit. *Physical Review Letters*, v. 115, n. 12, Set 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.127001>>.
- 95 HOFFMAN, S. et al. Universal quantum computation with hybrid spin-Majorana qubits. *Physical Review B*, v. 94, n. 4, Jul 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.045316>>.
- 96 DEVORET, M. H.; WALLRAFF, A.; MARTINIS, J. M. Superconducting qubits: A short review. 2007.

- 97 MEIER, T.; THOMAS, P.; KOCH, S. W. *Coherent Semiconductor Optics: From Basic Concepts to Nanostructure Applications*. 1. ed. Springer Berlin Heidelberg, 2007. 318 p. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-540-32555-0>>.
- 98 RAMSAY, A. J. A review of the coherent optical control of the exciton and spin states of semiconductor quantum dots. *Semiconductor Science and Technology*, v. 25, n. 10, p. 103001, Set 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0268-1242/25/10/103001>>.
- 99 BORGES, H. S. *Dinâmica coerente de estados quânticos em nanoestruturas semicondutoras acopladas*. 153 p. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2014.
- 100 BONADEO, N. H. Coherent optical control of the quantum state of a single quantum dot. *Science*, v. 282, n. 5393, p. 1473, Nov 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.282.5393.1473>>.
- 101 STIEVATER, T. H. et al. Rabi oscillations of excitons in single quantum dots. *Physical Review Letters*, v. 87, n. 13, Set 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.133603>>.
- 102 KAMADA, H. et al. Exciton Rabi oscillation in a single quantum dot. *Physical Review Letters*, v. 87, n. 24, Nov 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.246401>>.
- 103 NOWACK, K. C. et al. Coherent control of a single electron spin with electric fields. *Science*, v. 318, n. 5855, p. 1430, Nov 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1148092>>.
- 104 GODDEN, T. M. et al. Coherent optical control of the spin of a single hole in an InAs/GaAs quantum dot. *Physical Review Letters*, v. 108, n. 1, Jan 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.017402>>.
- 105 UNOLD, T. et al. Optical Stark effect in a quantum dot: Ultrafast control of single exciton polarizations. *Physical Review Letters*, v. 92, n. 15, p. 157401, Abr 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.157401>>.
- 106 VAMIVAKAS, A. N. et al. Spin-resolved quantum-dot resonance fluorescence. *Nature Physics*, v. 5, n. 3, p. 198, Jan 2009.
- 107 ZRENNER, A. et al. Coherent properties of a two-level system based on a quantum-dot photodiode. *Nature*, v. 418, n. 6898, p. 612–614, Ago 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature00912>>.
- 108 VILLAS-BÔAS, J. M.; GOVOROV, A. O.; ULLOA, S. E. Coherent control of tunneling in a quantum dot molecule. *Physical Review B*, v. 69, n. 12, Mar 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.125342>>.
- 109 GREILICH, A. et al. Optical control of one and two hole spins in interacting quantum dots. *Nature Photonics*, v. 5, n. 11, p. 702, Set 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphoton.2011.237>>.
- 110 COHEN-TANNOUDJI, C. Amazing light. In: \_\_\_\_\_. [S.l.]: Springer New York, 1996. cap. The Autler-Townes Effect Revisited, p. 109–123.

- 111 XU, X. et al. Coherent optical spectroscopy of a strongly driven quantum dot. *Science*, v. 317, n. 5840, p. 929, Ago 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1142979>>.
- 112 SANTOS, J. S. V. d. *Mecanismos de descoerência entre subníveis Zeeman em vapor atômico de césio*. 93 p. Dissertação (Dissertação) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2013. Orientador: Daniel Felinto Pires Barbosa.
- 113 BAUR, M. et al. Measurement of Autler-Townes and Mollow transitions in a strongly driven superconducting qubit. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 24, Jun 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.243602>>.
- 114 AUTLER, S. H.; TOWNES, C. H. Stark effect in rapidly varying fields. *Physical Review*, v. 100, n. 2, p. 703, Out 1955. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.703>>.
- 115 JUNDT, G. et al. Observation of dressed excitonic states in a single quantum dot. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 17, Abr 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.177401>>.
- 116 BOYLE, S. J. et al. Beating of exciton-dressed states in a single semiconductor InGaAs/GaAs quantum dot. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 20, p. 207401, Maio 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.207401>>.
- 117 XU, X. et al. Strong optical field study of a single self-assembled quantum dot. *Solid State Communications*, v. 149, n. 35-36, p. 1479, Sep 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.04.042>>.
- 118 SILLANPÄÄ, M. A. et al. Autler-Townes effect in a superconducting three-level system. *Physical Review Letters*, v. 103, n. 19, Nov 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.193601>>.
- 119 NOVIKOV, S. et al. Autler-Townes splitting in a three-dimensional transmon superconducting qubit. *Physical Review B*, v. 88, n. 6, Ago 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.060503>>.
- 120 LI, H. et al. Electromagnetically induced transparency and Autler-Townes splitting in a superconducting quantum circuit with a four-level V-type energy spectrum. *Foundations of Physics*, v. 45, n. 2, p. 198, Dez 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10701-014-9861-6>>.
- 121 JACQUET, R. et al. Cooper pair splitting and recombination in a nanoSQUID geometry at high transparency. *Physical Review B*, v. 92, n. 23, Dez 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.235429>>.
- 122 SIQUEIRA, E. C. *Transporte por reflexão de Andreev em pontos quânticos duplos acoplados a eletrodos supercondutores e ferromagnéticos*. 204 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.
- 123 CHEVALLIER, D. et al. Current and noise correlations in a double-dot Cooper-pair beam splitter. *Physical Review B*, v. 83, n. 12, Mar 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.125421>>.
- 124 LIU, J.; WANG, J.; ZHANG, F.-C. Controllable nonlocal transport of Majorana fermions with the aid of two quantum dots. *Physical Review B*, v. 90, n. 3, Jul 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.035307>>.

- 125 WANG, P. et al. Cross-correlations mediated by Majorana bound states. *Europhysics Letters*, v. 103, n. 5, p. 57016 p1–p6, Setembro 2013.
- 126 LEIJNSE, M.; FLENSBERG, K. Coupling spin qubits via superconductors. *Physical Review Letters*, v. 111, n. 6, Aug 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.060501>>.
- 127 RECHER, P.; SUKHORUKOV, E. V.; LOSS, D. Andreev tunneling, Coulomb blockade, and resonant transport of nonlocal spin-entangled electrons. *Physical Review B*, v. 63, n. 16, p. 165314, Abr 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.165314>>.
- 128 ELDRIDGE, J. et al. Superconducting proximity effect in interacting double-dot systems. *Physical Review B*, v. 82, n. 18, Nov 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.184507>>.
- 129 DAS, A. et al. High-efficiency Cooper pair splitting demonstrated by two-particle conductance resonance and positive noise cross-correlation. *Nature Communications*, v. 3, p. 1165, Nov 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/ncomms2169>>.
- 130 SCHINDELE, J.; BAUMGARTNER, A.; SCHÖNENBERGER, C. Near-unity cooper pair splitting efficiency. *Physical Review Letters*, v. 109, n. 15, Out 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.157002>>.
- 131 CAO, Z. et al. Currents and current correlations in a topological superconducting nanowire beam splitter. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 111, n. 5, p. 57002, Set 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1209/0295-5075/111/57002>>.
- 132 BORZENETS, I. V. et al. High efficiency CVD graphene-lead (Pb) Cooper pair splitter. *Scientific Reports*, v. 6, n. 1, Mar 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep23051>>.
- 133 ASSUNÇÃO, M. O. et al. Thermal effects on photon-induced quantum transport in a single quantum dot. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 25, n. 13, p. 135301, Mar 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/13/135301>>.
- 134 ETGAR, L. Semiconductor nanocrystals as light harvesters in solar cells. *Materials*, v. 6, n. 2, p. 445, Fev 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/ma6020445>>.
- 135 RABI, I. I. Space quantization in a gyrating magnetic field. *Physical Review*, v. 51, n. 8, p. 652, Abr 1937. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRev.51.652>>.
- 136 SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Revised. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- 137 ASSUNÇÃO, M. O. *Efeitos térmicos em fotodiodos de pontos quânticos semicondutores*. 89 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Julho 2012.
- 138 BRUUS, H.; FLENSBERG, K. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics An Introduction*. Nova York: Oxford University Press, 2004. 435 p.
- 139 KADANOFF, L. P.; BAYM, G. *Quantum Statistical Mechanics*. Reading, Massachussets: W. A. Benjamin, 1962. 203 p. (Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series).

- 140 HAUG, H. J. W.; JAUHO, A.-P. *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Second, substantially revised edition. Berlin: Springer, 2008. 360 p. (Springer Series in Solid-State Sciences, 123).
- 141 DI VENTRA, M. *Electrical Transport in Nanoscale Systems*. Cambridge University Press, 2008. 480 p. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/CBO9780511755606>>.
- 142 KELDYSH, L. V. Diagram technique for nonequilibrium processes. *Soviet Physics JETP*, v. 20, n. 4, p. 1018–1026, Abril 1965.
- 143 SOUZA, F. M. *Transporte Quântico em Spintrônica: corrente e shot noise via funções de Green de não equilíbrio*. 166 p. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.
- 144 LIMA, I. C. C. *Manual Prático de Funções de Green em Física da Matéria Condensada*. [S.l.: s.n.], 2011.
- 145 BARATTO, G. *Solução de Equações Diferenciais Ordinárias Usando Métodos Numéricos*. [S.l.], Fevereiro 2007.
- 146 BORGES, H. S. et al. Robust states in semiconductor quantum dot molecules. *Physical Review B*, v. 81, n. 075322, p. 6, fev 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075322>>.

# APÊNDICE A – Derivação do hamiltoniano da Eq. (2.1) a partir do modelo de Majorana

É possível demonstrar algebricamente que o hamiltoniano 2.1 está diretamente relacionado ao hamiltoniano:

$$H_M = \frac{\varepsilon_M}{2} + \varepsilon_d d^\dagger d + i\varepsilon_M \eta_1 \eta_2 + \lambda(d - d^\dagger) \eta_1. \quad (\text{A.1})$$

O Hamiltoniano  $H_M$  descreve dois Majorana bound states (MBSs), ou estados ligados de Majorana, nas extremidades de um fio quântico supercondutor acoplado a um PQ semicondutor (referências (58)).

Os operadores  $\eta_1$  e  $\eta_2$  são operadores que representam os *quasi-férmions* de Majorana, cuja principal propriedade é  $\eta = \eta^*$ . O hamiltoniano A.1 descreve um sistema com dois desses férmions acoplados através do parâmetro  $\lambda$  a um único nível eletrônico de energia  $\varepsilon_d$  em um PQ, com operadores de criação e aniquilação de férmions nesse nível sendo  $d^\dagger$  e  $d$ . Além disso, o acoplamento dos MBSs através do nanofio é determinado pelo parâmetro  $\varepsilon_M$ . Podemos escrever os operadores  $\eta_1$  e  $\eta_2$  em função de operadores fermiônicos usuais  $f$  da seguinte maneira:

$$\eta_1 = \frac{f + f^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad (\text{A.2})$$

$$\eta_2 = \frac{i(f - f^\dagger)}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.3})$$

Os operadores  $f$  e  $f^\dagger$  respeitam as relações de anticomutação fermiônicas usuais:

$$\begin{aligned} \{f, f\} &= 0 \rightarrow ff = 0, \\ \{f^\dagger, f^\dagger\} &= 0 \rightarrow f^\dagger f^\dagger = 0, \\ \{f, f^\dagger\} &= 1 \rightarrow ff^\dagger = 1 - f^\dagger f. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Vamos tomar o hamiltoniano do sistema DPQ/SC na equação (2.1) do capítulo 2:

$$H_{S1} = \varepsilon_1 d_1^\dagger d_1 + \varepsilon_2 d_2^\dagger d_2 + t_q d_1^\dagger d_2 + t_q^* d_2^\dagger d_1 + \Delta d_1^\dagger d_2^\dagger + \Delta^* d_2 d_1. \quad (\text{A.5})$$

Invertendo as relações A.2 e A.3 encontramos as definições dos operadores de criação e

aniquilação  $f^\dagger$  e  $f$ , em função dos operadores de Majorana,  $\eta_1$  e  $\eta_2$ :

$$f = \frac{\eta_1 - i\eta_2}{\sqrt{2}}, \quad (\text{A.6})$$

$$f^\dagger = \frac{\eta_1 + i\eta_2}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.7})$$

Assumindo que  $f$  e  $f^\dagger$  são operadores equivalentes de  $d_1$  e  $d_1^\dagger$ , respectivamente, podemos substituir as relações A.6 e A.7 no hamiltoniano A.5. Após aplicarmos a propriedade distributiva temos:

$$\begin{aligned} H_{S1} = & \frac{\varepsilon_1}{2} (\eta_1^2 + i\eta_1\eta_2 - i\eta_2\eta_1 + \eta_2^2) + \varepsilon_2 d_2^\dagger d_2 + \frac{t_q}{\sqrt{2}} (\eta_1 d_2 + i\eta_2 d_2) + \\ & \frac{t_q^*}{\sqrt{2}} (d_2^\dagger \eta_1 - i d_2^\dagger \eta_2) + \frac{\Delta}{\sqrt{2}} (\eta_1 d_2^\dagger + i\eta_2 d_2^\dagger) + \frac{\Delta^*}{\sqrt{2}} (d_2 \eta_1 - i d_2 \eta_2). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Podemos definir algumas relações de anticomutação envolvendo  $\eta_1$  e  $\eta_2$ :

$$\begin{aligned} \{\eta_1, \eta_1\} &= \eta_1 \eta_1 + \eta_1 \eta_1 = 2\eta_1^2 = 2 \left( \frac{d_1 + d_1^\dagger}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{d_1 + d_1^\dagger}{\sqrt{2}} \right) = \{d_1, d_1^\dagger\} = 1; \\ \{\eta_2, \eta_2\} &= \eta_2 \eta_2 + \eta_2 \eta_2 = 2\eta_2^2 = 2 \left( i \frac{d_2 - d_2^\dagger}{\sqrt{2}} \right) \left( i \frac{d_2 - d_2^\dagger}{\sqrt{2}} \right) = -(-\{d_2, d_2^\dagger\}) = 1; \\ \{\eta_1, \eta_2\} &= \eta_1 \eta_2 + \eta_2 \eta_1 = \frac{(d_1 + d_1^\dagger) i (d_2 - d_2^\dagger)}{2} \\ &+ \frac{i (d_1 - d_1^\dagger) (d_2 + d_2^\dagger)}{2} = \frac{i}{2} ([d_1, d_1^\dagger] - [d_2, d_2^\dagger]) = 0; \\ \{\eta_1, \eta_2\} &= 0 \rightarrow \eta_1 \eta_2 = -\eta_2 \eta_1. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Substituindo A.9 no hamiltoniano parcial A.8 e fazendo  $t_q = t_q^*$  e  $\Delta = \Delta^*$ :

$$\begin{aligned} H_{S1} = & \frac{\varepsilon_1}{2} (1 + 2i\eta_1\eta_2) + \varepsilon_2 d_2^\dagger d_2 + \frac{t_q}{\sqrt{2}} (-d_2 \eta_1 + d_2^\dagger \eta_1) + \\ & \frac{it_q}{\sqrt{2}} (-d_2 \eta_2 - d_2^\dagger \eta_2) + \frac{\Delta}{\sqrt{2}} (d_2 \eta_1 - d_2^\dagger \eta_1) + \frac{i\Delta}{\sqrt{2}} (-d_2 \eta_2 - d_2^\dagger \eta_2). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Para inverter a ordem dos operadores em A.10 foi preciso calcular:  $\{d_2, \eta_1\} = 0$ ,  $\{d_2, \eta_2\} = 0$ ,  $\{d_2^\dagger, \eta_1\} = 0$  e  $\{d_2^\dagger, \eta_2\} = 0$ .

Se tomarmos os acoplamentos como  $t_q = -\lambda/\sqrt{2}$  e  $\Delta = +\lambda/\sqrt{2}$ , as energias  $\varepsilon_1 = \varepsilon_M$  e  $\varepsilon_2 = \varepsilon_d$ , com  $d_2 = d$  e  $d_2^\dagger = d^\dagger$ , chegamos a:

$$+\frac{i\lambda}{2}(d\eta_2 + d^\dagger\eta_2) - \frac{i\lambda}{2}(d\eta_2 + d^\dagger\eta_2) + \varepsilon_d d^\dagger d. \quad (\text{A.11})$$

Após alguma simplificação da equação A.11 teremos:

$$H = i\varepsilon_M \eta_1 \eta_2 + \lambda(d - d^\dagger)\eta_1 + \frac{\varepsilon_M}{2} + \varepsilon_d d^\dagger d. \quad (\text{A.12})$$

## APÊNDICE B – Transformação unitária sobre o hamiltoniano da Eq. (2.5).

Neste apêndice apresentamos a transformação unitária realizada sobre o hamiltoniano do sistema DPQ/SC/Luz (ponto quântico duplo acoplado a um supercondutor com aplicação de luz)  $H_s$  Eq. (2.5) no capítulo 2, com o intuito de remover as exponenciais temporais que acompanham os termos ópticos (com  $\Omega$ ). O hamiltoniano em questão está escrito em uma base de muitos corpos, para a qual os índices dos vetores  $\{|n_1 n_2 n_v\rangle\}$  representam as ocupações dos níveis  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_v$ , respectivamente. Como nosso modelo contempla apenas um índice de spin, a base em questão é formada por oito vetores:  $\{|000\rangle |100\rangle |010\rangle |001\rangle |101\rangle |011\rangle |110\rangle |111\rangle\}$ . Rescrevemos aqui o hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
H_s = & \varepsilon_1 |100\rangle\langle 100| + \varepsilon_2 |010\rangle\langle 010| + \varepsilon_v |001\rangle\langle 001| + t_q |100\rangle\langle 010| + \Delta |110\rangle\langle 000| \\
& + t_q^* |010\rangle\langle 100| + \Delta^* |000\rangle\langle 110| + \Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| + \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\
& + (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) |110\rangle\langle 110| + (\varepsilon_2 + \varepsilon_v) |011\rangle\langle 011| + (\varepsilon_1 + \varepsilon_v) |101\rangle\langle 101| \\
& + t_q |101\rangle\langle 011| + \Delta |111\rangle\langle 001| + t_q^* |011\rangle\langle 101| + \Delta^* |001\rangle\langle 111| \\
& + \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| + \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110| + (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_v) |111\rangle\langle 111|. \tag{B.1}
\end{aligned}$$

A partir de (B.1) desejamos obter um hamiltoniano transformado  $\hat{H}_s$ , tal que:

$$\hat{H}_s = U H_s U^\dagger + i U^\dagger \frac{dU}{dt}. \tag{B.2}$$

Para desenvolver o primeiro termo da equação (B.2) e encontrar a transformação unitária  $U$  podemos utilizar o lema de Baker-Hausdorff:

$$e^{i\hat{G}\lambda} H e^{-i\hat{G}\lambda} = H + i\lambda [\hat{G}, H] + \frac{i^2 \lambda^2}{2!} [\hat{G}, [\hat{G}, H]] + \frac{i^3 \lambda^3}{3!} [\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, H]]] + \dots \tag{B.3}$$

Vamos definir  $\hat{G}$  a partir dos elementos diagonais da base:

$$\begin{aligned}
\hat{G} = & \lambda_1 |100\rangle\langle 100| + \lambda_2 |010\rangle\langle 010| + \lambda_3 |001\rangle\langle 001| + \lambda_4 |110\rangle\langle 110| + \lambda_5 |011\rangle\langle 011| \\
& + \lambda_6 |101\rangle\langle 101| + \lambda_7 |111\rangle\langle 111| + \lambda_8 |000\rangle\langle 000|. \tag{B.4}
\end{aligned}$$

Agora calculamos o comutador  $[\hat{G}, H_s]$  (termo por termo):

$$\lambda_1 [|100\rangle\langle 100|, H_s] = \lambda_1 (t_q |100\rangle\langle 010| - t_q^* |010\rangle\langle 100| + \Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| - \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100|),$$

$$\lambda_2 [|010\rangle\langle 010|, H_s] = \lambda_2 (-t_q |100\rangle\langle 010| + t_q^* |010\rangle\langle 100|),$$

$$\lambda_3 [|001\rangle\langle 001|, H_s] = \lambda_3 (-\Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| + \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| - \Delta |111\rangle\langle 001| + \Delta^* |001\rangle\langle 111|),$$

$$\begin{aligned}
\lambda_4 [|110\rangle\langle110|, H_s] &= \lambda_4 \left( +\Delta|110\rangle\langle000| - \Delta^*|000\rangle\langle110| + \Omega e^{-i\omega t}|110\rangle\langle011| - \Omega^* e^{+i\omega t}|011\rangle\langle110| \right), \\
\lambda_5 [|011\rangle\langle011|, H_s] &= \lambda_5 \left( -t_q|101\rangle\langle011| + t_q^*|011\rangle\langle101| - \Omega e^{-i\omega t}|110\rangle\langle011| + \Omega^* e^{+i\omega t}|011\rangle\langle110| \right), \\
\lambda_6 [|101\rangle\langle101|, H_s] &= \lambda_6 \left( +t_q|101\rangle\langle011| - t_q^*|011\rangle\langle101| \right), \\
\lambda_7 [|111\rangle\langle111|, H_s] &= \lambda_7 (+\Delta|111\rangle\langle001| - \Delta^*|001\rangle\langle111|), \\
\lambda_8 [|000\rangle\langle000|, H_s] &= \lambda_8 (-\Delta|110\rangle\langle000| - \Delta^*|000\rangle\langle110|). \tag{B.5}
\end{aligned}$$

A soma de todos os resultados em (B.5) será usada como resultado do primeiro comutador do lema (equação (B.3)), isto é:

$$\begin{aligned}
[\hat{G}, H_s] &= \lambda_1 \left( t_q|100\rangle\langle010| - t_q^*|010\rangle\langle100| + \Omega e^{-i\omega t}|100\rangle\langle001| - \Omega^* e^{+i\omega t}|001\rangle\langle100| \right) \\
&\quad + \lambda_2 \left( -t_q|100\rangle\langle010| + t_q^*|010\rangle\langle100| \right) \\
&\quad + \lambda_3 \left( -\Omega e^{-i\omega t}|100\rangle\langle001| + \Omega^* e^{+i\omega t}|001\rangle\langle100| - \Delta|111\rangle\langle001| + \Delta^*|001\rangle\langle111| \right) \\
&\quad + \lambda_4 \left( +\Delta|110\rangle\langle000| - \Delta^*|000\rangle\langle110| + \Omega e^{-i\omega t}|110\rangle\langle011| - \Omega^* e^{+i\omega t}|011\rangle\langle110| \right) \\
&\quad + \lambda_5 \left( -t_q|101\rangle\langle011| + t_q^*|011\rangle\langle101| - \Omega e^{-i\omega t}|110\rangle\langle011| + \Omega^* e^{+i\omega t}|011\rangle\langle110| \right) \\
&\quad + \lambda_6 \left( +t_q|101\rangle\langle011| - t_q^*|011\rangle\langle101| \right) + \lambda_7 (+\Delta|111\rangle\langle001| - \Delta^*|001\rangle\langle111|) \\
&\quad + \lambda_8 (-\Delta|110\rangle\langle000| - \Delta^*|000\rangle\langle110|). \tag{B.6}
\end{aligned}$$

Na expressão (B.6) alguns termos (sem dependência temporal) podem ser cancelados. Para tanto, algumas relações entre os valores de  $\lambda_i$  podem ser traçadas:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \lambda_2, & \lambda_3 &= \lambda_7, & \lambda_3 &= -\lambda_1; \\
\lambda_4 &= \lambda_8, & \lambda_5 &= -\lambda_4; & \lambda_5 &= \lambda_6. \tag{B.7}
\end{aligned}$$

Se fizermos  $\lambda_1 = \lambda_0$ , então,  $\lambda_2 = \lambda_0$ ,  $\lambda_3 = -\lambda_0$ ,  $\lambda_4 = \lambda_0$ ,  $\lambda_5 = -\lambda_0$ ,  $\lambda_6 = -\lambda_0$ ,  $\lambda_7 = -\lambda_0$  e  $\lambda_8 = \lambda_0$ . Com esses índices determinamos quem é o operador  $\hat{G}$  em (B.4). Dessa forma podemos escrever o operador de evolução  $U$ :

$$\begin{aligned}
U &= \exp(i\lambda_0[+|100\rangle\langle100| + |010\rangle\langle010| - |001\rangle\langle001| + |110\rangle\langle110| \\
&\quad - |011\rangle\langle011| - |101\rangle\langle101| - |111\rangle\langle111| + |000\rangle\langle000|]). \tag{B.8}
\end{aligned}$$

Agora calculamos os comutadores para o lema em (B.3). O primeiro é:

$$\begin{aligned}
[1] &= [\hat{G}, H_s] = (2\Omega e^{-i\omega t}|100\rangle\langle001| - 2\Omega^* e^{+i\omega t}|001\rangle\langle100| \\
&\quad + 2\Omega e^{-i\omega t}|110\rangle\langle011| - 2\Omega^* e^{+i\omega t}|011\rangle\langle110|). \tag{B.9}
\end{aligned}$$

O segundo:

$$\begin{aligned} [2] &= \left[ \hat{G}, \left[ \hat{G}, H_s \right] \right] = \left[ \hat{G}, [1] \right] = (4\Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| + 4\Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\ &+ 4\Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| + 4\Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110|). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

O terceiro comutador em (B.3) fica:

$$\begin{aligned} [3] &= \left[ \hat{G}, \left[ \hat{G}, \left[ \hat{G}, H_s \right] \right] \right] = \left[ \hat{G}, [2] \right] = (8\Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| - 8\Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\ &+ 8\Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| - 8\Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110|). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Reescrevendo o lema em termos de [1], [2] e [3] teríamos:

$$e^{i\hat{G}\lambda} H e^{-i\hat{G}\lambda} = H + i\lambda [1] + \frac{i^2 \lambda^2}{2!} [2] + \frac{i^3 \lambda^3}{3!} [3] + \dots \quad (\text{B.12})$$

Fazendo as devidas substituições:

$$\begin{aligned} e^{i\hat{G}\lambda_0} H_s e^{-i\hat{G}\lambda_0} &= H'_s + \Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| + \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\ &+ \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| + \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110| + i\lambda_0 2(\Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| - \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\ &+ \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| - \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110|) + \frac{i^2 \lambda_0^2 4}{2!} (\Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| + \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\ &+ \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| + \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110|) + \frac{i^3 \lambda_0^3 8}{3!} (\Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| - \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \\ &+ \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| - \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110|) + \dots, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

nesse caso,  $H'_s$  são os termos do hamiltoniano (B.1) que não acompanham exponenciais temporais (estes foram escritos explicitamente como parte do termo  $H_s$  na equação (B.12). Reunindo termos similares em (B.13) teremos:

$$\begin{aligned} e^{i\hat{G}\lambda_0} H_s e^{-i\hat{G}\lambda_0} &= H'_s + \Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| \left( 1 + 2i\lambda_0 + \frac{4i^2 \lambda_0^2}{2!} + \frac{8i^3 \lambda_0^3}{3!} + \dots \right) \\ &+ \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| \left( 1 - 2i\lambda_0 + \frac{4i^2 \lambda_0^2}{2!} - \frac{8i^3 \lambda_0^3}{3!} + \dots \right) \\ &+ \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| \left( 1 + 2i\lambda_0 + \frac{4i^2 \lambda_0^2}{2!} + \frac{8i^3 \lambda_0^3}{3!} + \dots \right) \\ &+ \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110| \left( 1 - 2i\lambda_0 + \frac{4i^2 \lambda_0^2}{2!} - \frac{8i^3 \lambda_0^3}{3!} + \dots \right). \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Sabendo que  $\lambda_0 = \omega t/2$ , reescrevemos os termos entre parêntesis em (B.14):

$$\begin{aligned} & \left( 1 - \frac{2i\omega t}{2} + \frac{4i^2(\omega t)^2}{4 \cdot 2!} - \frac{8i^3(\omega t)^3}{8 \cdot 3!} + \dots \right), \\ & \left( 1 - i\omega t + \frac{i^2(\omega t)^2}{2!} - \frac{i^3(\omega t)^3}{3!} + \dots \right), \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

que é a expansão de uma função exponencial  $e^{-i\omega t}$ . Sendo assim, (B.14) fica:

$$\begin{aligned} e^{i\hat{G}\frac{\omega t}{2}} H_s e^{-i\hat{G}\frac{\omega t}{2}} &= H_s' + \Omega e^{-i\omega t} |100\rangle\langle 001| e^{+i\omega t} + \Omega^* e^{+i\omega t} |001\rangle\langle 100| e^{-i\omega t} \\ &+ \Omega e^{-i\omega t} |110\rangle\langle 011| e^{+i\omega t} + \Omega^* e^{+i\omega t} |011\rangle\langle 110| e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

onde as exponenciais se cancelam.

O segundo do termo do (B.3) pode ser calculado lembrando (B.8):

$$\begin{aligned} iU^\dagger \frac{dU}{dt} &= ie^{\left[\frac{-i\omega t}{2}\hat{G}\right]} \cdot \frac{+i\omega\hat{G}}{2} e^{\left[\frac{+i\omega t}{2}\hat{G}\right]}, \\ iU^\dagger \frac{dU}{dt} &= \frac{-\omega}{2} e^{\left[\frac{-i\omega t}{2}\hat{G} + \frac{+i\omega t}{2}\hat{G}\right]} = \frac{\omega\hat{G}e^0}{2} = \frac{-\omega\hat{G}}{2}, \\ iU^\dagger \frac{dU}{dt} &= \frac{\omega}{2} [|100\rangle\langle 100| + |010\rangle\langle 010| - |001\rangle\langle 001| + |110\rangle\langle 110| \\ &\quad - |011\rangle\langle 011| - |101\rangle\langle 101| - |111\rangle\langle 111| + |000\rangle\langle 000|]. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

A consequência dessa transformação é o surgimento de um termo  $\pm\omega/2$  nos termos da diagonal.

Finalmente, o hamiltoniano  $H_s$  transformado é dado pela soma dos resultados (B.16) e (B.17). Na forma matricial temos:

$$\hat{H}_s = \begin{bmatrix} \delta_3/2 & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta_1/2 & \Omega^* & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & \Omega & \delta_1/2 & t_q & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_q^* & \delta_2/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta^* & 0 & 0 & 0 & (2\varepsilon_2 + \delta_1)/2 & \Omega^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega & (2\varepsilon_2 - \delta_1)/2 & t_q^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_q & (2\varepsilon_2 - \delta_2)/2 & 0 \\ 0 & \Delta^* & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (2\varepsilon_2 - \delta_3)/2 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.18})$$

aqui substituímos  $\delta_1 = \omega_{1v} - \omega$ ,  $\delta_2 = \omega_{21} - \delta_1$  e  $\delta_3 = 2\varepsilon_1 - \delta_1$ , sendo  $\omega_{21} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$  e  $\omega_{1v} = \varepsilon_1 - \varepsilon_v$ .