



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

TESE DE DOUTORADO

ALGORITMOS NUMÉRICOS DE MATRIZES ALEATÓRIAS
APLICADOS A SISTEMAS MESOSCÓPICOS

por

Francisco Assis Gois de Almeida

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

Banca examinadora:

Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo (Orientador - UFPE)
Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho (DF - UFPE)
Prof. Mauro Copelli Lopes da Silva (DF - UFPE)
Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (IF - UFAL)
Prof. Peter Alexander Bleinroth Schulz (IFGW - Unicamp)

Recife - PE, Brasil
Fevereiro - 2010

Almeida, Francisco Assis Gois de
Algoritmos numéricos de matrizes aleatórias
aplicados a sistemas mesoscópicos / Francisco Assis
Gois de Almeida. - Recife : O Autor, 2010.
xxi, 129 folhas: il. fig. tab.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN. Física, 2010.

Inclui bibliografia e apêndice.

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

530.4 CDD (22.ed.) FQ 2010-011



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

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

Francisco Assis Gois de Almeida

ALGORITMOS NUMÉRICOS DE MATRIZES ALEATÓRIAS APLICADOS A SISTEMAS MESOSCÓPICOS

A Banca Examinadora composta pelos Professores Antônio Murilo Santos Macêdo (Presidente e Orientador), Renê Rodrigues Montenegro Filho, Mauro Copelli Lopes da Silva, todos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Peter Alexander Bleinroth Schulz, do Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, consideram o candidato:

Aprovado

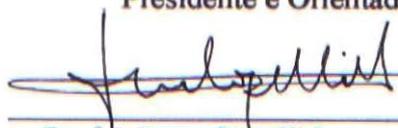
Reprovado

Em exigência

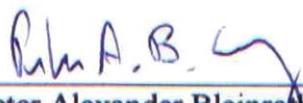
Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco em vinte e cinco de fevereiro de dois mil e dez.


Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo
Presidente e Orientador


Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho


Prof. Mauro Copelli Lopes da Silva


Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Peter Alexander Bleinroth Schulz

*A meus pais, Manoel Aurelino e Maria Altair,
minha esposa, Ana Salete,
e minha filha, Lara.*

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a **Deus** pela minha existência e por me guiar diante das dificuldades pessoais e acadêmicas que passei até chegar na conclusão deste doutorado.

Durante tantos anos de graduação, mestrado e doutorado, recebi amor e incentivo dos **meus pais**. Mesmo com idades avançadas e me tendo como único filho, entenderam e apoiaram meu afastamento durante quatro anos em Recife. Agradeço muito por isso e por muito mais.

Também sou muito grato a minha esposa **Salete** por respeitar este afastamento, me incentivando e sempre demonstrando o seu amor por mim. Agradeço a todos da família de Salete que deram suporte a minha pequena e amada filha **Lara** durante minha ausência, em especial à **Sra. Valdenora**.

O prof. **Antônio Murilo** foi um orientador muito dedicado em passar seus conhecimentos e em promover o meu desenvolvimento profissional. Esteve sempre disposto a debater assuntos de pesquisa, inclusive por telefone e em horários fora do seu expediente. Ele também foi muito compreensivo com problemas pessoais durante o meu doutorado. Por tudo isso, me sinto satisfeito, grato e honrado por ter sido orientado por uma pessoa tão ética e competente.

Tenho muita gratidão ao prof. **Cláudio Macêdo**, que além de ser um dos meus maiores exemplos de ética profissional, me proporcionou uma boa base de conhecimentos científicos e guiou meu crescimento acadêmico durante o meu bacharelado e mestrado em física. Também sou grato ao prof. **André Maurício** pelas colaborações científicas e por ter sido uma pessoa importante no meu encaminhamento acadêmico.

O departamento de física da UFPE sempre forneceu excelentes condições para o estudo e para o desenvolvimento das atividades científicas com muito conforto. Sou grato a **todos professores e funcionários do DF**.

Agradeço também:

- aos meus colegas do grupo de física mesoscópica pelas contribuições científicas e por sempre estarem dispostos a ouvir e ajudar: **Sergio Rodríguez Pérez, Gerson Cortês, Jorge Gabriel, Anderson Barbosa e Fredson Braz**;

- aos companheiros de curso pelo coleguismo: **Paulo Renato, Vladimir e Plínio**;
- aos amigos de Aracaju que de alguma forma me apoiaram: **Ramon Ayres, Tiago Araújo e Clélio Brazil**;
- a meu primo **Nilo** e à **Sra. Maria José** pelo apoio dado aos meus pais durante minha ausência;
- aos amigos que fiz em Recife, por terem me dado atenção e companhia durante quatro anos longe dos meus parentes: **Edsom, Felipe, Leonardo, Marcos, Wagner, Miro, Neuri, Cinthia, Claudilene, Denise, Jana e Samira**. Em especial, agradeço a **Ana Ruth** por ter me proporcionado entender de forma tão perfeita o significado da palavra amizade.
- a **todos meus parentes e amigos** que sempre torceram para que eu conseguisse realizar o sonho de obter o título de doutor.

Por fim, agradeço ao **CNPq** pelo apoio financeiro.

*I am he as you are he as you are me
and we are all together.*

—LENNON/MCCARTNEY (I am the Walrus, 1967)

RESUMO

O ponto quântico caótico (PQC) é um sistema fundamental para o estudo do transporte quântico em sistemas mesoscópicos. Experimentalmente, é possível acoplar PQC's formando redes de diversas topologias. Neste trabalho, desenvolvemos algoritmos para a concatenação das matrizes de espalhamentos dos PQC's de uma rede de topologia arbitrária, e assim, encontramos a matriz de espalhamento efetiva do sistema. Com o formalismo de Landauer-Büttiker, relacionamos os observáveis de transporte à matriz de espalhamento do sistema. Para concatenações em série dos PQC's, usamos o método da matriz de transferência ou uma parametrização de estube. Para concatenar em paralelo, desenvolvemos uma operação algébrica que serve para matrizes de transferência ou de espalhamento. Implementamos estes algoritmos numericamente e, através da teoria de matrizes aleatórias, simulamos a estatística de contagem de carga para três sistemas físicos na aproximação de quase-partículas independentes e na presença de coerência de fase: um único PQC, uma cadeia de PQC's e um anel de quatro PQC's. Estudamos a eficiência numérica dos nossos algoritmos e mostramos que eles são mais eficientes que os baseados na abordagem hamiltoniana. Obtemos as distribuições dos cumulantes de transferência de carga (CTC's) para os três sistemas, variando alguns dos seus parâmetros: simetrias de reversibilidade temporal, número de canais de espalhamento e transparências dos contatos. Comparamos nossa simulação com resultados já conhecidos na literatura, principalmente para o regime semiclássico. Neste caso, através de métodos de inferência bayesiana, conseguimos obter com grande precisão correções devido à localização fraca e variâncias de alguns CTC's. Além disso, exploramos o limite quântico extremo, onde as distribuições dos CTC's apresentam não-analiticidades, as quais justificamos através de um argumento geométrico, achando explicitamente os valores dos CTC's onde essas não-analiticidades podem aparecer. Observamos algumas semelhanças entre distribuições de condutância para sistemas com diferentes parâmetros, onde os resultados sugerem uma aproximada lei de escala clássica (lei de Ohm), a qual torna estas distribuições muito próximas. Uma característica marcante das discussões dos resultados neste trabalho é a caracterização do regime de transporte através das distribuições dos CTC's.

Palavras-chave: Física mesoscópica, estatística de contagem de carga, limite quântico extremo, redes de pontos quânticos, simulação computacional.

ABSTRACT

The chaotic quantum dot (CQD) is fundamental to study quantum transport in mesoscopic systems. It is experimentally possible to connect CQDs to build networks of arbitrary topologies. In this work, we developed algorithms to concatenate the scattering matrices of a CQDs network of arbitrary topology, finding the effective scattering matrix of the system. We relate the transport observables to the scattering matrix of the system through the Landauer-Büttiker formalism. We perform concatenations in series using the transfer matrix method or a stub parameterization. To concatenate in parallel we developed an algebraic operation applicable to transfer or scattering matrices. We numerically implemented these algorithms and using random matrix theory we simulated the charge counting statistics for three distinct systems, with in the approximation of independent quasi-particles and in the presence of phase coherence: a single CQD, a linear chain of CQDs and a four-CQD ring. We studied the numerical efficiency of our algorithms, showing that they are more efficient than those based on the Hamiltonian approach. We obtained the distributions of the charge transfer cumulants (CTCs) for three systems, varying some of their parameters: time-reversal symmetry, number of scattering channels and transparencies of the contacts. We compared our simulations with known results in the literature, especially for the semiclassical regime. In this case, we used methods of Bayesian inference to obtain accurate values for weak localization corrections and variances of some CTCs. Furthermore, we explored the extreme quantum limit, where the distributions of the CTCs present nonanalyticities that we justify through a geometrical argument, obtaining the explicit values of the CTCs where the nonanalyticities can appear in their distributions. We noticed some similarities between the conductance distributions for systems with different parameters, where the results suggest an approximate classical scaling law (Ohm's law), which makes these distributions closer. A central feature of the discussions about the results in this work is the characterization of the transport regime through CTC distributions.

Keywords: Mesoscopic physics, charge counting statistic, extreme quantum limit, quantum dot network, computer simulation.

SUMÁRIO

Capítulo 1—Transporte quântico em sistemas mesoscópicos	1
1.1 Tunelamento quântico	2
1.2 Escalas características	3
1.2.1 Comprimento de onda de Fermi	3
1.2.2 Caminho livre médio	4
1.2.3 Comprimento de relaxação de fase	5
1.3 Ponto de contato quântico	6
1.4 Ponto quântico caótico	12
1.5 Matriz de espalhamento	13
1.6 Estatística de contagem de carga	14
1.6.1 A fórmula de Landauer	15
1.6.2 Contagem de elétrons	16
1.6.3 A fórmula de Levitov-Lesovik	18
1.6.4 Cumulantes de transferência de carga	19
1.7 Limite clássico: lei de Ohm	21
1.8 Distribuição dos autovalores de transmissão	24
1.9 Interferência quântica: localização fraca	27
1.10 Flutuações universais	28
1.11 Caracterização dos regimes de transporte	30
1.12 Métodos para estudar transporte em sistemas mesoscópicos	32
1.13 Sumário geral da tese	34
Capítulo 2—A teoria de matrizes aleatórias	36
2.1 Reversão temporal	37
2.2 O ensemble gaussiano	38
2.2.1 Classes de universalidade	38
2.2.2 Distribuição de probabilidade	40

2.2.3	Geração numérica	40
2.3	O ensemble circular	41
2.3.1	Classes de universalidade	41
2.3.2	Medida de Haar	42
2.3.3	Geração numérica	43
2.4	Sumário	43
Capítulo 3—Algoritmos de transporte via teoria de matrizes aleatórias		44
3.1	Abordagem hamiltoniana	45
3.2	Abordagem da matriz de espalhamento	47
3.2.1	Concatenação em paralelo	47
3.2.2	Concatenação em série	49
3.2.2.1	Matriz de transferência	49
3.2.2.2	Estube	51
3.3	Sumário	54
Capítulo 4—Distribuições de cumulantes de transferência de carga num ponto quântico não-ideal		56
4.1	Implementação numérica	56
4.2	Estatística de contagem de carga	58
4.3	Semelhanças entre distribuições de condutância	71
4.4	Sumário	73
Capítulo 5—Inferência bayesiana		75
5.1	O teorema de Bayes	75
5.2	Regressão linear bayesiana	77
5.3	Localização fraca	80
5.4	Sumário	81
Capítulo 6—Transporte em redes de pontos quânticos		82
6.1	Cadeia linear de pontos quânticos	82
6.1.1	Implementação numérica	82
6.1.2	Estatística de contagem de carga	85
6.2	Anel de quatro pontos quânticos	92

SUMÁRIO	xii
6.2.1 Implementação numérica	92
6.2.2 Estatística de contagem de carga	94
6.3 Semelhanças entre distribuições de condutância	97
6.4 Sumário	98
Capítulo 7—Não-analiticidades nas distribuições dos cumulantes de transferência de carga	100
7.1 Um único canal de espalhamento aberto	100
7.2 Distribuição geométrica	101
7.3 Sumário	106
Capítulo 8—Conclusões e perspectivas	109
Apêndice A—Distribuição gaussiana de matrizes aleatórias	112
Apêndice B—Parametrização de Box-Müller	114
Apêndice C—Parametrização de Hurwitz e algoritmo para gerar matrizes do ECU	115
Apêndice D—Análise de eficiência numérica	117
Apêndice E—A matriz de transferência	119
Apêndice F—Concatenação em série de duas matrizes de espalhamento	121
Apêndice G—Unitariedade na concatenação via estube	123

LISTA DE FIGURAS

1.1	Ilustração conceitual de um experimento de interferência. Um feixe de elétrons é separado em dois caminhos distintos que se encontram logo em seguida. Figura retirada da ref. [2].	5
1.2	Ponto de contato quântico. O cinza mais claro representa um gás de elétrons bidimensional. O cinza mais escuro é a constricção impenetrável de largura L e abertura de tamanho W . Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada para que ocorra o transporte dos elétrons da esquerda para a direita.	7
1.3	Ponto de contato adiabático. A variação na largura da constricção provoca uma barreira de potencial efetiva dependente do canal de propagação. Em uma dada energia, somente alguns canais podem ultrapassar a barreira, os quais são abertos. Em (c), as linhas tracejadas representam os canais fechados e as sólidas, os canais abertos. Figura retirada da ref. [1].	7
1.4	Reservatórios macroscópicos em equilíbrio termodinâmico nas extremidades de um condutor mesoscópico, cada um caracterizado pelo seu potencial eletroquímico.	9
1.5	Bandas de condução e de valência alinhadas com uma junção de um Al-GaAs (semicondutor tipo n) com um GaAs (semicondutor intrínseco) (a) antes e (b) depois da transferência de carga. Figura retirada da ref. [2].	11
1.6	Condutância versus potencial do portão de voltagem do sistema descrito pela fig. 1.5. Figura retirada da ref. [5].	12
1.7	Em (a), um ponto quântico construído sobre um GE-2D e em (b), sua visão clássica. O ponto quântico tem analogia clássica a uma cavidade na qual os elétrons são refletidos nas fronteiras, semelhante a uma mesa de bilhar. Figura retirada da ref. [8].	13

1.8	Estrutura da matriz de espalhamento. A onda incidente no canal 2 vindo da esquerda com amplitude 1 é separada em amplitudes transmitidas e refletidas em todos os canais de forma misturada. As flechas pretas ilustram os canais em que é possível a onda se propagar, indicando a direção de propagação. As brancas representam a impossibilidade da propagação da onda naquele canal com o sentido indicado. Figura retirada da ref. [1].	14
1.9	Junção dupla de tunelamento em (a) e o diagrama de circuito equivalente em (b). Figura retirada da ref. [1].	21
1.10	Possíveis processos de transmissão pelas duas barreiras em (a). A transmissão depende fortemente do deslocamento de fase χ ou equivalentemente, da energia E . Em (b), a linha horizontal tracejada é a transmissão promediada em χ . Figura retirada da ref. [1].	22
1.11	Um grande número de canais causa promediação nas propriedades de transporte. As linhas tracejadas são as transmissões de seis canais independentes com fases aleatórias. A linha sólida é a média da transmissão sobre os seis canais. Figura retirada da ref. [1].	23
1.12	Condutância em função de um campo magnético perpendicular aplicado a um fio de ouro quase-unidimensional. A média sobre as flutuações está representada pela linha clara em torno de $372,3e^2/h$. O desvio padrão está representado por metade da largura em cinza em torno da média e é da ordem de $0,6e^2/h$. Figura retirada da ref. [10].	29
3.1	Visão esquemática de um ponto quântico. Cada guia é caracterizado pelo número de canais de espalhamento abertos N_1 e N_2 . Γ_1 e Γ_2 são as transparências das barreiras. As simetrias físicas da dinâmica dos elétrons na cavidade caótica estão rotuladas por β	44
3.2	Concatenação em paralelo. Em (a), L centros espalhadores em paralelo e em (b), o centro espalhador efetivo da concatenação dos L centros.	48
3.3	Concatenação em série via matriz de transferência. Em (a), L centros espalhadores em série e em (b), o centro espalhador efetivo da concatenação dos L centros.	50

3.4 Concatenação em série de três centros espalhadores através de uma transformação de estube. Em (a), os três centros espalhadores em série. Em (b), o guia 3 gira em torno do centro espalhador 2 até formar o sistema (c), onde o centro A é a concatenação em paralelo dos centros 1 e 3. Ainda em (c), o centro B é um espalhador entre o guia efetivo da esquerda devido ao sistema em paralelo e um guia fictício à direita, com ${}^B\mathbf{r} = {}^2\mathbf{S}$, ${}^B\mathbf{r}' = \mathbf{1}$ e ${}^B\mathbf{t}' = \mathbf{0} = {}^B\mathbf{t}$. Em (d), a concatenação em série dos centros A e B forma um estube caracterizado por ${}^C\mathbf{S}$. Em (e), a separação dos guias 1 e 4 desfaz a transformação de estube. Em (f) o centro efetivo da concatenação do sistema em (a) é obtido através do bloco de reflexão do centro C, $\mathbf{S} = {}^C\mathbf{r}$. 52

4.1 Diagrama de centros de espalhamento para um ponto quântico. As barreiras são representadas por suas transparências Γ_1 e Γ_2 . A cavidade caótica é caracterizada pelo seu índice de simetria β 57

4.2 Distribuições de condutância e de potência do ruído de disparo para um ponto quântico com contatos ideais. Os números rotulando as curvas são os valores de N_2 , enquanto $N_1 = 4$ para ambos os painéis. Usamos $\beta = 1$ para P_1 e $\beta = 2$ para P_2 . Os símbolos são dados da simulação e as curvas sólidas são resultados exatos extraídos da ref. [23]. 59

4.3 Estatística da condutância para um ponto quântico com contatos ideais, $\beta = 1$ e $N_1 = 5$. Em (a) temos a distribuição completa de condutância obtida pela simulação, onde $N_2 = 5, 9, 13$ e 21 dos símbolos mais claros aos mais escuros. Ainda em (a), os valores de g estão normalizados pelo valor esperado pela lei de Ohm: $g_{\text{Ohm}} = 5N_2/(5 + N_2)$. Em (b) temos a variância de g [eq. (1.73)], enquanto o terceiro cumulante de g está em (c) [eq. (4.8)]. 60

4.4 Distribuições dos quatro primeiros CTC's para um ponto quântico caótico com um único canal de espalhamento em cada guia e $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 2/3$ e $\beta = 1, 2$ e 4 (do mais claro para o mais escuro: quadrado, círculo e triângulo.). Os pontos são os dados da simulação e as linhas sólidas são resultados exatos [51]. 65

- 4.5 Valores de condutância obtidos aleatoriamente via simulação para um ponto quântico caótico com apenas um canal de espalhamento, contatos de transparência $2/3$ e $\beta = 1$. Cada uma das mil realizações numéricas gerou um valor de g , representados por pequenos círculos abertos. A reta em $g = 0,2060731$ representa a média da amostra. A faixa cinza em torno da reta, tem largura do dobro do desvio padrão da amostra $2 \times 0,2462341$. 66
- 4.6 Distribuições de condutância e de potência do ruído de disparo para um ponto quântico com guias simétricos, barreiras de transparência $\Gamma = 0,5$ e $\beta = 4$. As curvas estão rotuladas pelos números de canais em cada um dos guias. As linhas são apenas guias de olhos. 67
- 4.7 Distribuições dos terceiro e quarto CTC's para um ponto quântico com $\beta = 1$, $N_1 = N_2 = 8$ e $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$. As linhas são apenas guias de olhos. 68
- 4.8 Médias dos quatro primeiros CTC's em função das transparências das barreiras para um ponto quântico caótico com dois canais de espalhamento abertos em cada um dos dois guias e $\beta = 1$ 69
- 4.9 Estatísticas de g e de p em função do número de canais para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$. Os números rotulando as curvas são os valores de N_1 , enquanto $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,6$. Os pontos fechados ilustram os resultados via SUSY [28] e os abertos representam os dados da simulação. As linhas sólidas (SUSY) e pontilhadas (simulação) são apenas guias de olhos. Em (d), temos o desvio relativo da condutância em escala ln-ln. As retas tracejadas são regressões lineares obtidas através dos pontos $N_2 = 7, 8, 9$ e 10 , com coeficientes angulares $-0,42; -0,415$ e $-0,45$; e lineares $0,18; -0,446$ e $-0,658$; respectivamente para $N_1 = 1, 3$ e 5 70
- 4.10 Estatísticas de g e de p em função de N_1 para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$ e $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,6$. Os símbolos são extrapolações para $N_2 \rightarrow \infty$ através de resultados da simulação com $10 \leq N_2/N_1 \leq 15$. As curvas são guias de olhos para os resultados exatos para um ponto de contato quântico (PCQ) com N_1 canais abertos e transparência $\Gamma_1 = 0,6$ 71

- 4.11 Estatísticas de g e de p em função das transparências das barreiras para um ponto quântico caótico com dois canais de espalhamento em cada um dos guias e $\beta = 1$. Os números rotulando as curvas são os valores de Γ_1 . Os pontos ilustram os resultados via SUSY [28] e as linhas sólidas representam os dados da simulação. Em (d), temos o desvio relativo da condutância em escala ln-ln. Através de uma extrapolação numérica, estimamos o desvio relativo no limite $\Gamma_2 \rightarrow 0$: $\sigma/\langle g \rangle \approx 0,6455; 0,8619; 1,1582$ e $2,9789$; respectivamente para $\Gamma_1 = 1; 0,7; 0,4$ e Γ_2 72
- 4.12 Distribuições de condutância para um ponto quântico caótico de guias e contatos simétricos com $\beta = 1$. Cada distribuição está caracterizada pelos parâmetros $(N; \Gamma)$. Perceba a semelhança entre as distribuições de sistemas com diferentes $(N; \Gamma)$. Os valores das transparências não-ideais ($\Gamma \neq 1$) foram estimados através da minimização da diferença entre as distribuições, a qual foi quantificada pela entropia relativa [eq. (4.20)]. As linhas são apenas guias de olhos. 73
- 5.1 Correção da condutância em relação à lei de Ohm ($\delta g = \langle g \rangle - N/2$) para um ponto quântico com contatos ideais, N canais em cada guia e cavidade com $\beta = 1$. Os pontos são dados da simulação. A reta pontilhada foi obtida através de uma regressão linear tradicional, a qual se baseia em mínimos quadrados: $(0,81 \pm 0,97)/N - 0,278 \pm 0,031$. A regressão linear bayesiana forneceu a reta tracejada: $(0,058 \pm 0,067)/N - 0,2507 \pm 0,0031$. A curva sólida é o resultado exato, gerado pela eq. (5.18). 81
- 6.1 Diagrama de centros de espalhamento para uma cadeia de L pontos quânticos. As barreiras são representadas por suas transparências Γ_i , com $i = 1, 2, \dots, L+1$. As cavidades caóticas são C_j , com $j = 1, 2, \dots, L$ 83
- 6.2 Coeficientes dos termos principais dos quatro primeiros CTC's baseados na eq. (6.8). Os pontos foram estimados através de ajustes polinomiais de curvas usando os resultados da simulação com $\Gamma = 0,7; \dots; 1$ e $N = 20, \dots, 50$. As linhas são guias de olhos para resultados exatos [eq. (6.7)] obtidos via teoria de circuitos [33]. 86

6.3	Coeficientes das correções de localização fraca para g e p baseados na eq. (6.11). Os pontos foram estimados através de métodos bayesianos (cap. 5) usando os resultados da simulação com $\Gamma = 0,7; \dots; 1$ e $N = 20, \dots, 50$. As linhas são guias de olhos para resultados exatos [eq. (6.9)] obtidos via teoria de circuitos [33].	87
6.4	Coeficientes da variância da condutância baseados na eq. (6.13). Os pontos foram estimados através de métodos bayesianos (cap. 5) usando os resultados da simulação com $\Gamma = 0,7; \dots; 1$ e $N = 20, \dots, 50$. As linhas são guias de olhos para resultados exatos [eq. (6.12)] obtidos via teoria de circuitos [33].	88
6.5	Distribuições dos quatro primeiros CTC's para uma cadeia com guias de oito canais, contatos ideais e cavidades com $\beta = 1$, para $L = 1, 2, 4$ e 6 . As linhas são apenas guias de olhos.	90
6.6	Distribuições dos quatro primeiros CTC's para uma cadeia com guias de dois canais, barreiras com $\Gamma = 0,7$ e cavidades com $\beta = 2$, para $L = 1, 2, 3$ e 6 . As linhas são apenas guias de olhos.	91
6.7	Diagrama de centros de espalhamento para um A4PQ. As barreiras são representadas por suas transparências Γ_i , com $i = 1, 2, \dots, 6$. As cavidades caóticas são C_j , com $j = 1, 2, \dots, 4$	92
6.8	Circuito clássico equivalente ao A4PQ, o qual está representado na fig. 6.7. As resistências são $R_j = (\Gamma_j N_j)^{-1}$, pois são o inverso da condutância de cada contato do sistema original.	92
6.9	Distribuições dos quatro primeiros CTC's para um A4PQ com guias de N canais, contatos ideais e cavidades com $\beta = 2$. As linhas são apenas guias de olhos.	96
6.10	Distribuições dos quatro primeiros CTC's para um A4PQ com guias de nove canais, contatos de transparência Γ e cavidades com $\beta = 1$. As linhas são apenas guias de olhos.	97

6.11	Distribuições de condutância para uma cadeia de L pontos (a) e para um A4PQ (b). Em todos os sistemas os guias e os contatos são iguais e $\beta = 2$ para todas as cavidades caóticas. Cada distribuição está caracterizada pelo parâmetro $(N; \Gamma)$. Perceba a semelhança entre as distribuições de sistemas com diferentes $(N; \Gamma)$. Os valores das transparências não-ideais ($\Gamma \neq 1$) foram estimados através da minimização da diferença entre as distribuições, a qual foi quantificada pela entropia relativa [eq. (4.20)]. As linhas são apenas guias de olhos.	98
7.1	Distribuições do autovalor de transmissão de um ponto quântico com apenas um canal de espalhamento aberto em cada guia e contatos de transparência $2/3$, para as três classes de simetria de Wigner-Dyson. Figura retirada da ref. [51].	102
7.2	Terceiro (a) e quarto (b) CTC's em função dos dois autovalores de transmissão para $n = 2$. À esquerda, temos as curvas em 3D mostrando a forma explícita das superfícies \mathcal{HS}_2^3 (a) e \mathcal{HS}_2^4 (b). À direita temos as curvas de nível \mathcal{CN}_2^3 (a) e \mathcal{CN}_2^4 (b).	103
7.3	Distribuições geométricas da condutância. Os números rotulando as curvas são os valores de n	105
7.4	Distribuições de condutância para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$, dois canais em cada guia e barreiras de transparência $\Gamma = 0,2, 0,6$ e 1 . As linhas são apenas guias de olhos.	107
D.1	Distribuições da condutância, g e do quarto CTC, q_4 , para um ponto quântico caótico com dois canais abertos de espalhamento em cada um dos dois guias, transparência das barreiras de 40% e $\beta = 4$, usando os três métodos numéricos apresentados no cap. 3 com 10^5 realizações.	117
D.2	Eficiência do método ST em relação aos métodos MW e MT versus o número de canais. Os números rotulando as curvas são os valores de β	118
E.1	Centro espalhador conectado a dois guias. As ondas dentro dos guias 1 e 2 incidem ou refletem no centro espalhador. As amplitudes de ondas incidentes são $\mathbf{a}^{1,2}$ e das refletidas são $\mathbf{b}^{1,2}$	119

- F.1 Concatenação em série de duas matrizes de espalhamento. Em (a), dois centros espalhadores em série e em (b), o centro espalhador efetivo. As amplitudes de onda no guia m com sentido de propagação σ estão denotadas por \mathbf{a}_σ^m 121

LISTA DE TABELAS

1.1	Ordens de grandeza de algumas escalas de comprimento relevantes para a física mesoscópica. l_m é o caminho livre médio, l_ϕ é o comprimento de relaxação de fase e λ_F é o comprimento de onda de Fermi. Tabela baseada na ref. [2].	4
-----	---	---

TRANSPORTE QUÂNTICO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

O transporte de elétrons é um tema de grande importância para a física da matéria condensada, pois é através dele que se pode caracterizar sólidos: supercondutores, metais, semicondutores e isolantes. Classicamente, a equação de Boltzmann rege o transporte eletrônico, a qual descreve a evolução temporal da função distribuição de uma partícula em um fluido, levando em conta os efeitos de colisões. Este formalismo fornece uma boa aproximação em escalas macroscópicas da dinâmica quântica subjacente. Como exemplo, através da equação de Boltzmann é possível deduzir a lei de Ohm [1], a qual relaciona a condutância, G , com as dimensões do sistema da seguinte forma: para um condutor retangular de comprimento L e área transversal W

$$G = \frac{\sigma W}{L}, \quad (1.1)$$

onde σ é a condutividade, a qual depende da constituição do material. Porém, quando se reduz o tamanho dos condutores surgem efeitos quânticos, os quais a equação de Boltzmann não pode descrever [2, 1]. A física mesoscópica trata, justamente, destes sistemas, onde os efeitos ondulatórios dos elétrons são relevantes. Neste regime, o transporte quântico de unidades de carga é o responsável pela caracterização do sistema, não interessando seu tamanho, seu material, sua composição atômica ou sua estrutura, como ficará claro neste capítulo. Isso esclarece a distinção entre a física mesoscópica e outras áreas como ciência dos materiais, engenharia eletrônica e física do estado sólido e molecular [1, 2].

Neste capítulo, apresentaremos fundamentos da física mesoscópica com ênfase em fenômenos de transporte quântico. Discutiremos algumas escalas de tempo e de comprimento importantes para a descrição do transporte. Apresentaremos a estatística de contagem de carga (ECC) e introduziremos o formalismo de espalhamento de Landauer-Büttiker, o qual relaciona a ECC com a matriz de espalhamento do sistema.

1.1 TUNELAMENTO QUÂNTICO

Geralmente o elétron sofre espalhamento¹ durante seu transporte, devido às interações com outros elétrons, com íons, com fônons, etc. Nestes processos, um fenômeno que acontece em sistemas quânticos, que não existe em sistemas clássicos é o tunelamento. Um elétron é capaz de ultrapassar um potencial mesmo não tendo energia “suficiente” para tal feito na visão clássica. Para entendermos melhor este conceito, considere a equação de Schrödinger independente do tempo para um elétron em um campo eletrostático

$$E\psi_E(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}), \quad (1.2)$$

onde E , m e \vec{r} são respectivamente a energia, a massa e a posição do elétron, $U(\vec{r})$ é o potencial eletrostático e $\psi_E(\vec{r})$ é a função de onda. Vamos considerar o caso simples de um elétron se movendo em uma dimensão num guia de onda [1]. Para isso fazemos $U = 0$ para $|y| < a/2$, $|z| < b/2$ e $U = \infty$ nos outros casos, deixando o elétron para se mover livremente na direção x . Assim obtemos a solução

$$\psi_{k_x,n}(x, y, z) = \psi_{k_x}(x)\phi_n(y, z), \quad (1.3)$$

onde

$$\psi_{k_x}(x) = \exp(ik_x x) \quad (1.4)$$

e

$$\phi_n(y, z) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin[k_y^n(y - a/2)] \sin[k_z^n(z - b/2)]. \quad (1.5)$$

Portanto, o movimento transversal é quantizado e o espectro é

$$E_n(k_x) = \frac{(\hbar k_x)^2}{2m} + E_n; \quad E_n = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} \left(\frac{n_y^2}{a^2} + \frac{n_z^2}{b^2} \right), \quad (1.6)$$

onde k_x é a componente do vetor de onda na direção x e $n \equiv (n_y, n_z) \in \mathbb{N}^2$.

Podemos adicionar uma modelagem de barreira de potencial da seguinte forma

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 < x < d, \\ 0, & \text{outros casos.} \end{cases} \quad (1.7)$$

¹Os processos de espalhamento são também chamados classicamente de colisões. No entanto, quantitativamente evitamos usar este termo, pois ele faz referência a trajetória, que é um conceito inválido na mecânica quântica.

Considerando as ondas incidentes vindas da esquerda para a direita com energia E , temos

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + r \exp(-ikx), & x < 0, \\ B \exp(i\kappa x) + C \exp(-i\kappa x), & 0 < x < d, \\ t \exp(ikx), & x > d, \end{cases} \quad (1.8)$$

onde $k = \sqrt{2m(E - E_n)}/\hbar$, $\kappa = \sqrt{2m(E - E_n - U_0)}/\hbar = \sqrt{k^2 - 2mU_0/\hbar^2}$, t é a amplitude de transmissão e r a de reflexão. O coeficiente de transmissão $T(E) = |t|^2$ determina a fração da onda transmitida que atravessa o obstáculo, enquanto o coeficiente de reflexão $R(E) = |r|^2 = 1 - T(E)$ informa a fração refletida. Impondo a normalização da função de onda e condições para que ela seja contínua, obtemos

$$T(E) = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 - \kappa^2)\text{sen}^2(\kappa d) + 4k^2\kappa^2}. \quad (1.9)$$

Classicamente, partículas com energia abaixo da barreira ($E < U_0$) devem ser totalmente refletidas ($T = 0$). Porém, pela mecânica quântica, essas partículas possuem uma chance finita de serem transmitidas: $T(E \ll U_0) \propto \exp(-2d\sqrt{2m(U_0 + E_n - E)}/\hbar) \ll 1$.

1.2 ESCALAS CARACTERÍSTICAS

A física mesoscópica está no limiar entre os efeitos clássicos presentes em materiais macroscópicos e os efeitos quânticos de sistemas extremamente pequenos. Para entendermos a transição entre estes dois regimes, precisamos ser mais específicos e definirmos escalas de comprimento importantes para a caracterização do transporte. Sistemas com tamanho muito maior que as escalas que mostraremos aqui possuem um comportamento ôhmico e podem ser tratados classicamente. As ordens de grandeza de alguns destas escalas estão na tab. 1.1. Mais detalhes sobre estas escalas estão presentes nas refs. [2, 3].

1.2.1 Comprimento de onda de Fermi

Em condutores a baixas temperaturas, somente os elétrons com energias próximas à energia de Fermi, $E_F = (\hbar k_F)^2/(2m)$, participam do transporte. O comprimento de onda de Fermi é referente a esta energia e é dado por

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}. \quad (1.10)$$

1mm	l_m no regime Hall quântico
100 μ m	
10 μ m	l_m e l_ϕ em semicondutores com alta mobilidade
1 μ m	
100nm	Dispositivos semicondutores comerciais (1900)
10nm	λ_F em semicondutores
	l_m em filmes metálicos policristalinos
1nm	λ_F em metais distância entre átomos
1Å	

Tabela 1.1 Ordens de grandeza de algumas escalas de comprimento relevantes para a física mesoscópica. l_m é o caminho livre médio, l_ϕ é o comprimento de relaxação de fase e λ_F é o comprimento de onda de Fermi. Tabela baseada na ref. [2].

1.2.2 Caminho livre médio

Sabemos que processos de espalhamento modificam o momento da partícula espalhada. A distância que ela percorre até que seu momento inicial seja destruído é chamado de caminho livre médio.

Alguns modelos clássicos como o de Drude-Sommerfeld (ou modelo do elétron livre) [4] consideram que a colisão entre um elétron e um íon acontece instantaneamente, ou seja, o elétron muda seu momento abruptamente. Neste caso, o caminho livre médio pode ser definido como $l_m = \theta_c v_F$, onde $v_f = \hbar k_f / m$ é a velocidade de Fermi e θ_c é o tempo médio entre sucessivas colisões do elétron. Porém, a interação entre o elétron e o centro espalhador não é instantânea e, portanto, o processo de espalhamento ocorre num certo intervalo de tempo. Sendo assim, podemos definir o tempo de relaxação do momento do elétron da seguinte forma

$$\theta_m = \frac{\theta_c}{\alpha_m}, \quad (1.11)$$

onde $0 \leq \alpha_m \leq 1$ denota a efetividade de um espalhamento em destruir o momento inicial. Então, de uma maneira geral, o caminho livre médio é dado por

$$l_m = v_F \theta_m. \quad (1.12)$$

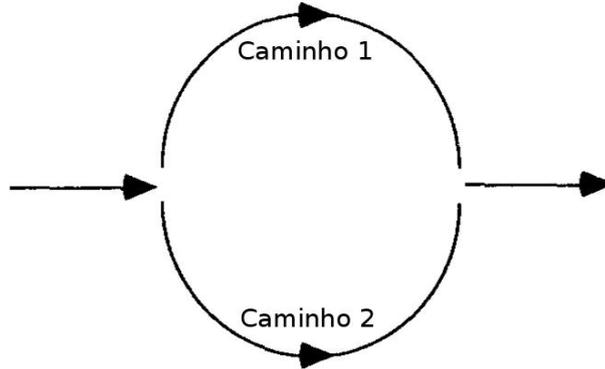


Figura 1.1 Ilustração conceitual de um experimento de interferência. Um feixe de elétrons é separado em dois caminhos distintos que se encontram logo em seguida. Figura retirada da ref. [2].

1.2.3 Comprimento de relaxação de fase

Este comprimento de relaxação é inerente à mecânica quântica e não possui análogo clássico, pois diferente do espaço de fase da mecânica clássica, o estado da partícula na mecânica quântica é definido por sua função de onda, a qual possui uma *fase*. Em analogia com a relaxação de momento, podemos escrever o tempo de relaxação de fase como

$$\theta_\phi = \frac{\theta_c}{\alpha_\phi}, \quad (1.13)$$

onde agora $0 \leq \alpha_\phi \leq 1$ é a efetividade de um espalhamento em destruir a fase inicial.

A fase é muito importante no fenômeno de interferência. Um exemplo de um experimento de interferência está ilustrado na fig. 1.1 onde um feixe de elétrons é separado em dois caminhos que se unem em seguida. Se as fases não forem destruídas nos caminhos 1 e 2, efeitos de interferência quântica poderão ser observados. Por exemplo, em um cristal perfeito os dois caminhos devem ser idênticos e, portanto, a interferência é construtiva, não havendo relaxação de fase ($\theta_\phi \rightarrow \infty$ que significa $\alpha_\phi \rightarrow 0$). Em oposição, se aplicarmos um campo magnético perpendicular ao plano dos caminhos, este poderá mudar as fases relativas e consequentemente mudar a interferência na união dos caminhos.

É importante entender o efeito de adicionar impurezas aleatoriamente em cada um dos caminhos. Qualquer potencial estático e independente de spin não pode causar relaxação de fase, pois existe uma relação definida entre as fases para os dois caminhos. Em outras palavras, as equações de movimento de qualquer potencial estacionário são reversíveis temporalmente. Sendo assim, impurezas não-magnéticas e estáticas não causam relaxação de fase. Os únicos processos que são capazes de provocar relaxamento

de fase são aqueles que quebram a simetria de reversão temporal. Dentre eles estão os espalhamentos inelásticos causados por interações elétron-elétron ou elétron-fônon e espalhamentos com mudança de spin.

É importante introduzirmos o conceito de mobilidade. Seja \vec{v}_d a velocidade de deriva dos elétrons adquirida com a aplicação de um campo elétrico \vec{E} . A mobilidade mede a resposta na velocidade de deriva com a aplicação do campo elétrico da seguinte forma

$$\mathcal{M} = \frac{|\vec{v}_d|}{|\vec{E}|} = \frac{|e|\theta_m}{m}, \quad (1.14)$$

onde e é a carga e m a massa do elétron.

Para sistemas com alta mobilidade $\theta_\phi \lesssim \theta_m$ e, conseqüentemente, o comprimento de relaxação de fase é dado por

$$l_\phi = v_F \theta_\phi \lesssim l_m. \quad (1.15)$$

Por outro lado, quando a mobilidade é baixa, $\theta_\phi \gg \theta_m$, indicando que o movimento é difusivo. Neste caso, temos

$$l_\phi = \sqrt{D\theta_\phi}, \quad (1.16)$$

onde $D = v_F^2 \theta_m / d$ é a constante de difusão e d é a dimensão do gás de elétrons.

1.3 PONTO DE CONTATO QUÂNTICO

O sistema mesoscópico mais simples é o ponto de contato quântico (PCQ), o qual está ilustrado na fig. 1.2. Ele consiste de uma constricção de largura L e abertura de tamanho W , a qual divide duas regiões condutoras onde o transporte é praticamente balístico: $l_m \gg L$.

Para entendermos o PCQ, vamos modelar o transporte quântico por analogia a guias de onda seguindo a ref. [1]. Vamos introduzir a ideia desta modelagem em dois passos. O primeiro é comparar o PCQ a guias de onda ideais e em seguida, introduzir o conceito de canais de propagação de elétrons. O segundo é incluir espalhamento entre canais, mostrando que a complexidade desse espalhamento pode ser modelada pela matriz de espalhamento.

Vamos iniciar estudando o caso ilustrado na fig. 1.3. Trata-se de um guia de onda com seção transversal variável $|y| < a(x)/2$ e $|z| < b(x)/2$, tendo a condição de que para $x \rightarrow \pm\infty$ a seção transversal é constante: a_∞ e b_∞ . Assim, no meio do guia as constricções vão estreitando e os resultados para um guia de onda ideal não se aplicam. Além do mais, resolver a equação de Schrödinger se torna complicado, pois as variáveis

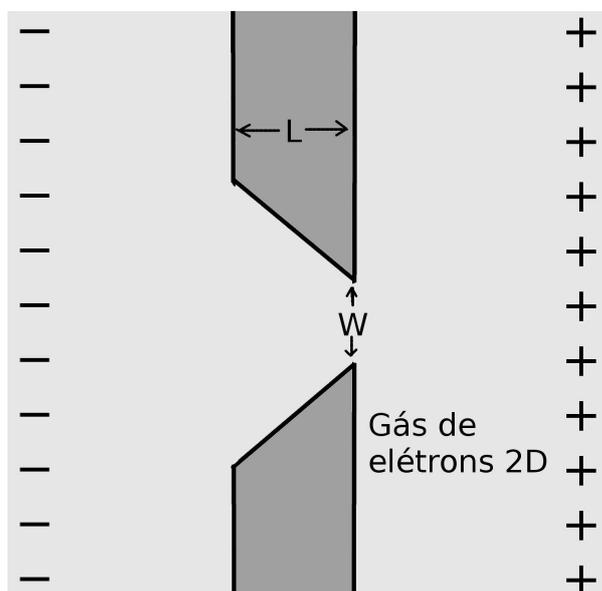


Figura 1.2 Ponto de contato quântico. O cinza mais claro representa um gás de elétrons bidimensional. O cinza mais escuro é a constricção impenetrável de largura L e abertura de tamanho W . Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada para que ocorra o transporte dos elétrons da esquerda para a direita.

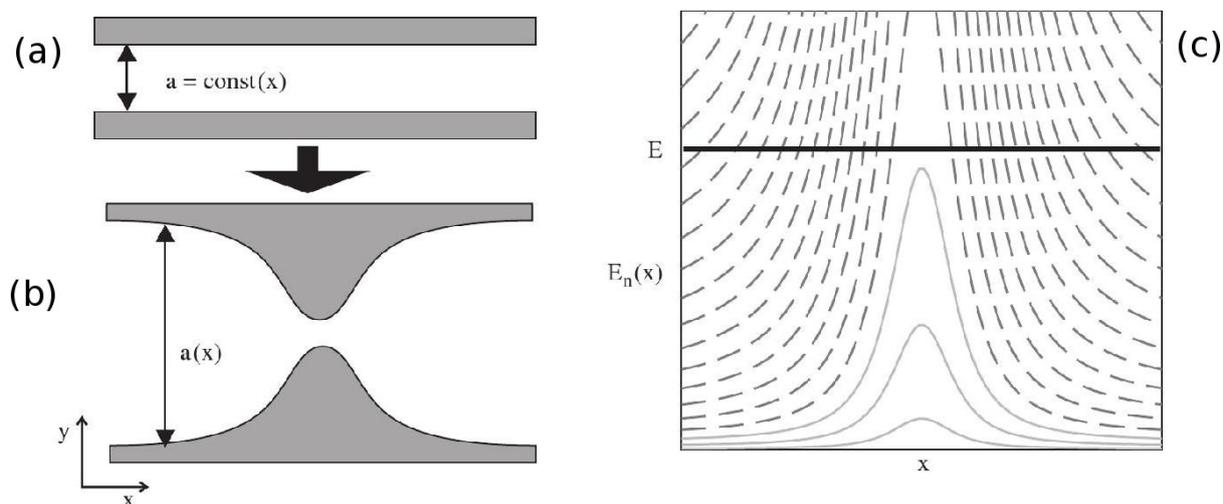


Figura 1.3 Ponto de contato adiabático. A variação na largura da constricção provoca uma barreira de potencial efetiva dependente do canal de propagação. Em uma dada energia, somente alguns canais podem ultrapassar a barreira, os quais são abertos. Em (c), as linhas tracejadas representam os canais fechados e as sólidas, os canais abertos. Figura retirada da ref. [1].

não são separáveis e conseqüentemente, o movimento não se torna unidimensional.

Por outro lado, podemos por simplicidade considerar guias de ondas adiabáticos:

$$|a'(x)|, |b'(x)| \ll 1 \quad \text{e} \quad a(x)|a''(x)|, b(x)|b''(x)| \ll 1.$$

Sob estas condições, as paredes são localmente planas e paralelas, permitindo aproximar as funções de ondas às do guia de onda ideal [eq. (1.5)]. Com isso, podemos separar as variáveis localmente

$$\psi_n(x, y, z) = \psi(x)\Phi_n[a(x), b(x), y, z], \quad (1.17)$$

$$\Phi_n[a(x), b(x), y, z] = \frac{2}{\sqrt{a(x)b(x)}} \sin[k_y^n(y - a(x)/2)] \sin[k_z^n(z - b(x)/2)], \quad (1.18)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_n \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (1.19)$$

$$E_n(x) = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} \left[\frac{n_y^2}{a^2(x)} + \frac{n_z^2}{b^2(x)} \right]. \quad (1.20)$$

Esse resultado é muito similar ao caso do movimento unidimensional, tendo a sutileza de que a energia E_n , que faz o papel do potencial, depende de x e do canal de propagação [$n \equiv (n_y, n_z)$]. Vemos na fig. 1.3(c) que cada canal possui uma barreira de potencial efetiva ao redor da parte mais estreita da constrição. Também observamos que quanto maior os números n_y e n_z , maior essa barreira se torna.

Vamos nos concentrar em uma energia E fixa. Em um certo canal, nós comparamos E com a altura máxima da sua barreira, considerada impenetrável. Se E for maior que essa altura, os elétrons conseguem ultrapassar a constrição. Caso contrário, eles são refletidos. Como a altura da barreira cresce com o índice de canais, existe somente um número finito de canais abertos nos quais os elétrons podem ultrapassar a constrição. Todos os outros canais são fechados.

Sendo assim, o guia de onda adiabático com uma seção transversal variável sem barreira de potencial funciona como um guia de onda ideal com uma barreira de potencial, como considerado na seção anterior. Vamos definir um coeficiente de transmissão dependente do canal $\tau_n(E)$. Como aparentemente a adiabaticidade implica em barreiras de potencial aproximadamente clássicas (potencial infinito), podemos considerar $T = 1$ para os canais abertos e $T = 0$ para os fechados.

Vamos determinar a corrente na constrição. Para um guia de onda ideal, o vetor de

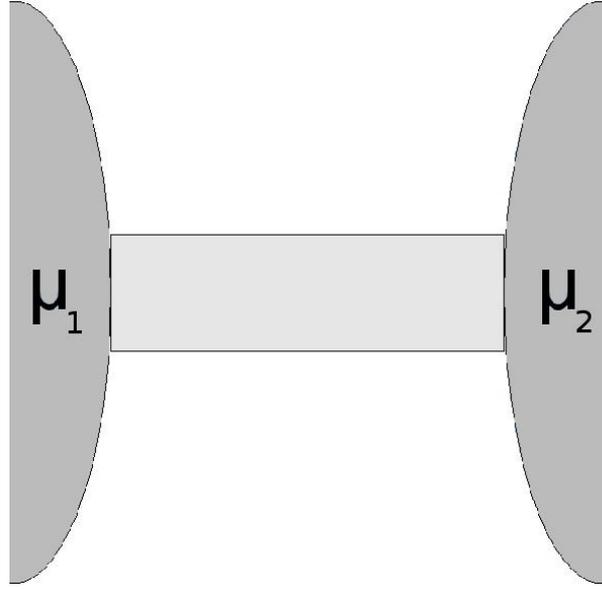


Figura 1.4 Reservatórios macroscópicos em equilíbrio termodinâmico nas extremidades de um condutor mesoscópico, cada um caracterizado pelo seu potencial eletroquímico.

onda não depende de x e, $k_y \rightarrow k_y^n$ e $k_z \rightarrow k_z^n$. Neste caso, temos

$$\int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \frac{dk_z}{2\pi} (\dots) \rightarrow \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{1}{ab} \sum_n (\dots). \quad (1.21)$$

No limite assintótico $x \rightarrow \pm\infty$ o guia de onda é ideal e, portanto, a corrente elétrica é

$$I = 2e \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) f_n(k_x), \quad (1.22)$$

onde o fator 2 aparece devido a degenerescência de spin, $f_n(k_x)$ é o fator de preenchimento do nível (n, k_x) e $v_x = \hbar k_x/m$ é a velocidade. Se o canal é fechado ($T = 0$) o fator de preenchimento para ondas que vêm da direita e da esquerda é igual $f_n(k_x) = f_n(-k_x)$ e a contribuição para esses modos se anula na integração. Já para canais abertos o fator de preenchimento para os sentidos opostos do momento são diferentes. Para esclarecer isso, precisamos entender como os elétrons entram no guia e portanto vamos explicar o conceito de reservatório. Trata-se de um elemento macroscópico em equilíbrio termodinâmico conectado ao sistema mesoscópico que envia e/ou recebe partículas como visto na fig. 1.4. Assim, as partículas provenientes do reservatório esquerdo possuem um fator de preenchimento $f_1(E) \equiv f_F(E - \mu_1)$ e analogamente para os da direita $f_2(E) \equiv f_F(E - \mu_2)$, onde $f_F(E - \mu) = \{1 + \exp[(E - \mu)/k_B T]\}^{-1}$ é a função de Fermi. Como os fatores

de preenchimento dependem apenas da energia é conveniente introduzir a mudança de variável $k_x \rightarrow E \Rightarrow v_x = \partial E / \partial k_x \Rightarrow dE = \hbar v_x k_x dk_x$. Dessa forma, a eq. (1.22) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \sum_{n(\text{abertos})} \int dE [f_1(E) - f_2(E)] \\ &\equiv \frac{2e}{2\pi\hbar} N_{\text{abertos}} (\mu_1 - \mu_2) \equiv G_Q N_{\text{abertos}} V, \end{aligned} \quad (1.23)$$

onde $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$ é a diferença de potencial entre os reservatórios e $G_Q = 2e^2/2\pi\hbar = 2e^2/h \approx 7.7480917 \times 10^{-5} \text{Ohm}^{-1}$ é o quantum de condutância. Com isso, percebemos que a condutância do sistema I/V é quantizada em termos de G_Q . Esse fator é formado de constantes fundamentais, não dependendo, portanto, de propriedades do material, tamanho da estrutura mesoscópica, geometria, topologia ou de nenhum modelo teórico concreto usado para calcular as propriedades de transporte. Iremos ver a seguir [eq. (1.25)] que o número de canais abertos é determinado somente pela parte mais estreita do PCQ e, conseqüentemente, o restante da geometria não influencia as propriedades de transporte.

A quantização da condutância foi primeiramente observada em heteroestruturas semicondutoras de GaAs e AlGaAs como mostra a fig. 1.5 [5, 6, 2]. A superfície entre os semicondutores confina elétrons formando um gás de elétrons bidimensional (GE-2D). Isso equivale ao guia de onda com $b \rightarrow 0$, fazendo com que apenas a menor sub-banda ($n_z = 1$) seja relevante. Além disso, na borda das estruturas são colocados dois eletrodos eletricamente isolados dos elétrons, aplicando um potencial que cria “paredes” que servem para confinar os elétrons. A constrição formada pelas paredes no *gap* dos eletrodos possui largura correspondente ao tamanho a do modelo de guia de onda. Uma voltagem mais negativa repele mais os elétrons e portanto, a mais negativa equivale ao tamanho mínimo a_{min} , o qual é então controlado pela voltagem do portão. Assim, um novo canal indexado por $n = (n_y, 1)$ se abre quando, à medida que mudamos a_{min} , a energia do topo da barreira W_n ultrapassa a energia de Fermi

$$W_n \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a_{\text{min}}^2 m} n_y^2 = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (1.24)$$

e portanto

$$N_{\text{abertos}} = \text{int}(k_F a_{\text{min}} / \pi). \quad (1.25)$$

Sendo assim, espera-se que a dependência da condutância em relação à voltagem (que está ligado ao número de canais abertos) se assemelhe a degraus de altura G_Q . Isso foi

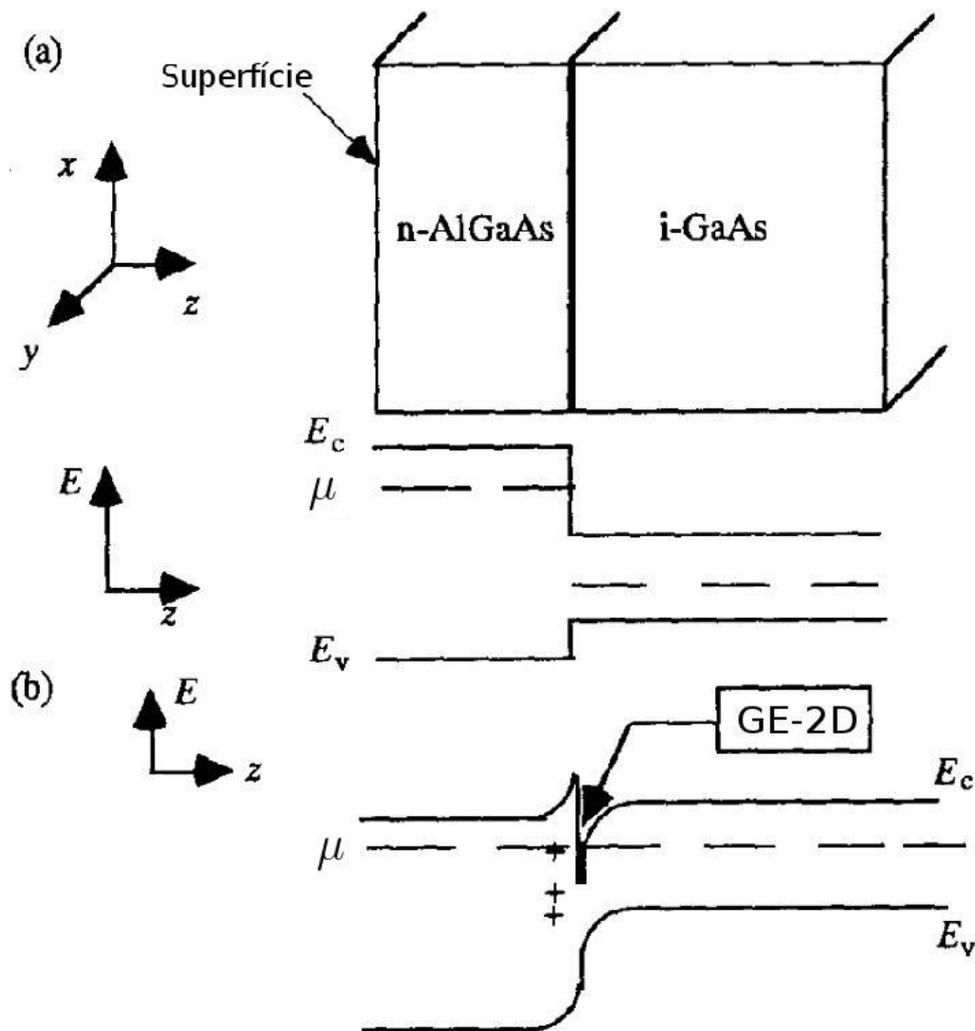


Figura 1.5 Bandas de condução e de valência alinhadas com uma junção de um AlGaAs (semicondutor tipo n) com um GaAs (semicondutor intrínseco) (a) antes e (b) depois da transferência de carga. Figura retirada da ref. [2].

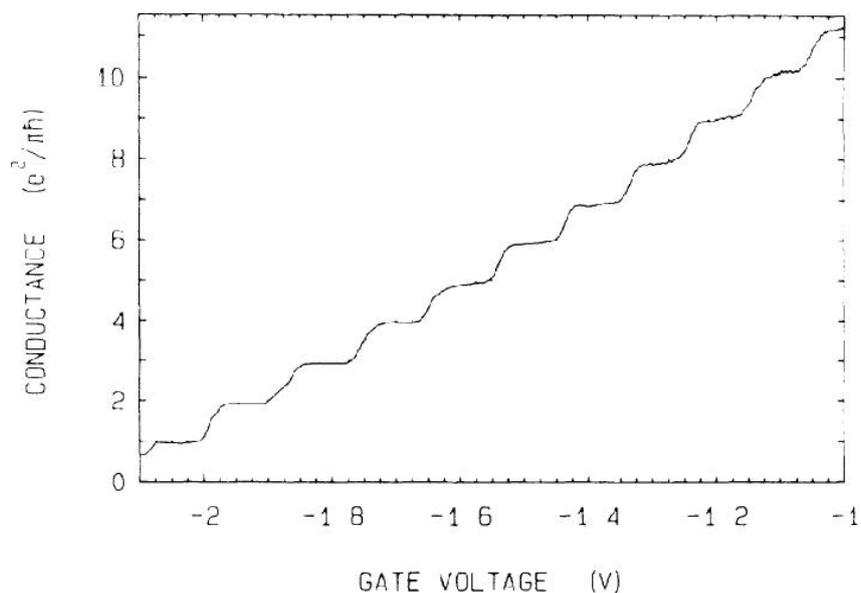


Figura 1.6 Condutância versus potencial do portão de voltagem do sistema descrito pela fig. 1.5. Figura retirada da ref. [5].

medido no experimento de 1988 [5] como mostra a fig. 1.6.

1.4 PONTO QUÂNTICO CAÓTICO

Assim como é possível confinar lateralmente o GE-2D, também se pode construir bilhares caóticos mesoscópicos, que são cavidades onde os elétrons se movimentam em seu interior balisticamente, ou seja, considerando que L é o raio médio da cavidade, para o movimento ser balístico é necessário que $L \lesssim l_m$. Para que possamos observar efeitos de interferência, deve haver coerência de fase, $L \lesssim l_\phi$. Para que a dinâmica caótica dos elétrons na cavidade seja considerada universal, é necessário que as escalas de tempo sejam grandes comparadas com o tempo ergódico² $\theta_{ergódico}$. Além disso, o material dentro da cavidade deve ser um bom metal, o que significa que: (i) $\hbar/\theta_{ergódico} \gg \Delta$, onde Δ é o espaçamento médio de níveis de energia da cavidade, e (ii) $\lambda_F \ll l_m$ para que as funções de onda sejam estendidas ao invés de localizadas [7].

Acoplando reservatórios macroscópicos ao bilhar (cavidade aberta) e mantendo-os fora do equilíbrio, é possível estudar o transporte de cargas (ver fig. 1.7). Este sistema também é conhecido como ponto quântico (PQ). Como o sistema está aberto, existe uma escala de tempo de permanência do elétron na cavidade $\theta_{permanência}$. Para que a dinâmica do sistema continue sendo universal, $\theta_{permanência} \gg \theta_{ergódico}$. Além disso, $\theta_{permanência}$ precisa

²Tempo acima do qual a dinâmica é ergódica.

ser muito maior que o tempo de Ehrenfest³, pois assim preservamos as características quânticas da dinâmica. Nestas condições, os observáveis de transporte não dependem de propriedades microscópicas do ponto quântico, como, por exemplo, sua geometria. Estas características justificam o uso da teoria de matrizes aleatórias, a qual iremos expor no cap. 2.

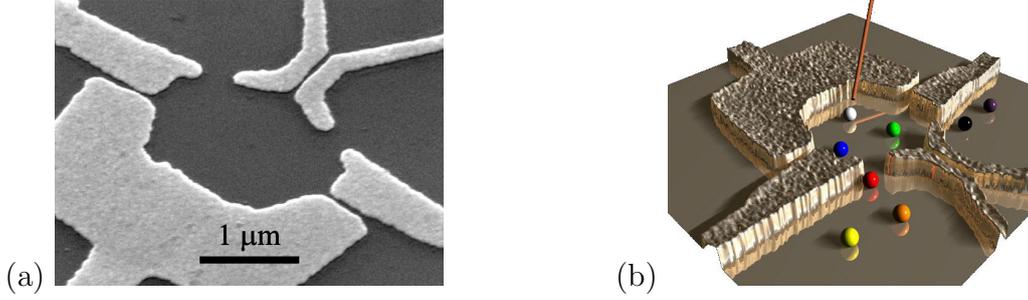


Figura 1.7 Em (a), um ponto quântico construído sobre um GE-2D e em (b), sua visão clássica. O ponto quântico tem analogia clássica a uma cavidade na qual os elétrons são refletidos nas fronteiras, semelhante a uma mesa de bilhar. Figura retirada da ref. [8].

1.5 MATRIZ DE ESPALHAMENTO

Os modelos de guias de onda usados até aqui não devem ser entendidos como realistas do ponto de vista experimental. Na verdade, o que está entre os reservatórios é uma região de espalhamento como ilustrado na fig. 1.8.

Assim, as amplitudes das ondas incidentes a e das refletidas b estão relacionadas da seguinte forma:

$$b_l^\alpha = \sum_\beta \sum_{l'} S_{ll'}^{\alpha\beta} a_{l'}^\beta \quad (1.26)$$

onde, α e β variam no número de guias e l e l' no número de canais. Portanto, considerando que o guia 1 (2) possui N_1 (N_2) canais de espalhamento abertos, os coeficientes da eq. (1.26) são combinados em uma matriz de espalhamento (ou matriz \mathbf{S}) com dimensão $N_1 + N_2$ [9], tendo a seguinte estrutura de bloco

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{11} & \mathbf{S}^{12} \\ \mathbf{S}^{21} & \mathbf{S}^{22} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad (1.27)$$

onde, as dimensões de \mathbf{r} , \mathbf{t} , \mathbf{r}' e \mathbf{t}' são $N_1 \times N_1$, $N_2 \times N_1$, $N_2 \times N_2$ e $N_1 \times N_2$, respectivamente.

³Tempo que determina qual descrição rege a dinâmica do sistema: clássica ou quântica. Abaixo (acima) do tempo de Ehrenfest o comportamento do sistema é clássico (quântico).

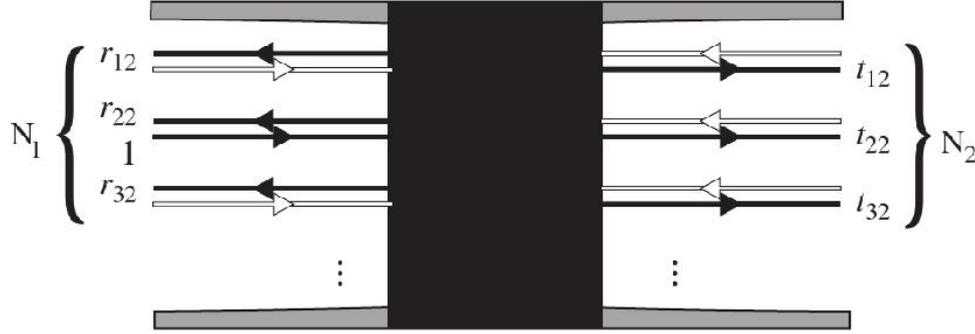


Figura 1.8 Estrutura da matriz de espalhamento. A onda incidente no canal 2 vindo da esquerda com amplitude 1 é separada em amplitudes transmitidas e refletidas em todos os canais de forma misturada. As flechas pretas ilustram os canais em que é possível a onda se propagar, indicando a direção de propagação. As brancas representam a impossibilidade da propagação da onda naquele canal com o sentido indicado. Figura retirada da ref. [1].

Se for aplicado um campo magnético B , seus elementos obedecem às seguintes relações estendidas de Onsager [2]

$$\begin{cases} r_{nm}(B) = r_{mn}(-B), \\ r'_{nm}(B) = r'_{mn}(-B), \\ t_{nm}(B) = t'_{mn}(-B). \end{cases} \quad (1.28)$$

Perceba que na ausência de campo magnético, $\mathbf{t}' = \mathbf{t}$. Além disso, a matriz de espalhamento é unitária $\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{1}$, implicando na conservação de carga

$$(\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S})_{nm} = \sum_{n'} |r_{nn'}|^2 + \sum_m |t_{mn}|^2 = 1. \quad (1.29)$$

É importante destacar que a matriz de espalhamento carrega toda informação do transporte dos elétrons no sistema mesoscópico, que em sua forma mais geral, distribui as amplitudes de transmissão em canais distintos.

1.6 ESTATÍSTICA DE CONTAGEM DE CARGA

Na realidade, os detectores de corrente geralmente medem uma média de várias leituras. Como a transferência de elétrons é um processo estocástico, seria interessante medir a probabilidade de um certo valor de corrente ser detectado, o que não é simples. Entretanto, o ruído da corrente (segundo cumulante da distribuição de probabilidade) é uma medida comum do ponto de vista experimental e a determinação do terceiro cumulante foi realizada recentemente [10].

Em óptica quântica, a caracterização do estado quântico do campo eletromagnético é dada pela estatística de contagem de fótons. Por exemplo, para a radiação coerente de um laser, esta estatística é poissoniana. O análogo de contar fótons em física mesoscópica é contar elétrons. Existem muitas diferenças entre estas “partículas”, dentre as quais destacamos o fato dos elétrons interagirem e os fótons não, e além disso, os primeiros obedecem ao princípio de exclusão de Pauli e possuem uma energia de Fermi, que são características não apresentadas por fótons. Estas diferenças influenciam a estatística de contagem, a qual se apresenta de uma forma mais complexa para elétrons do que para seu análogo óptico [11].

Apesar das dificuldades experimentais e teóricas, a estatística de contagem dos elétrons é a grande chave do entendimento do transporte quântico e é o que discutiremos aqui.

1.6.1 A fórmula de Landauer

Seguindo a ref. [1], vamos calcular a corrente através de uma seção transversal de um guia de onda tomando como base a eq. (1.22). Os elétrons com $k_x > 0$ são provenientes do reservatório esquerdo e, portanto, o fator de preenchimento é $f_1(E)$. Elétrons com $k_x < 0$ em um dado canal n , são provenientes da região de espalhamento. Sendo assim, uma parte desses elétrons pode ter vindo do reservatório esquerdo e terem sido refletidos. Com isso, o fator de preenchimento também é $f_1(E)$ e a fração desses elétrons é determinada por $R_n(E) = \sum_{n'} |r_{nn'}|^2$. A outra parte é formada pelos elétrons transmitidos através da região de espalhamento, tendo fator de preenchimento $f_2(E)$. Assim, o fator de preenchimento efetivo dos elétrons com $k_x < 0$ é $R_n(E)f_1(E) - (1 - R_n(E))f_2(E)$. Sendo assim, podemos escrever a corrente

$$\begin{aligned}
 I &= 2e \sum_n \left\{ \int_0^\infty \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) f_1(E) \right. \\
 &\quad \left. + \int_{-\infty}^0 \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) [R_n(E)f_1(E) + (1 - R_n(E))f_2(E)] \right\}. \\
 &= 2e \sum_n \int_0^\infty \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) [1 - R_n(E)][f_1(E) - f_2(E)]. \tag{1.30}
 \end{aligned}$$

Para encontrar a equação da última linha, fizemos a mudança de variável $k_x \rightarrow -k_x$ na segunda integral. Usando a relação de conservação de carga $1 - R_n = \sum_m |t_{mn}|^2 = (\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t})_{nn}$

e mudando a integração de k_x para E obtemos

$$I = \frac{e}{\pi} \int_0^\infty dE \operatorname{tr}(\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}) [f_1(E) - f_2(E)]. \quad (1.31)$$

Perceba que usamos a notação do traço $\operatorname{tr}(\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}) = \sum_n (\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t})_{nn} = \sum_p \tau_p$, onde τ_p , denominados autovalores de transmissão, são os autovalores da matriz hermitiana $\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}$ e devido à relação de unitariedade da matriz de espalhamento devemos ter $0 \leq \tau_p \leq 1$.

Os autovalores de transmissão dependem da energia. Contudo, no regime de resposta linear [2], que é quando a voltagem aplicada é muito menor que a escala de energia típica dessa dependência, eles podem ser calculados em torno da superfície de Fermi. Assim, obtemos a expressão para a condutância

$$G = G_Q \sum_p \tau_p(E_F). \quad (1.32)$$

O cálculo da corrente no guia de onda direito produz o mesmo resultado devido à conservação de corrente.

A eq. (1.32) é conhecida como “a fórmula de Landauer” [12] e relaciona a transmissão com a condutância para estruturas mesoscópicas.

1.6.2 Contagem de elétrons

Vamos revisar alguns conceitos básicos de estatística, os quais serão usados para descrever a ECC seguindo a ref. [1]. Seja P_N a probabilidade de N eventos acontecerem numa medida durante um intervalo de tempo de Δt . Logicamente, a distribuição de probabilidade é normalizada $\sum_N P_N = 1$ e com ela podemos estimar qualquer cumulante da distribuição. O primeiro cumulante é a média

$$\langle N \rangle = \sum_N N P_N, \quad (1.33)$$

o segundo é a variância

$$\langle \langle N^2 \rangle \rangle = \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2, \quad (1.34)$$

onde a média de qualquer função de N é dada por $\langle F(N) \rangle = \sum_N F(N) P_N$.

Nem sempre a distribuição de probabilidade fornece a descrição estatística mais conveniente. Alternativamente, podemos usar a função característica da distribuição de

probabilidade

$$\Lambda(\chi) \equiv \langle e^{i\chi N} \rangle. \quad (1.35)$$

Os k -ésimos momentos e cumulantes da distribuição são obtidos respectivamente por

$$\begin{cases} \langle N^k \rangle &= \frac{d^k \Lambda}{d(i\chi)^k} \Big|_{\chi=0}, \\ \langle\langle N^k \rangle\rangle &= \frac{d^k \ln(\Lambda)}{d(i\chi)^k} \Big|_{\chi=0}. \end{cases} \quad (1.36)$$

Decompondo $\Delta t = \Delta t_1 + \Delta t_2$, de modo que tenhamos dois intervalos de medições independentes, então $\Lambda(\chi, \Delta t) = \Lambda(\chi, \Delta t_1)\Lambda(\chi, \Delta t_2) \rightarrow \ln[\Lambda(\chi, \Delta t)] = \ln[\Lambda(\chi, \Delta t_1)] + \ln[\Lambda(\chi, \Delta t_2)]$ e conseqüentemente todos os cumulantes são proporcionais a Δt .

Vamos tomar como evento a transferência de elétrons em uma estrutura mesoscópica. Assim a quantidade a se contar é a carga Q que vai da esquerda para a direita durante um intervalo de tempo Δt . Portanto, $\langle Q \rangle = \langle I \rangle \Delta t$, onde a média de corrente é obtida pela fórmula de Landauer. Vamos agora mais longe e buscar descrever a estatística completa da variável aleatória Q dentro da abordagem de espalhamento.

Primeiramente vamos considerar que os elétrons são transmitidos em apenas um sentido e que as transferências são descorrelacionadas. Para calcular a função característica, vamos dividir o intervalo Δt em muitos intervalos pequenos dt . A probabilidade de um elétron ser transferido nesse pequeno intervalo de tempo é $\Gamma dt \ll 1$, onde Γ é a taxa de transferência e, portanto, a probabilidade de nenhum elétron ser transmitido é $1 - \Gamma dt$. Assim, desprezando a transferência de mais de um elétron por ter probabilidade muito pequena, a função característica para o intervalo dt é

$$\Lambda_{dt}(\chi) = \langle e^{i\chi Q/e} \rangle = (1 - \Gamma dt) + (\Gamma dt)e^{i\chi}. \quad (1.37)$$

Como os elétrons passam independentemente, a função característica para o intervalo Δt é o produto das funções características dos intervalos menores

$$\Lambda_{\Delta t}(\chi) = [\Lambda_{dt}(\chi)]^{\Delta t/dt} = \exp[\Gamma \Delta t(e^{i\chi} - 1)] = \exp[\tilde{N}(e^{i\chi} - 1)], \quad (1.38)$$

onde $\tilde{N} \equiv \Gamma \Delta t$. Usamos o fato de que $\Delta t/dt \rightarrow \infty$ e a identidade $e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + x/n)^n$. Usando a eq. (1.36), podemos obter o número médio de elétrons

$$\langle N \rangle = \langle Q \rangle / e = -i \Lambda'_{\Delta t}(\chi = 0) = \tilde{N}. \quad (1.39)$$

Tomando a transformada inversa de Fourier, obtemos a probabilidade de N partículas serem transferidas num intervalo de tempo Δt

$$\begin{aligned} P_N &= \int_0^{2\pi} \frac{d\chi}{2\pi} \Lambda(\chi) e^{-iN\chi} \approx \int_0^{2\pi} \frac{d\chi}{2\pi} e^{-iN\chi + \tilde{N}(e^{i\chi} - 1)} \\ &= \frac{\tilde{N}^N}{N!} e^{-\tilde{N}\Delta t}, \end{aligned} \quad (1.40)$$

a qual é uma distribuição de Poisson. Casos de transferências de elétrons descorrelacionadas podem acontecer, por exemplo, em junções de tunelamento, onde todos os autovalores de transmissão são pequenos. Neste caso, a corrente é pequena implicando que o intervalo de tempo entre transferências sucessivas é grande. Obviamente, este é apenas um caso particular, pois em geral a transferência de elétrons é correlacionada.

1.6.3 A fórmula de Levitov-Lesovik

A eq. (1.40) é válida para o caso de $\tau_p \ll 1$. Para o caso intermediário $0 < \tau_p < 1$, os elétrons transmitidos são correlacionados. O resultado para a função característica no caso de muitos canais a temperatura finita é dado pela fórmula de Levitov-Lesovik (FLL) [13]

$$\begin{aligned} \ln[\Lambda(\chi)] &= 2\Delta t \int \frac{dE}{2\pi\hbar} \sum_p \ln\{1 + \tau_p(e^{i\chi} - 1)f_1(E)[1 - f_2(E)] \\ &\quad + \tau_p(e^{-i\chi} - 1)f_2(E)[1 - f_1(E)]\}. \end{aligned} \quad (1.41)$$

A soma em p indica que a contagem de elétrons em canais diferentes é independente. A integração na energia também sugere que elétrons são transferidos independentemente em cada intervalo de energia. Porém, é importante notar que as transmissões de elétrons de um reservatório a outro são correlacionadas devido ao princípio de exclusão de Pauli.

Para entendermos a FLL, vamos seguir a ref. [1] e considerar o caso limite de temperatura desprezível $k_B T \ll eV$. Nesse caso, a integral na energia é confinada no intervalo $\min(\mu_1, \mu_2) < E < \max(\mu_1, \mu_2)$ e o integrando não depende de energia. Lembrando que $\mu_1 - \mu_2 = eV$, obtemos

$$\ln[\Lambda(\chi)] = \pm \frac{2eV\Delta t}{2\pi\hbar} \sum_p \ln[1 + \tau_p(e^{\pm i\chi} - 1)], \quad (1.42)$$

onde \pm se refere ao sinal da voltagem. Vamos por simplicidade considerar $V > 0$. Defina

$N_{\text{tent}} \equiv 2eV\Delta t/2\pi\hbar$ e considere como sendo um inteiro. A função característica se torna

$$\Lambda(\chi) = \prod_p \Lambda_p(\chi);$$

$$\Lambda_p(\chi) = [(1 - \tau_p) + \tau_p e^{i\chi}]^{N_{\text{tent}}} = \sum_{N=0}^{N_{\text{tent}}} \binom{N_{\text{tent}}}{N} \tau_p^N (1 - \tau_p)^{N_{\text{tent}}-N} e^{iN\chi}.$$

Portanto, temos a distribuição binomial

$$P_N^{(p)} = \binom{N_{\text{tent}}}{N} \tau_p^N (1 - \tau_p)^{N_{\text{tent}}-N}, \quad (1.43)$$

a qual é muito conhecida da teoria dos jogos: um dado sucesso de chance τ_p acontece N vezes em N_{tent} tentativas.

Em temperatura zero e voltagem positiva, todos os elétrons saem do reservatório esquerdo tentando atingir o direito. A interpretação binomial sugere que o feixe de elétrons incidentes é muito regular: o intervalo de tempo entre as chegadas sucessivas de elétrons é a mesma, $\Delta t/N_{\text{tent}} = e/G_Q V$. Cada um desses elétrons pode passar a barreira (com probabilidade τ_p) ou ser refletido (com probabilidade $R_p = 1 - \tau_p$). O número médio dos elétrons que passam é $N_{\text{tent}}\tau_p$, de acordo com a fórmula de Landauer. Assim a Eq. (1.43) descreve a probabilidade P_N de N dos N_{tent} elétrons que chegam até a barreira conseguirem ultrapassá-la, sendo $N_{\text{tent}} - N$ refletidos.

Para o caso de mais de um canal, a distribuição binomial já não descreve mais o transporte. Mas, ainda assim, podemos obter uma convolução de distribuições binomiais correspondentes a cada canal.

Em geral, os elétrons aparecem do reservatório esquerdo de uma forma irregular. Se τ_p é pequeno, podemos considerar que o intervalo entre a emissão de cada elétron é grande. Sendo assim, dois elétrons emitidos sequencialmente são descorrelacionados. Se tomarmos o limite de $\tau_p \ll 1$ na FLL, obtemos a função característica (1.38) com $\tilde{N}/\Delta t = (G_Q V/e) \sum_p \tau_p = GV/e = \langle I \rangle / e$. Então, a distribuição de Poisson (1.40) é o limite da distribuição binomial (1.43) para $\tau_p \ll 1$ e $N \ll N_{\text{tent}}$.

1.6.4 Cumulantes de transferência de carga

Sabemos que a distribuição de transferência de carga depende dos autovalores de transmissão do sistema. Porém, veremos na sec. 1.8 que, em sistemas com dinâmica caótica, os autovalores de transmissão são variáveis aleatórias. Neste caso, a distribuição

de transferência de cargas flutua estatisticamente e, conseqüentemente, seus cumulantes são variáveis aleatórias. Sendo assim, ao invés de analisar a distribuição completa de transferência de carga, é conveniente analisar a estatística de cada cumulante de transferência de cargas separadamente. Por isso, iremos apresentar estes cumulantes em função dos autovalores de transmissão.

Nosso principal interesse é a estatística de contagem de carga no limite de temperatura desprezível $k_B\mathcal{T} \ll eV$. Nesta situação, a FLL [eq. (1.42)] é

$$\ln[\Lambda(\chi)] = \sum_j \ln[1 + \tau_j(e^{i\chi} - 1)], \quad (1.44)$$

onde fizemos $N_{\text{tent}} \equiv eV\Delta t(\pi\hbar)^{-1} = 1$ para obtermos cumulantes de transferência de carga adimensionais (CTC). Vamos definir a seguinte função polinomial de ordem m

$$f_m(\tau) \equiv \frac{d^m}{d(i\chi)^m} \ln[1 + \tau(e^{i\chi} - 1)] \Big|_{\chi=0}. \quad (1.45)$$

Das eqs. (1.36), (1.44) e (1.45) concluímos que o m -ésimo CTC é

$$q_m(\vec{\tau}) = \sum_{j=1}^n f_m(\tau_j), \quad (1.46)$$

onde $\vec{\tau} \equiv \{\tau_j\}_{j=1}^n$ é o conjunto de autovalores de transmissão não nulos. Por simplicidade, iremos obter resultados para até $m = 4$. Sendo assim, os primeiros CTC's são a condutância, $g = q_1$, a potência do ruído de disparo, $p = q_2$, o terceiro e quarto CTC's q_3 e q_4 . Suas dependências explícitas dos autovalores de transmissão são obtidas através das eqs. (1.45) e (1.46)

$$\begin{aligned} g = q_1 &= \sum_{j=1}^n \tau_j, \\ p = q_2 &= \sum_{j=1}^n \tau_j(1 - \tau_j), \\ q_3 &= \sum_{j=1}^n \tau_j(1 - \tau_j)(1 - 2\tau_j), \\ q_4 &= \sum_{j=1}^n \tau_j(1 - \tau_j)(1 - 6\tau_j + 6\tau_j^2). \end{aligned} \quad (1.47)$$

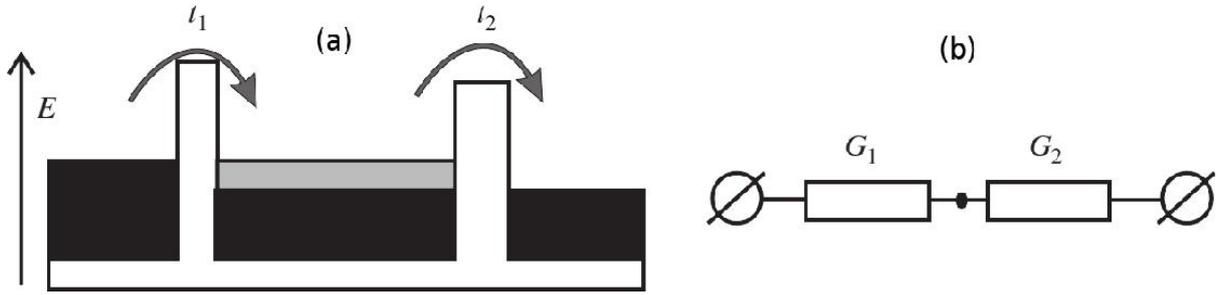


Figura 1.9 Junção dupla de tunelamento em (a) e o diagrama de circuito equivalente em (b). Figura retirada da ref. [1].

A condutância é o primeiro CTC e está ligado à média da distribuição de corrente, pois $\langle I \rangle = GV$. Analogamente, a potência do ruído de disparo representa a variância da corrente e, por isso, é o primeiro quantificador das flutuações estatísticas da contagem de carga transferidas. O terceiro CTC está ligado à assimetria da distribuição de corrente. O achatamento da curva de distribuição de corrente é quantificado pelo quarto CTC. Por exemplo, numa distribuição gaussiana, os cumulantes de ordem maior que dois são nulos, enquanto em um processo poissoniano, todos os cumulantes são iguais à média.

1.7 LIMITE CLÁSSICO: LEI DE OHM

Para ilustrarmos a diferença entre a condutância em sistemas mesoscópicos e a lei de Ohm, seguiremos a ref. [1] usando o exemplo da dupla junção de tunelamento. Considere um elétron que se propaga livremente sendo interceptado por duas barreiras de tunelamento ($|t_1|, |t_2| \ll 1$) como ilustrado na fig. 1.9. À primeira vista, com base nas regras da mecânica quântica, é intuitivo achar que a amplitude do processo total de tunelamento deve ser proporcional ao produto das amplitudes parciais $Am \propto t_1 t_2$. Usando a fórmula de Landauer, conectando a probabilidade de transmissão com a condutância, concluímos que, neste ponto de vista, a condutância total escala com o produto das condutâncias de cada barreira

$$G \propto \frac{G_1 G_2}{G_Q}. \quad (1.48)$$

Partindo da visão clássica, fazemos uso da lei de Ohm e obtemos

$$G = \frac{1}{1/G_1 + 1/G_2} = \frac{G_1 G_2}{G_1 + G_2}. \quad (1.49)$$

Com isso, podemos ver o paradoxo da dupla junção de tunelamento. Qual das duas estimativas é a correta?

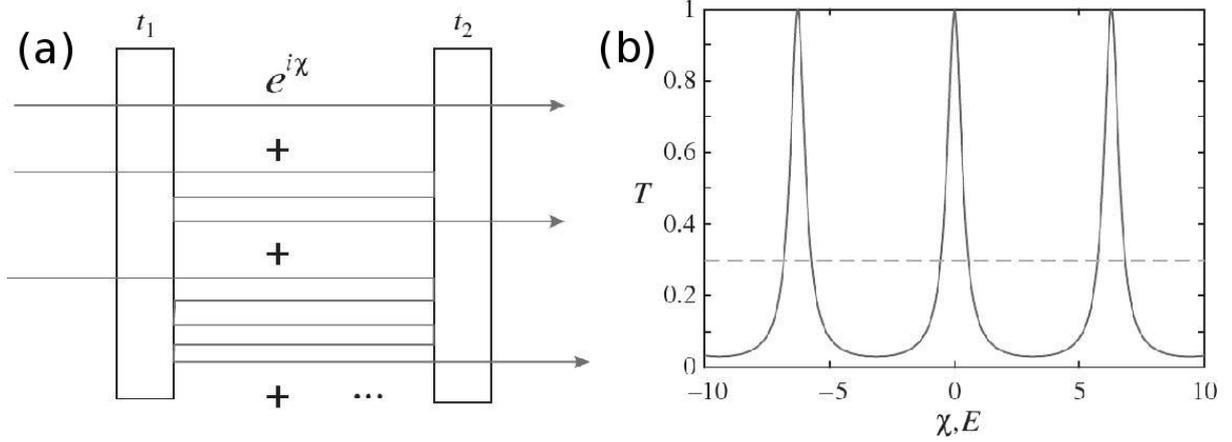


Figura 1.10 Possíveis processos de transmissão pelas duas barreiras em (a). A transmissão depende fortemente do deslocamento de fase χ ou equivalentemente, da energia E . Em (b), a linha horizontal tracejada é a transmissão promediada em χ . Figura retirada da ref. [1].

Vamos fazer um tratamento quântico mais rigoroso para o caso de um único canal de propagação. Temos que capturar todas as possibilidades de transferência do elétron entre as barreiras, incluindo as reflexões com amplitudes $r_{1,2}$. Assim, Am é a soma das amplitudes de todos os processos possíveis de transferência [fig. 1.10]. Um parâmetro importante para essa descrição é o deslocamento de fase $\chi/2$ que o elétron adquire quando viaja entre as barreiras. Portanto,

$$Am = t_1 e^{i\chi/2} t_2 + t_1 e^{i\chi/2} r_2 e^{i\chi/2} r_1 e^{i\chi/2} t_2 + \dots = \frac{t_1 t_2 e^{i\chi/2}}{1 - r_1 r_2 e^{i\chi}}. \quad (1.50)$$

Consequentemente a probabilidade de transmissão é

$$T \equiv |Am|^2 = \frac{\tau_1 \tau_2}{1 + R_1 R_2 + 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \chi}; \quad R_{1,2} \equiv 1 - \tau_{1,2}, \quad (1.51)$$

mostrando que nenhuma das duas estimativas anteriores está correta. Note que a transmissão depende explicitamente do deslocamento de fase χ , como se pode ver na fig. 1.10(b).

A próxima etapa é promediar a transmissão sob todos os valores possíveis de χ . Esse procedimento tem um sentido físico. Como a fase adquirida é proporcional à energia, temos que $d\chi/dE \propto \tau/\hbar$, onde τ é o tempo típico da propagação do elétron entre as barreiras. Sendo assim, a média em χ é equivalente a promediar sob um largo intervalo de energia. Esta promediação equivale a desprezar as interferências entre as transmissões de diferentes processos. Assim, estaremos somando probabilidades ao invés de amplitudes,

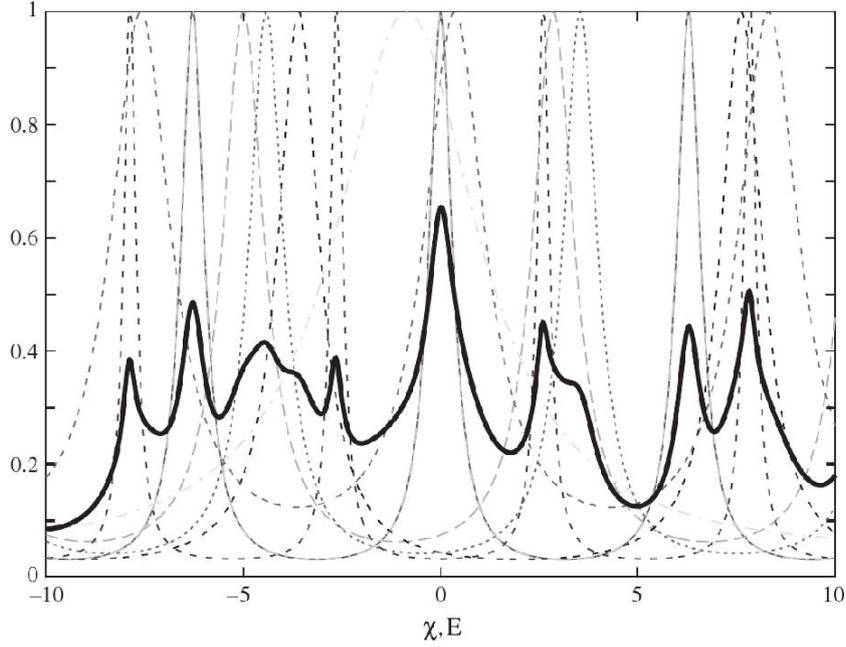


Figura 1.11 Um grande número de canais causa promediação nas propriedades de transporte. As linhas tracejadas são as transmissões de seis canais independentes com fases aleatórias. A linha sólida é a média da transmissão sobre os seis canais. Figura retirada da ref. [1].

que é a abordagem da física clássica. Promediando a transmissão, temos

$$\langle T \rangle_\chi = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\chi}{2\pi} T = \frac{\tau_1 \tau_2}{1 - R_1 R_2} = \frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2 - \tau_1 \tau_2} \approx \frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2}. \quad (1.52)$$

Vamos agora para o caso multicanal. Considerando o modelo simplista de independência entre os canais, temos

$$G = \sum_p \frac{\tau_{1,p} \tau_{2,p}}{1 + R_{1,p} R_{2,p} + 2\sqrt{R_{1,p} R_{1,p}} \cos \chi_p}. \quad (1.53)$$

O caso de seis canais está ilustrado na fig. 1.11, onde as curvas tracejadas são as contribuições de cada canal, sendo funções periódicas da energia. Contudo, os períodos e as fases iniciais de cada canal são diferentes. Sendo assim, a média das seis contribuições apresenta pequenas e irregulares flutuações como se pode ver na linha sólida. Além do mais, quanto maior o número de canais, menor serão essas flutuações (autopromediação). Sendo assim, esperamos que no limite de muitos números de canais a condutância seja muito próxima da sua média.

Perceba que a média da condutância (promediação sobre χ_p) para canais independen-

tes não é a lei de Ohm, pois

$$G = G_Q \sum_p \frac{\tau_{1,p}\tau_{2,p}}{\tau_{1,p} + \tau_{2,p}} \neq G_Q \frac{\sum_p \tau_{1,p} \sum_p \tau_{2,p}}{\sum_p \tau_{1,p} + \sum_p \tau_{2,p}} \equiv G_{\text{Ohm}}. \quad (1.54)$$

Esse modelo simples não produz a lei de Ohm no limite de muitos canais devido à independência dos canais, pois durante o processo de espalhamento os canais são misturados. Essa mistura pode ser modelada pela matriz \mathbf{S} . Porém, esse modelo ilustra a importância dos deslocamentos de fases para o transporte em estruturas mesoscópicas. Por outro lado, ainda não é possível controlar em detalhes estes deslocamentos, pois eles dependem da configuração de impurezas/defeitos do sistema, os quais são incontroláveis pelos processos de fabricação que existem atualmente. Portanto, precisamos de uma descrição estatística adequada para esses deslocamentos de fase.

1.8 DISTRIBUIÇÃO DOS AUTOVALORES DE TRANSMISSÃO

A FLL demonstra explicitamente que, em geral, as propriedades de transporte dependem de todos os autovalores de transmissão τ_p e não apenas da soma deles, como sugere a fórmula de Landauer [1]. O conjunto de todos os autovalores de transmissão pode ser visto como um “código-chave” que identifica completamente o sistema (*pin-code*). Geralmente existem inúmeros autovalores, mas muitos deles são aproximadamente nulos, sendo importante apenas um número finito destes autovalores. Para estudar propriedades de transporte, pode-se a princípio estimar os autovalores de transmissão de uma estrutura mesoscópica através de dados experimentais [14].

A desordem de condutores faz com que os autovalores de transmissão sejam aleatórios. Porém, no processo geral de transporte, estes autovalores são estatisticamente dependentes. Por exemplo, como visto na sec. 1.5, a matriz de espalhamento mais geral mistura as amplitudes de propagação em canais diferentes. Sendo assim, a informação da estatística do sistema está na distribuição conjunta de autovalores de transmissão $\rho(\vec{\tau})$, onde $\vec{\tau} \equiv \{\tau_p\}_{p=1}^n$ e n é número de autovalores de transmissão não nulos. Esta distribuição pode ser interpretada da seguinte forma: $\rho(\vec{\tau})d\vec{\tau}$ é a probabilidade de obtermos um código-chave no intervalo infinitesimal entre $\vec{\tau}$ e $\vec{\tau} + d\vec{\tau}$. Para exemplificar a dependência estatística dos autovalores de transmissão, vale a pena lembrar da distribuição conjunta dos autovalores de transmissão para um ponto quântico acoplado idealmente a dois reservatórios, com N_1 canais de espalhamento abertos em um dos acoplamentos e N_2 canais

no outro acoplamento

$$\rho(\vec{\tau}) \propto \prod_{p < q} |\tau_p - \tau_q|^\beta \prod_p \tau_p^{(\beta/2)(|N_2 - N_1| + 1 - 2/\beta)}, \quad (1.55)$$

onde β é o índice de simetria da dinâmica dos elétrons, que será visto em mais detalhes no próximo capítulo. Este resultado foi obtido através da teoria de matrizes aleatórias [7]. Perceba que, neste caso, a dependência estatística dos autovalores de transmissão está evidenciada pelo fato de não podermos escrever a distribuição conjunta como produto das distribuições individuais de cada autovalor.

Tendo em mãos $\rho(\vec{\tau})$, podemos estudar estatisticamente qualquer função de autovalores. Por exemplo, considere $h \equiv \mathcal{F}(\vec{\tau})$. Sua média é calculada da seguinte forma

$$\langle h \rangle = \int_C d\vec{\tau} \rho(\vec{\tau}) \mathcal{F}(\vec{\tau}), \quad (1.56)$$

onde C representa a integração limitada pelo hipercubo $\{0 \leq \tau_p \leq 1\}_{p=1}^n$. Além disso, podemos ter a distribuição completa de h fazendo

$$P(h) = \int_C d\vec{\tau} \rho(\vec{\tau}) \delta[h - \mathcal{F}(\vec{\tau})]. \quad (1.57)$$

Vamos agora considerar o caso particular de h ser uma estatística linear dos autovalores de transmissão, ou seja, $\mathcal{F}(\vec{\tau}) = \sum_{p=1}^n f(\tau_p)$. Além disso, a distribuição marginal do i -ésimo autovalor de transmissão é

$$\gamma_i(\tau_i) \equiv \int_0^1 d\tau_1 \dots \int_0^1 d\tau_{i-1} \int_0^1 d\tau_{i+1} \dots \int_0^1 d\tau_n \rho(\vec{\tau}). \quad (1.58)$$

Porém, é comum considerar que todos os canais são equiprováveis, existindo simetria de permutação de autovalores na distribuição conjunta

$$\rho(\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_j, \dots, \tau_n) = \rho(\tau_1, \dots, \tau_j, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n). \quad (1.59)$$

Consequentemente, temos que

$$\gamma_i(\tau_i) = \gamma_j(\tau_j) \equiv \gamma(\tau). \quad (1.60)$$

Levando em conta estas considerações, a média de h pode ser simplificada para

$$\langle h \rangle = n \int_0^1 d\tau f(\tau) \gamma(\tau). \quad (1.61)$$

Desta forma, podemos definir a *densidade* de autovalores $P(\tau)$ como

$$P(\tau) \equiv n\gamma(\tau). \quad (1.62)$$

O significado de $P(\tau)$ é simples. Suponha que tenhamos M realizações de uma estrutura mesoscópica com n autovalores de transmissão. Como os canais são equiprováveis, consideramos uma amostra de $M \times n$ autovalores. A probabilidade de obtermos um destes autovalores entre τ e $\tau + d\tau$ é $\frac{P(\tau)}{n} d\tau$. Com isso, a média da estatística linear h é dada por

$$\langle h \rangle = \int_0^1 d\tau f(\tau) P(\tau). \quad (1.63)$$

Analogamente, define-se a densidade conjunta de dois autovalores de transmissão

$$P(\tau_i, \tau_j) \equiv n^2 \gamma(\tau_i, \tau_j), \quad (1.64)$$

onde $\gamma(\tau_i, \tau_j)$ é a distribuição marginal conjunta de dois autovalores de transmissão, definida por

$$\gamma(\tau_i, \tau_j) \equiv \left(\prod_{k \neq i, k \neq j} \int_0^1 d\tau_k \right) \rho(\vec{\tau}). \quad (1.65)$$

Perceba que se $\tau_i = \tau_j \equiv \tau$, $\gamma(\tau, \tau) = \gamma(\tau)$, que é a distribuição marginal simples [eq. (1.60)]. Devido à propriedade simétrica de ρ [eq. (1.59)], o segundo momento de uma estatística linear pode ser dado por

$$\langle h^2 \rangle = \int_0^1 d\tau \int_0^1 d\tau' f(\tau) f(\tau') P(\tau, \tau'). \quad (1.66)$$

A densidade conjunta de autovalores é de grande utilidade no cálculo da variância de estatísticas lineares, pois

$$\text{var}(h) \equiv \langle (h - \langle h \rangle)^2 \rangle = \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 \quad (1.67)$$

Estimativas das densidades $P(\tau)$ e $P(\tau, \tau')$ são muito comuns em teorias semiclássicas, onde a média e a variância dos observáveis (estatísticas lineares) são suficientes para

caracterizar suas estatísticas. Porém, é importante lembrar que a distribuição de h não pode ser obtida através destas densidades. Sendo assim, a informação estatística completa de h é obtida através da distribuição conjunta de todos os autovalores, como mostra a eq. (1.57).

Existem grandezas que são estatísticas não-lineares, como é o caso da concorrência⁴, a qual quantifica o emaranhamento orbital entre estados de dois elétrons não-interagentes em uma estrutura mesoscópica com dois canais de espalhamento [15]

$$\mathcal{C} = 2 \frac{\sqrt{\tau_1(1-\tau_1)\tau_2(1-\tau_2)}}{\tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2}. \quad (1.68)$$

Neste caso, as densidades $P(\tau)$ e $P(\tau, \tau')$ também não são suficientes para caracterizar a estatística não-linear, sendo necessário conhecer-se a distribuição conjunta $\rho(\vec{\tau})$.

1.9 INTERFERÊNCIA QUÂNTICA: LOCALIZAÇÃO FRACA

Imagine um elétron entrando numa região de espalhamento caótica, podendo ser transmitido ou refletido. Classicamente, o movimento caótico implica que as probabilidades de transmissão e de reflexão devem ser iguais. Porém, quanticamente, a probabilidade de reflexão pode ser uma pouco diferente da de transmissão. Esse efeito é análogo ao que acontece num condutor quântico desordenado e é chamado de “localização fraca” (LF) [16]. Em uma formulação semiclássica, a diferença da probabilidade de reflexão em relação à de transmissão é devido à interferência entre pares de trajetórias invertidas temporalmente. Um campo magnético suficientemente forte é capaz de quebrar a simetria de reversão temporal, destruindo assim a interferência e igualando as probabilidades de transmissão e reflexão [7].

Os efeitos de interferência ficam embutidos nos autovalores de transmissão e, conseqüentemente, afetam os observáveis de transporte. Considere um observável X (\bar{X}) para um sistema com (sem) simetria de reversão temporal. Defina a correção causada pela quebra de simetria

$$\delta X \equiv \langle X \rangle - \langle \bar{X} \rangle. \quad (1.69)$$

Esta correção é tradicionalmente estudada no regime semiclássico ($G \gg G_Q$), onde seu valor, denominado localização fraca, não depende do número de canais (N) do sistema

⁴A concorrência é um quantizador de emaranhamento entre estados de dois qbits. Quando ela é 1, o emaranhamento é máximo (estados de Bell). Quando seu valor é 0, o estado é separável, o que significa que não há emaranhamento. [17]

[7]. Por isso, podemos definir a LF como

$$X_{LF} = \lim_{N \rightarrow \infty} [\langle X(N) \rangle - \langle \bar{X}(N) \rangle]. \quad (1.70)$$

Vamos colocar como exemplo a condutância. Considere que $\langle G \rangle$ é a média da condutância na presença de simetria de reversão temporal. Como a condutância tende à lei de Ohm no limite semiclássico, sua correção devido à LF é dada por

$$G_{LF} = \langle G \rangle - G_{\text{Ohm}}, \quad (1.71)$$

com $\langle G \rangle \gg G_Q$. Neste caso, vemos claramente que a LF implica na correção quântica da lei de Ohm, devido aos efeitos de interferência.

É importante ressaltar que a palavra “localização” é consequência desta correção ser usualmente negativa para a condutância ($G_{LF} < 0$) e o termo “fraca” é devido a sua pequena magnitude ($G_{LF} \sim G_Q$) comparada ao termo dominante ($G_{LF} \ll G_{\text{Ohm}}$) no regime semiclássico. Para outros observáveis, esta correção pode ser positiva, como por exemplo, a potência do ruído de disparo para pontos quânticos com contatos não-ideais, onde a LF apresenta efeitos de amplificação-supressão [52].

1.10 FLUTUAÇÕES UNIVERSAIS

Na sec. 1.8, vimos que os autovalores de transmissão são considerados aleatórios. Consequentemente, as funções destes autovalores também são aleatórias, como por exemplo, os cumulantes de carga. Sabemos que se aumentarmos as dimensões de um condutor, o número de autovalores de transmissão do sistema aumentará e, consequentemente, sua condutância também aumentará, pois a mesma depende linearmente do número de canais abertos do sistema. Porém, a variância não se comporta desta forma, pois ela é da ordem de G_Q^2 e satura com o aumento das dimensões do sistema [7].

A condutância em uma mesma estrutura mesoscópica, sob as mesmas condições, não flutua no tempo. Porém, este valor varia para uma estrutura mesoscópica idêntica (construída com o mesmo material e pelo mesmo processo), pois a distribuição de impurezas/defeitos é incontrolável no processo de construção do sistema e, portanto, se modifica de uma amostra para outra, influenciando o valor da condutância. Estas variações podem ser observadas numa mesma estrutura mesoscópica aplicando um campo magnético, pois os padrões de interferências causados pelo campo são similares aos causados pela mudança na distribuição de impurezas [7]. Na fig. 1.12 podemos ver medidas experimentais [10]

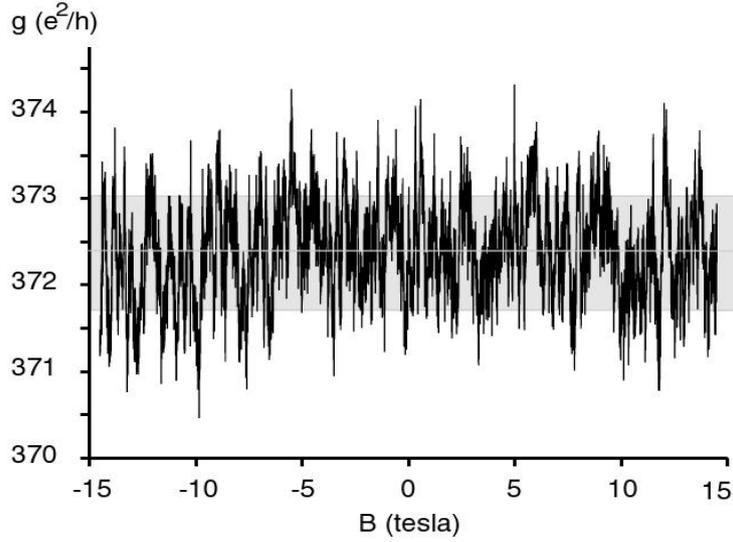


Figura 1.12 Condutância em função de um campo magnético perpendicular aplicado a um fio de ouro quase-unidimensional. A média sobre as flutuações está representada pela linha clara em torno de $372,3e^2/h$. O desvio padrão está representado por metade da largura em cinza em torno da média e é da ordem de $0,6e^2/h$. Figura retirada da ref. [10].

que comprovam as flutuações de condutância para um fio de ouro quase-unidimensional em função do campo magnético.

É importante exemplificar teoricamente com o caso de um ponto quântico acoplado idealmente a reservatórios, com N_1 e N_2 sendo os números de canais abertos em cada contato. A média e a variância da condutância são [7]

$$\langle G \rangle / G_Q = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta}; \quad (1.72)$$

$$\text{var}(G/G_Q) = \frac{2}{\beta} \frac{N_1 N_2 (N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{(N_1 + N_2 - 2 + 2/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 4/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta)^2}, \quad (1.73)$$

onde β é o índice de simetria da cavidade (ver cap. 2). Agora vamos considerar casos particulares. Considere o regime semiclassico, ou seja, $N_1, N_2 \gg 1$. Com isso, temos

$$\langle G \rangle / G_Q = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2}; \quad (1.74)$$

$$\text{var}(G/G_Q) = \frac{2(N_1 N_2)^2}{\beta(N_1 + N_2)^4}. \quad (1.75)$$

Perceba que na eq. (1.74), o primeiro termo é a lei de Ohm para a associação em série de dois condutores de condutâncias N_1 e N_2 em unidades de G_Q . O segundo termo é a

correção em decorrência da LF, o qual é nulo na ausência de simetria de reversão temporal ($\beta = 2$). Se o sistema for simétrico $N_1 = N_2 \equiv N$ temos

$$\langle G \rangle / G_Q = \frac{N}{2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{1}{4}; \quad (1.76)$$

$$\text{var}(G/G_Q) = \frac{1}{8\beta}. \quad (1.77)$$

Neste caso, vemos que tanto a correção de LF como a variância da condutância não dependem do tamanho do sistema (N) e são muito menores que $\langle G \rangle$. Isso ratifica a flutuação universal de condutância para o ponto quântico simétrico.

Vamos considerar agora o caso não-simétrico $N_2 \gg N_1$, onde temos

$$\langle G \rangle / G_Q = N_1 + \left(N_1 - 1 + \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1}{N_2}; \quad (1.78)$$

$$\text{var}(G/G_Q) = \frac{2}{\beta} \frac{N_1(N_1 - 1 + 2/\beta)}{N_2^2}. \quad (1.79)$$

Novamente notamos a lei de Ohm presente no primeiro termo da eq. (1.78), que se refere à associação de um condutor de resistência $1/(N_1 G_Q)$ com outro condutor aproximadamente perfeito (resistência $1/(N_2 G_Q) \ll 1$). A correção de LF é praticamente desprezível, pois é da ordem de $N_1/N_2 \ll 1$. A eq. (1.79) mostra que a variância também é praticamente nula comparada à média da condutância. Nesta situação, aumentar N_1 não influencia consideravelmente a estatística da condutância do sistema, pois as flutuações são desprezíveis em torno do valor esperado pela lei de Ohm.

A variância de outros cumulantes de carga também apresentam comportamentos análogos ao da condutância. Sendo assim, as flutuações universais podem ser vistas em outros observáveis de corrente [7].

1.11 CARACTERIZAÇÃO DOS REGIMES DE TRANSPORTE

Os cumulantes de carga são estatísticas lineares dos autovalores de transmissão [ver eq. (1.47)], como por exemplo a condutância $G/G_Q = \sum_p \tau_p$. Sendo assim, como visto na sec. 1.8, suas médias e variâncias podem ser obtidos através das densidades de autovalores de transmissão $P(\tau)$ e $P(\tau, \tau')$. Por sua vez, quando $\langle G \rangle \gg G_Q$ estamos no regime semiclassico, o qual tem como característica o grande número de canais de transmissão abertos e, portanto, o código-chave é denso, levando a uma promediação dos observáveis de transporte, como visto na sec. 1.7. Conseqüentemente, as distribuições dos cumulantes

de carga tendem a se tornar gaussianas. Sendo assim, neste regime, as médias e as variâncias caracterizam quase toda a estatística destes observáveis e, portanto, $P(\tau)$ e $P(\tau, \tau')$ são capazes de fornecer a ECC completa do sistema.

No entanto, quando o número de canais é pequeno, esta autopromediação não acontece e, conseqüentemente, as distribuições dos cumulantes de carga não são necessariamente gaussianas e em muitas situações são tão irregulares, que apresentam não-analiticidades (ver cap. 7). Neste caso, média e variância informam pouco da estatística de cada observável. Portanto, para se ter uma boa descrição estatística do cumulante de carga é preciso conhecer sua distribuição completa, a qual não pode ser obtida através das densidades $P(\tau)$ e $P(\tau, \tau')$, sendo necessário ter $\rho(\vec{\tau})$ para se caracterizar completamente a ECC. Este regime é chamado de *limite quântico extremo* (LQE), o qual é inalcançável por técnicas analíticas baseadas em teoria de perturbação.

O transporte quântico pode ser caracterizado através dos seus observáveis. O primeiro cumulante de carga é a condutância, o qual desempenha papel fundamental nesta caracterização. Podemos, através deste observável, entender como acontece a transição dos regimes de transporte da seguinte forma:

- **Limite quântico extremo:**

- $\langle G \rangle \sim G_Q$;
- $\sqrt{\text{var}(G)} / \langle G \rangle \sim 1$;
- $P(G) =$ distribuição irregular.

- **Regime semiclássico:**

- $\langle G \rangle \approx G_{\text{Ohm}} + G_{LF}$;
- $\sqrt{\text{var}(G)} / \langle G \rangle \ll 1$;
- $P(G) \approx$ gaussiana.

- **Regime clássico:**

- $\langle G \rangle = G_{\text{Ohm}}$;
- $\sqrt{\text{var}(G)} / \langle G \rangle = 0$;
- $P(G) = \delta(G - G_{\text{Ohm}})$.

Apesar deste esquema ser muito simplista, ele nos possibilita ter uma boa intuição sobre a caracterização do transporte. Obviamente, cumulantes de carga de ordem maior, como a potência do ruído de disparo (segundo cumulante de carga), são mais sensíveis a

esta transição entre regimes de transporte. Sendo assim, a caracterização do transporte dependerá do observável de interesse. Por exemplo, pode existir uma situação onde a distribuição de condutância é praticamente gaussiana, indicando proximidade do regime semiclássico, mas a do quarto cumulante de carga é irregular, revelando estar próxima do LQE. Este comportamento será discutido com mais detalhes nos capítulos 4 e 6.

1.12 MÉTODOS PARA ESTUDAR TRANSPORTE EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

Um dos mais simples e eficientes métodos para estudar o transporte quântico em sistemas mesoscópicos consiste em decompor o sistema como partes de um circuito, onde seus elementos são divididos entre reservatórios, conectores e nós [1]. Os reservatórios são descritos por funções de distribuição de equilíbrio, os conectores são caracterizados por seus autovalores de transmissão, os quais são variáveis determinísticas, enquanto os nós possuem deslocamentos de fase incontroláveis devido à desordem (ou ao caos em pontos quânticos).

A parte mais difícil na descrição de circuitos é eliminar graus de liberdade irrelevantes, relacionados a escalas muito pequenas, em decorrência da desordem ou do caos. Existem algumas técnicas que se propõem resolver este problema, dentre elas a abordagem de funções de Green de Keldysh [1], a expansão perturbativa diagramática do grupo unitário [18, 19] e o modelo sigma não-linear supersimétrico [20]. No entanto, somente algumas técnicas conseguem explorar o regime não-perturbativo caracterizado pelo limite quântico extremo. Para um único ponto quântico com contatos ideais, este regime já foi acessado através de teoria de matrizes aleatórias [21, 18] e por integrais de Selberg [22, 23, 24, 25].

No entanto, já sabemos que o efeito de contatos não-ideais influencia consideravelmente a estatística dos cumulantes de transferência de carga, como por exemplo a correção devido à localização fraca da potência do ruído de disparo [52]. Além disso, as transparências das barreiras que modelam os contatos podem ser controladas experimentalmente através de portões de voltagem [26]. As distribuições de CTC's são mensuráveis experimentalmente em muitas situações [27, 10] e são fundamentais na caracterização geral do transporte quântico.

Recentemente, a estatística dos CTC's para um ponto quântico não-ideal em regime de transporte arbitrário foi estudado através do modelo sigma não-linear supersimétrico, onde foram encontradas expressões integrais multidimensionais para os momentos dos CTC's [28, 29]. Os resultados destas integrais foram extraídos numericamente. Além de se tratar de um método complexo e pouco intuitivo, não é possível obter as distribuições

completas dos CTC's através do modelo sigma supersimétrico, as quais são relevantes no estudo do transporte no limite quântico extremo. Este regime é importante para o entendimento das flutuações quânticas dos observáveis de transporte e, além disso, é acessível através de experimentos [27].

Diante destas dificuldades metodológicas, motivamo-nos a tratar o transporte em um ponto quântico não-ideal numericamente. A eliminação dos graus de liberdade incontroláveis devido ao caos da cavidade é feita através de um algoritmo que gera aleatoriamente a matriz de espalhamento do ponto quântico, com a qual calculamos os observáveis físicos. Depois de várias realizações numéricas, obtemos uma amostra suficientemente grande dos observáveis para estudarmos sua estatística. Assim, obtemos suas distribuições de probabilidade, com as quais conseguimos caracterizar toda a estatística dos CTC's em qualquer regime de transporte [30].

O acoplamento de pontos quânticos possibilita descrever teoricamente efeitos mais gerais presentes no transporte quântico em estruturas mesoscópicas. Um deles é o efeito de descoerência, o qual pode ser implementado em um ponto quântico, acoplado a um estube caótico, o qual consiste de outra cavidade caótica [31] que só possui uma abertura, referente ao acoplamento. O estube pode absorver e reinjetar elétrons no sistema com fases modificadas aleatoriamente. O acoplamento de pontos, formando redes, também facilita a conexão entre a teoria e os experimentos na descrição da dependência dos observáveis de transporte com variações de temperatura e campo magnético [19]. Outra vantagem de acoplar pontos é o estudo de efeitos de reservatórios supercondutores ou ferromagnéticos através de um modelo que acopla dois pontos quânticos [32, 33]. No caso ferromagnético (supercondutor), um dos pontos desempenha o papel do transporte de elétrons com spin para cima (elétrons) e o de spin para baixo (buracos) é descrito pelo outro ponto. Todos estes efeitos são importantes na evolução dos conceitos teóricos para descrever o transporte quântico e também para o desenvolvimento de nanotecnologia, como por exemplo a spintrônica e a computação quântica.

Sendo assim, percebemos a importância de desenvolver um método que permita estudar o transporte de unidades de carga em redes de pontos quânticos nas condições mais gerais possíveis. Por isso, construímos algoritmos capazes de encontrar o centro espalhador efetivo do acoplamento de pontos quânticos em redes de topologias arbitrárias. Desenvolvemos regras para concatenar pontos quânticos acoplados em série ou em paralelo, análogas às regras de circuitos clássicos. Estas regras são algebricamente bem definidas e de simples manipulação. Com elas, podemos obter a matriz de espalhamento efetiva de redes de pontos quânticos de qualquer topologia. Através dos geradores numéricos de

matrizes aleatórias, usamos estes algoritmos para obter as distribuições de probabilidade dos CTC's em regimes arbitrários de transporte de maneira precisa e eficiente.

1.13 SUMÁRIO GERAL DA TESE

Vimos neste capítulo introdutório uma revisão sobre conceitos gerais do transporte quântico em sistemas mesoscópicos. Comentamos sobre as propriedades ondulatórias dos elétrons e de como os efeitos de interferência podem influenciar os observáveis de transporte. Apresentamos a estatística de contagem de carga e a importância dela para a caracterização dos sistemas mesoscópicos.

Revisaremos a teoria de matrizes aleatórias no próximo capítulo, a qual descreve a universalidade da dinâmica caótica presente em cavidades. Mostraremos como modelar as simetrias de reversão temporal e de rotação de spin no transporte quântico. Apresentaremos o ensemble de matrizes aleatórias gaussianas, usado para descrição hamiltoniana, e o circular, usado para modelar diretamente as matrizes de espalhamento. Descreveremos algoritmos para gerar numericamente estes ensembles.

O cap. 3 será destinado ao desenvolvimento de algoritmos baseados em teoria de matrizes aleatórias para estudar transporte em redes de pontos quânticos. Apresentaremos um algoritmo fundamentado no formalismo hamiltoniano. Em seguida, desenvolveremos algoritmos mais eficientes baseados no formalismo da matriz de espalhamento, onde criaremos regras de concatenação de centros de espalhamento em série e em paralelo, tornando possível aplicar estes algoritmos em redes de pontos quânticos de qualquer topologia.

Nossos algoritmos serão aplicados a um ponto quântico não-ideal no cap. 4. Mostraremos as distribuições de probabilidade dos quatro primeiros CTC's variando os números de canais de espalhamento e as transparências das barreiras. As irregularidades nas distribuições dos CTC's serão vistas explicitamente no limite quântico extremo, inclusive não-analiticidades. Além disso, mostraremos semelhanças entre as distribuições de condutâncias com diferentes parâmetros do sistema.

No cap. 5, abordaremos métodos de inferência bayesiana, que usaremos para estimar com precisão valores de localização fraca e variância dos CTC's. Estas estimativas serão feitas através de dados da nossa simulação, os quais contêm elevado ruído numérico.

Estudaremos o transporte em duas topologias de redes de pontos quânticos no cap. 6: uma cadeia finita de pontos e um anel de quatro pontos. Usaremos nossos algoritmos para estudar estes sistemas. Mostraremos a concordância dos nossos resultados com outros obtidos recentemente para estes sistemas no regime semiclássico. Apresentaremos as distribuições dos quatro primeiros CTC's, os quais no limite quântico extremo também

possuem não-analiticidades. As semelhanças nas distribuições de condutância também serão observadas nestes sistemas.

No cap. 7, desenvolveremos um argumento geométrico que justifica as não-analiticidades nas distribuições dos CTC's. Além disso, calcularemos os valores explícitos dos CTC's onde estas não-analiticidades podem ocorrer.

Finalmente no cap. 8, apresentaremos as conclusões e perspectivas do nosso trabalho.

CAPÍTULO 2

A TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS

A teoria de matrizes aleatórias (TMA) [34] é uma ferramenta estatística moderna com aplicações em diversas áreas da ciência, descrevendo sistemas que apresentam propriedades universais. Esta é uma das características mais marcantes do caos quântico [35, 36, 37], o que torna ideal para uma descrição via TMA.

No transporte de cargas através de pontos quânticos caóticos, a dinâmica no interior da cavidade pode ser descrita por uma matriz hamiltoniana (\mathbf{H}) aleatória, pertencente ao ensemble gaussiano, o qual possui classes de universalidade que dependem de vínculos e simetrias da cavidade. As classes mais comuns são as de Wigner-Dyson (WD), usadas para descrever o transporte de cargas não-interagentes no regime balístico. A classe ortogonal se aplica a cavidades que possuem simetria de reversão temporal e de rotação de spin. A classe unitária é aplicada em cavidades onde existe a quebra da reversão temporal, causada, por exemplo, pela aplicação de um forte campo magnético. Finalmente, a classe simplética descreve sistemas com simetria de reversão temporal, na ausência de invariância de rotação de spin.

A matriz de espalhamento (\mathbf{S}) é fundamental para estudar as propriedades de transporte através do formalismo de Landauer-Büttiker. Apesar de ser possível conhecer esta matriz através do hamiltoniano [38], a cavidade caótica pode ser descrita diretamente por \mathbf{S} sem se referir a \mathbf{H} . Para isso, fazemos uso do ensemble circular [39], o qual possui as mesmas três classes de universalidade de WD.

Neste capítulo, faremos uma breve revisão da teoria de matrizes aleatórias, baseada na ref. [34] e mostraremos como gerar numericamente o ensemble gaussiano e o circular, os quais usaremos para estudar transporte quântico por, respectivamente, duas abordagens distintas: a hamiltoniana e a da matriz de espalhamento.

2.1 REVERSÃO TEMPORAL

Através de considerações físicas, o operador de reversão temporal deve ser antiunitário [40], tendo portanto a seguinte forma

$$\mathbf{T} = \mathbf{K}\mathbf{C}, \quad (2.1)$$

onde \mathbf{K} é um operador unitário fixo e \mathbf{C} toma o complexo conjugado da expressão que o sucede. Sendo assim, um estado que sofre reversão temporal se transforma para

$$\psi^R = \mathbf{T}\psi = \mathbf{K}\psi^*. \quad (2.2)$$

Pela condição $\langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle = \langle \psi^R | \mathbf{A}^R | \phi^R \rangle$ e por (2.2), deduzimos que a transformação sob reversão temporal de um operador autoadjunto \mathbf{A} é

$$\mathbf{A}^R = \mathbf{K}\mathbf{A}^T\mathbf{K}^{-1}, \quad (2.3)$$

onde \mathbf{A}^T é o transposto de \mathbf{A} . Um sistema é invariante sob reversão temporal se seu hamiltoniano é autodual, isto é

$$\mathbf{H}^R = \mathbf{H}. \quad (2.4)$$

Quando a representação dos estados é mudada por uma transformação unitária, $\psi \rightarrow \mathbf{U}\psi$, \mathbf{T} se transforma de acordo com

$$\mathbf{T} \rightarrow \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^\dagger, \quad (2.5)$$

e conseqüentemente

$$\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{U}\mathbf{K}\mathbf{U}^T. \quad (2.6)$$

A dupla aplicação da reversão temporal não deve mudar fisicamente o sistema, podendo haver apenas a introdução de uma fase no estado. Portanto, temos

$$\mathbf{T}^2 = \alpha\mathbf{1}, \quad |\alpha| = 1. \quad (2.7)$$

Conseqüentemente,

$$\mathbf{T}^2 = \mathbf{K}\mathbf{C}\mathbf{K}\mathbf{C} = \mathbf{K}\mathbf{K}^* = \alpha\mathbf{1}. \quad (2.8)$$

Mas $\mathbf{1} = \mathbf{K}\mathbf{K}^\dagger = \mathbf{K}^*\mathbf{K}^T$ e portanto

$$\mathbf{K} = \alpha\mathbf{K}^T = \alpha(\alpha\mathbf{K}^T)^T = \alpha^2\mathbf{K}. \quad (2.9)$$

Sendo assim $\alpha = \pm 1$. Isso implica dizer que a matriz unitária \mathbf{K} é simétrica,

$$\mathbf{K}\mathbf{K}^* = \mathbf{1}, \quad (2.10)$$

ou antissimétrica,

$$\mathbf{K}\mathbf{K}^* = -\mathbf{1}. \quad (2.11)$$

Estas alternativas correspondem, respectivamente, aos casos de spins inteiros (bósons) e semi-inteiros (férmions) [40].

2.2 O ENSEMBLE GAUSSIANO

A dinâmica universal de elétrons não-interagentes no interior de uma cavidade caótica pode ser descrita por um hamiltoniano \mathbf{H} que pertence ao ensemble gaussiano de matrizes aleatórias, onde seus elementos são independentes e distribuídos gaussianamente. Por outro lado, as simetrias e vínculos da dinâmica da cavidade determinam a classe de \mathbf{H} .

2.2.1 Classes de universalidade

São três as classes de universalidade de WD: ortogonal, simplética e unitária. Elas se diferenciam quanto a existência ou não de simetrias de reversão temporal e de invariância por rotação de spin. Devido a estas simetrias, alguns vínculos são impostos à matriz hamiltoniana, mudando sua forma de uma classe para outra.

Ensemble gaussiano ortogonal (EGO): Considere que a dinâmica possui simetria de reversão temporal e invariância sob rotação de spin, tendo portanto a eq. (2.10) como válida. Sendo assim, sempre existe um operador unitário \mathbf{U} tal que

$$\mathbf{K} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T. \quad (2.12)$$

Pela eq. (2.6), uma transformação $\psi \rightarrow \mathbf{U}^{-1}\psi$ leva \mathbf{K} à unidade. Então, neste caso, podemos sempre escolher uma representação de estados onde

$$\mathbf{K} = \mathbf{1}. \quad (2.13)$$

Logo, de (2.13), (2.3) e de (2.4), temos que $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T$. Como $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$, o *hamiltoniano deve ser uma matriz real e simétrica*.

Ensemble gaussiano simplético (EGS): Considere que a dinâmica possui simetria de reversão temporal, mas não seja invariante sob rotação de spin, tendo consequentemente a eq. (2.11) como válida. Neste caso, podemos escolher sempre uma representação onde o operador unitário \mathbf{K} possua a seguinte forma

$$\mathbf{K} = i \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 & \cdots \\ 0 & \sigma_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

onde cada um de seus elementos é um bloco 2×2 e σ_2 é uma das três matrizes de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

No caso simplético, temos apenas a condição de reversibilidade temporal $\mathbf{H}^R = \mathbf{H}$ e a hermiticidade do hamiltoniano, que leva a

$$\mathbf{H}^R = \mathbf{H}^\dagger, \quad (2.16)$$

que é condição necessária e suficiente para que os elementos de \mathbf{H} sejam *quatérnions reais* [34]. Sendo assim, o hamiltoniano em geral é decomposto na base de quatérnions da seguinte forma

$$\mathbf{H} = {}^0\mathbf{H} + \sum_{n=1}^3 {}^n\mathbf{H}e_n \quad (2.17)$$

onde ${}^n\mathbf{H}$ com $n = 0, 1, 2$, ou 3 é uma matriz real e $\{e_n\}_{n=0}^3$ é uma base quaterniônica. Por exemplo, essa base pode ser o espaço L.I. de matrizes 2×2 , composto pela identidade $e_0 = 1$, referente à parte real do quatérnion e pelas matrizes de Pauli $e_n = i\sigma_n$, com $n = 1, 2$ ou 3 , que correspondem às partes imaginárias quaterniônicas. O conjugado hermitiano da matriz quaterniônica real é

$$\mathbf{H}^\dagger = ({}^0\mathbf{H})^T - \sum_{n=1}^3 ({}^n\mathbf{H})^T e_n. \quad (2.18)$$

Como $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$, concluímos que *a parte real do hamiltoniano deve ser simétrica e as imaginárias antissimétricas*.

Ensemble gaussiano unitário (EGU): Se considerarmos que a dinâmica não possui simetria de reversão temporal, o hamiltoniano não precisa ser nem real e nem autodual. O seu único vínculo é ser hermitiano. Portanto, podemos escrevê-lo da seguinte forma:

$$\mathbf{H} = {}^0\mathbf{H} + {}^1\mathbf{H}i, \quad (2.19)$$

onde ${}^0\mathbf{H}$ e ${}^1\mathbf{H}$ são respectivamente as partes reais e imaginárias do hamiltoniano e, portanto, são matrizes reais. Como o hamiltoniano é hermitiano, concluímos que sua *parte real é simétrica e a imaginária é antissimétrica*.

2.2.2 Distribuição de probabilidade

Uma forma geral de escrever o hamiltoniano é

$$\mathbf{H} = {}^0\mathbf{H} + \sum_{n=1}^{\beta-1} {}^n\mathbf{H}e_n \quad (2.20)$$

onde β é o índice de simetria da cavidade e assume os valores: 1 para o EGO, 2 para o EGU e 4 para o EGS. Para $\beta = 2$, $e_1 = i$ e para $\beta = 4$, $e_n = i\sigma_n$. Além disso, ${}^0\mathbf{H}$ é simétrica e ${}^n\mathbf{H}$ com $n = 1, 2$ ou 3 é antissimétrica. Podemos escrever a distribuição para o hamiltoniano como

$$P(\mathbf{H}) \propto \exp \left[-\frac{\beta}{4\mathcal{V}} \text{tr}(\mathbf{H}^2) \right] \quad (2.21)$$

onde

$$\langle {}^n H_{p,q} \rangle = 0 \quad (2.22)$$

e

$$\langle {}^n H_{pq} {}^m H_{rs} \rangle = \delta_{pr} \delta_{qs} \delta_{nm} \mathcal{V} \left[\left(2\delta_{n0} - \frac{1}{\beta} \right) \delta_{pq} + \frac{1}{\beta} \right]. \quad (2.23)$$

Mais detalhes sobre a dedução das equações (2.22) e (2.23) estão no apêndice A.

2.2.3 Geração numérica

Para obter numericamente o hamiltoniano pertencente ao ensemble gaussiano, precisamos gerar uma matriz real simétrica e mais $\beta - 1$ matrizes reais antissimétricas. Suponha que o hamiltoniano tenha dimensão M . Por simplicidade, chamaremos de números gaussianos (NG), as variáveis aleatórias reais regidas por uma distribuição gaussiana de

média nula. Os valores da variância são dados de acordo com a eq. (2.23). Sendo assim, para a matriz simétrica precisamos de M NG com variância de $2\mathcal{V}$ para a sua diagonal e de $M(M-1)/2$ NG com variância \mathcal{V}/β para o restante do seu triângulo superior, que deve ser igual ao triângulo inferior. As matrizes antissimétricas precisam apenas de $M(M-1)/2$ NG de variância \mathcal{V}/β para seu triângulo superior, seu triângulo inferior é simplesmente o negativo do superior e sua diagonal é nula.

Sendo assim, o problema se resume em gerar números aleatórios gaussianos. Isso pode ser feito usando a parametrização de Box-Müller [41], a qual transforma dois números aleatórios independentes uniformemente distribuídos no intervalo $[0, 1[$ em duas variáveis aleatórias independentes distribuídas por uma gaussiana de variância 1 e média 0, os quais multiplicados por σ e somados a μ são números aleatórios distribuídos por uma gaussiana de média μ e variância σ^2 . A parametrização de Box-Müller está descrita no apêndice B.

2.3 O ENSEMBLE CIRCULAR

Sabemos de problemas básicos de mecânica quântica (como poço ou barreiras de potencial) que através dos autoestados do hamiltoniano do sistema, é possível obter os coeficientes de reflexão e de transmissão das partículas, no que diz respeito ao transporte na região de espalhamento. Porém, como vimos na sec. 1.5, a matriz de espalhamento já contém essa informação, pois ela relaciona as amplitudes das funções de onda que entram na região de espalhamento com as amplitudes de saída. Para que haja conservação da densidade de probabilidade, essa matriz deve ser unitária. Como no regime de caos, o espalhamento é visto como um processo estocástico, Dyson introduziu seu ensemble circular de matrizes aleatórias, onde as matrizes são unitárias [42].

2.3.1 Classes de universalidade

As classes de WD também estão presentes no ensemble circular, referentes às simetrias da cavidade já mencionadas na seção anterior. Vamos ver a forma das matrizes deste ensemble para cada uma das três classes.

Ensemble circular unitário (ECU): Sem a imposição da reversão temporal, a única exigência para a matriz pertencente ao ECU é que ela seja unitária, ou seja,

$$\mathbf{U}_2^{-1} = \mathbf{U}_2^\dagger. \quad (2.24)$$

Ensemble circular ortogonal (ECO): Impondo simetrias de reversão temporal e de invariância sob rotação de spin, temos a eq. (2.10) como válida. Portando, a matriz do ECO além ser unitária, deve ser simétrica. Toda matriz com este vínculo pode ser escrita como

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2^T \mathbf{U}_2. \quad (2.25)$$

Ensemble circular simplético (ECS): Impondo simetria de reversão temporal, sem a invariância sob rotação de spin, a equação válida é a (2.11). Por isso, a matriz do ECS além ser unitária, deve ser antissimétrica. Respeitando estas imposições, podemos escrever essa matriz como

$$\mathbf{U}_4 = \mathbf{U}_2^R \mathbf{U}_2, \quad (2.26)$$

onde o R se refere à operação de autodualidade referente à equação (2.3), onde, de acordo com a eq. (2.14), $\mathbf{K} = e_2 \mathbf{1}$ e e_2 é a segunda unidade quaterniônica. Sendo assim, \mathbf{U}_4 é uma matriz de quatérnions reais [34].

2.3.2 Medida de Haar

Considere a matriz \mathbf{U}_2 do ECU e \mathbf{W} e \mathbf{V} matrizes unitárias $N \times N$, tais que $\mathbf{U}_2 = \mathbf{WV}$. Então, nas vizinhanças de \mathbf{U}_2 , temos

$$\mathbf{U}_2 + d\mathbf{U}_2 = \mathbf{W}(\mathbf{1} + id\mathbf{X})\mathbf{V} \quad (2.27)$$

onde $d\mathbf{X} \equiv d\mathbf{X}^{(1)} + id\mathbf{X}^{(2)}$ é uma matriz hermitiana infinitesimal. O volume (medida) da vizinhança, é definido por

$$\mu_2(d\mathbf{U}_2) = \prod_{i \leq j} dX_{i,j}^{(1)} \prod_{i < j} dX_{i,j}^{(2)}, \quad (2.28)$$

a qual não depende das escolhas de \mathbf{W} e \mathbf{V} e é, justamente, a medida invariante sob transformações unitárias do grupo unitário $U(N)$ (medida de Haar) [42, 34]. Sendo assim, a probabilidade de uma matriz do ECU ser encontrada entre $\mathbf{U}_2 + d\mathbf{U}_2$ é proporcional à esta medida

$$P(\mathbf{U}_2)d\mathbf{U}_2 = \mathcal{N}\mu_2(d\mathbf{U}_2), \quad (2.29)$$

onde \mathcal{N} é uma constante de normalização.

2.3.3 Geração numérica

Para gerar uma matriz do ECU, usaremos o algoritmo da ref. [43], o qual se baseia na parametrização de Hurwitz [44]. Ela consiste na escolha apropriada de ângulos de Euler para que a matriz \mathbf{U}_2 seja decomposta em transformações unitárias elementares. Isto gera uma medida de Haar em função dos ângulos de Euler. Variando estes ângulos no domínio apropriado, obtemos matrizes pertencentes ao ECU. Para obter matrizes ECO e ECS, geramos \mathbf{U}_2 e depois usamos respectivamente as parametrizações (2.25) e (2.26). A descrição da parametrização de Hurwitz e do algoritmo para gerar matrizes pertencentes ao ECU está presente no apêndice C.

2.4 SUMÁRIO

Neste capítulo vimos uma revisão da teoria de matrizes aleatórias focada na descrição da dinâmica caótica presente em pontos quânticos. Apresentamos o ensemble gaussiano e o circular, os quais descrevem respectivamente o hamiltoniano e a matriz de espalhamento da cavidade caótica. Em cada um destes ensembles, mostramos as classes de universalidade de Wigner-Dyson, as quais dependem de simetrias de reversão temporal dos sistemas. Descrevemos algoritmos numéricos para gerar aleatoriamente matrizes destes ensembles.

No próximo capítulo, apresentaremos algoritmos baseados em teoria de matrizes aleatórias para simular o transporte quântico em sistemas mesoscópicos. Desenvolveremos regras de concatenação em série e em paralelo de centros espalhadores através do formalismo da matriz de espalhamento, com as quais construiremos algoritmos eficientes para serem aplicados no cálculo do centro espalhador efetivo de redes de topologias arbitrárias.

ALGORITMOS DE TRANSPORTE VIA TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS

Como vimos na sec. 1.4, o sistema fundamental para o estudo do transporte na física mesoscópica é o ponto quântico. O caso do ponto com dois guias pode ser esquematizado pela fig. 3.1. Nas extremidades dos guias estão os reservatórios macroscópicos que fornecem/recebem elétrons. O acoplamento entre os guias e a cavidade caótica é representado por uma barreira de potencial, onde a probabilidade de tunelamento do elétron pode ser quantificada pela sua transparência¹.

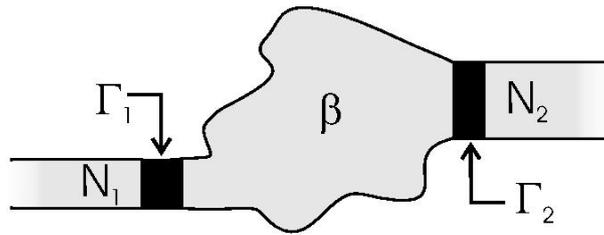


Figura 3.1 Visão esquemática de um ponto quântico. Cada guia é caracterizado pelo número de canais de espalhamento abertos N_1 e N_2 . Γ_1 e Γ_2 são as transparências das barreiras. As simetrias físicas da dinâmica dos elétrons na cavidade caótica estão rotuladas por β .

No regime de caos quântico, podemos fazer uso da TMA, modelando a matriz de espalhamento do ponto quântico balístico como um membro do ensemble circular [7] ou usando a abordagem hamiltoniana, onde uma matriz de ensemble gaussiano representa o hamiltoniano da cavidade [45]. Uma das maneiras de inserir barreiras de transparências arbitrárias no problema de espalhamento, é através do formalismo de matriz de transferência [39] ou o de estube [46]. Alternativamente, é possível obter a matriz de espalhamento do ponto quântico através do hamiltoniano da cavidade [38].

Os geradores numéricos de matrizes aleatórias apresentados no cap. 2 tornam possível a simulação do transporte em redes de pontos quânticos caóticos. Para formar as redes, devemos concatenar os centros de espalhamento em série e/ou em paralelo, de maneira análoga às concatenações de resistências em circuitos clássicos.

¹A transparência da barreira de potencial é controlada no experimento por portões de voltagem [26].

Neste capítulo, mostraremos como construir algoritmos para simular redes de pontos quânticos acoplados a guias condutores com números arbitrários de canais de espalhamento abertos e contatos de transparências quaisquer. O problema consiste em achar a matriz de espalhamento efetiva do sistema, pois é através dela que podemos extrair os autovalores de transmissão, que são o código de identificação do sistema mesoscópico. Gerando aleatoriamente esta matriz inúmeras vezes, obtemos uma amostragem suficientemente grande para analisar estatisticamente o sistema. Para isso, usaremos duas abordagens diferentes: a hamiltoniana e a da matriz de espalhamento.

3.1 ABORDAGEM HAMILTONIANA

A matriz de espalhamento de um ponto quântico acoplado a dois guias pode ser obtida através do hamiltoniano da cavidade e das transparências das barreiras que modelam o acoplamento dos guias com a cavidade. Esta transformação pode ser feita diretamente pelo uso da fórmula de Mahaux-Weidenmüller [38]

$$\mathbf{S}(E) = \mathbf{1} - 2\pi i \mathbf{W}^\dagger (E\mathbf{1} - \mathbf{H} + i\pi \mathbf{W}\mathbf{W}^\dagger)^{-1} \mathbf{W}, \quad (3.1)$$

onde \mathbf{H} é o hamiltoniano $M \times M$ da cavidade caótica, pertencente ao ensemble gaussiano, \mathbf{W} é uma matriz determinística $M \times N_T$ que modela o acoplamento dos guias com a cavidade, $N_T = N_1 + N_2$ e $\mathbf{S}(E)$ é a matriz de espalhamento $N_T \times N_T$ referente ao transporte dos elétrons com energia E .

A matriz \mathbf{W} contém informação sobre o número total de canais abertos nos dois guias, o espaçamento médio de níveis de energia da cavidade e a transparência das barreiras. Ela pode ser separada em duas partes

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{W}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

onde \mathbf{W}_μ é $M \times N_\mu$ e $\mu = 1$ ou 2 é o índice dos guias. Para desprezar processos diretos como a transmissão de elétrons de um guia para outro sem passar pela cavidade², precisamos impor a seguinte condição de ortogonalidade [45, 47]

$$\mathbf{W}_\mu^\dagger \mathbf{W}_\nu = \omega_\mu \frac{M\Delta}{\pi^2} \delta_{\mu\nu}, \quad (3.3)$$

onde Δ é o espaçamento médio de níveis da cavidade e ω_μ é uma matriz diagonal dada

²Para o elétron passar de um guia para o outro, é necessário que se forme um estado ressonante intermediário.

por

$$\boldsymbol{\omega}_\mu = \text{diag}(\omega_{\mu,1}, \omega_{\mu,2}, \dots, \omega_{\mu,N_\mu}), \quad (3.4)$$

a qual está relacionada à probabilidade de transmissão $\Gamma_{\mu,j}$ do canal j no guia μ da seguinte forma

$$\begin{aligned} \alpha_{\mu,j} &\equiv -\ln(\omega_{\mu,j}), \\ \Gamma_{\mu,j} &= \text{sech}^2(\alpha_{\mu,j}/2). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Já que queremos simular um ponto quântico caótico, apenas características locais universais no espectro serão consideradas. Sendo assim, vamos desprezar a dependência em energia da matriz de espalhamento considerando $E = 0$ e impor a universalidade através da implementação do limite de escala de Dyson [37, 48]. Uma característica marcante desta abordagem é que sempre no final dos cálculos, o limite $M \rightarrow \infty$ deve ser tomado para garantir a universalidade dos observáveis.

Vamos considerar por simplicidade que todos os canais possuem a mesma probabilidade de tunelamento $\Gamma_\mu = \Gamma_{\mu,j}$. Usando as vantagens das relações de ortogonalidade da base discreta de Fourier, podemos parametrizar as matrizes de acoplamento da seguinte forma

$$(W_\mu)_{jk} = e^{-\alpha_\mu/2} \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(M+1)}} \text{sen} \left[\frac{j(N_1\delta_{\mu 2} + k)\pi}{M+1} \right], \quad (3.6)$$

a qual respeita a eq. (3.3), devido a relação assintótica $M\Delta \approx \pi\lambda$ para $M \gg 1$, onde $\mathcal{V} = \lambda^2/M$ é um parâmetro relacionado à variância da distribuição de \mathbf{H} dada pela eq. (2.21). Com esta parametrização da matriz \mathbf{W} e com o gerador numérico do ensemble gaussiano descrito na sec. 2.2, podemos fazer o uso da eq. (3.1) para obter a matriz de espalhamento do sistema e assim extrair os autovalores de transmissão, que caracterizam o ponto quântico. Devido ao uso da eq. (3.1), esse algoritmo é chamado de Mahaux-Weidenmüller (MW).

Apesar das vantagens do controle direto do hamiltoniano, verificamos que este método numericamente é muito ineficiente comparado com os outros que mostraremos a seguir, os quais são baseados na abordagem da matriz de espalhamento. A comparação detalhada da eficiência numérica entre os diferentes algoritmos aplicados para o caso de um ponto quântico está presente no apêndice D. Devido a essa ineficiência numérica, iremos nos limitar a descrever este algoritmo para um ponto quântico acoplado a dois guias. Descreveremos o algoritmo para uma rede geral através da abordagem de matriz de espalhamento que apresentaremos na próxima seção.

3.2 ABORDAGEM DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO

Os circuitos clássicos são formados por agrupamentos em série e/ou paralelo dos seus elementos: resistências, capacitores, etc. Impondo conservação de corrente (lei de Kirchhoff) é possível definir regras de concatenação para cada um desses elementos. Por exemplo, a resistência resultante da concatenação de resistências em série é a soma delas. Para resistências em paralelo, a resultante é o inverso da soma dos inversos de cada uma.

Quanticamente, os elementos que formam os circuitos são centros espalhadores que podem ser caracterizados por uma matriz de espalhamento. As concatenações dos centros espalhadores produzem uma matriz de espalhamento efetiva que, devido à conservação de corrente, deve ser unitária.

Os centros espalhadores que estudaremos aqui são pontos quânticos caóticos balísticos e barreiras de transparências arbitrárias. Os primeiros possuem matrizes de espalhamento aleatórias pertencentes ao ensemble circular. Por outro lado, as matrizes de espalhamento das barreiras são determinísticas com a seguinte estrutura: seja Γ_j a transparência do canal j da barreira de N canais. Sendo assim, os coeficientes de transmissão e de reflexão são $t_j = \sqrt{\Gamma_j}$ e $r_j = i\sqrt{1 - \Gamma_j}$. Assim, os blocos das matrizes de espalhamento das barreiras são

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}' = \text{diag}(r_1, r_2, \dots, r_N), \\ \mathbf{t} &= \mathbf{t}' = \text{diag}(t_1, t_2, \dots, t_N). \end{aligned} \quad (3.7)$$

A seguir, vamos mostrar como concatenar os centros espalhadores em paralelo e em série.

3.2.1 Concatenação em paralelo

Considere uma rede de L centros espalhadores em paralelo, como ilustrado na fig. 3.2. Os centros espalhadores são caracterizados por sua matrizes de espalhamento $\{\mathbf{S}^1, \dots, \mathbf{S}^L\}$ e pelos números de canais em cada um dos seus guias $\{N_1^1, \dots, N_1^L\}$ e $\{N_2^1, \dots, N_2^L\}$. Podemos reduzir esse sistema a um centro espalhador efetivo com $N_\mu = \sum_{\alpha=1}^L N_\mu^\alpha$ canais no guia μ . Para isso, vamos definir a operação de concatenação em paralelo da seguinte

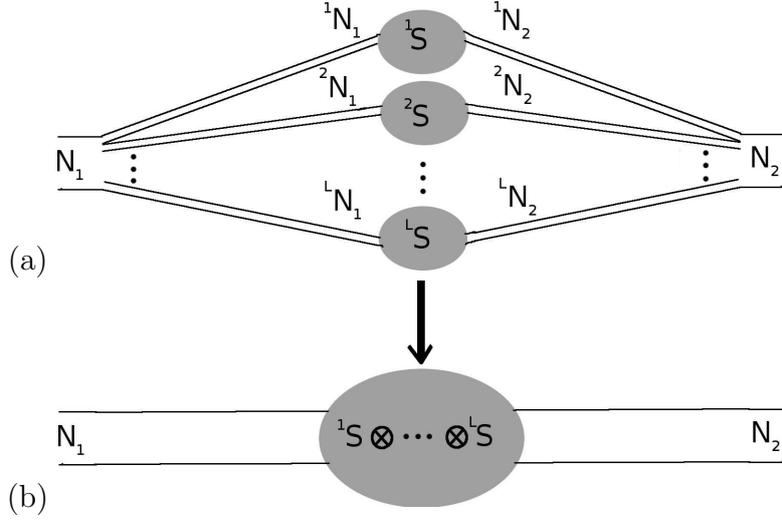


Figura 3.2 Concatenação em paralelo. Em (a), L centros espalhadores em paralelo e em (b), o centro espalhador efetivo da concatenação dos L centros.

forma

$${}^\alpha \mathbf{S} \otimes {}^\gamma \mathbf{S} \equiv \begin{pmatrix} {}^\alpha \mathbf{S}^{11} & \mathbf{0} & {}^\alpha \mathbf{S}^{12} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{S}^{11} & \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{S}^{12} \\ {}^\alpha \mathbf{S}^{21} & \mathbf{0} & {}^\alpha \mathbf{S}^{22} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{S}^{21} & \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{S}^{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^\alpha \mathbf{r} & \mathbf{0} & {}^\alpha \mathbf{t}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{r} & \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{t}' \\ {}^\alpha \mathbf{t} & \mathbf{0} & {}^\alpha \mathbf{r}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{t} & \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{r}' \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Os blocos nulos representam a impossibilidade do transporte vertical entre guias do centro α para os do centro γ . Perceba que se ${}^\alpha \mathbf{S}$ e ${}^\gamma \mathbf{S}$ são unitárias, então a matriz de espalhamento efetiva também é $({}^\alpha \mathbf{S} \otimes {}^\gamma \mathbf{S})({}^\alpha \mathbf{S} \otimes {}^\gamma \mathbf{S})^\dagger = \mathbf{1} = ({}^\alpha \mathbf{S} \otimes {}^\gamma \mathbf{S})^\dagger ({}^\alpha \mathbf{S} \otimes {}^\gamma \mathbf{S})$, ratificando a conservação de corrente.

Assim, a matriz de espalhamento efetiva da concatenação dos centros espalhadores α e γ em paralelo é

$$\mathbf{S} = {}^\alpha \mathbf{S} \otimes {}^\gamma \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

com seus blocos são dados por

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} {}^\alpha \mathbf{v} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^\gamma \mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

onde \mathbf{v} pode ser \mathbf{r} , \mathbf{r}' , \mathbf{t} ou \mathbf{t}' .

Para obter a concatenação do sistema em paralelo exibido pela fig. 3.2, usamos a associatividade da operação (3.8), $(\alpha\mathbf{S} \otimes \gamma\mathbf{S}) \otimes \delta\mathbf{S} = \alpha\mathbf{S} \otimes (\gamma\mathbf{S} \otimes \delta\mathbf{S}) = \alpha\mathbf{S} \otimes \gamma\mathbf{S} \otimes \delta\mathbf{S}$. Assim, podemos concatenar recursivamente os centros dois a dois da seguinte maneira:

1. concatene os dois primeiros centros para obter uma matriz resultante;
2. use a matriz resultante da operação binária e concatene-a com o próximo centro para obter uma nova matriz resultante;
3. repita o item 2 até alcançar o L -ésimo centro espalhador.

A matriz resultante desta concatenação em paralelo recursiva é a matriz de espalhamento efetiva do sistema ${}^1\mathbf{S} \otimes \dots \otimes {}^L\mathbf{S}$.

3.2.2 Concatenação em série

Vamos mostrar dois métodos diferentes e independentes de concatenar centros espalhadores em série.

3.2.2.1 Matriz de transferência

Como vimos na seção 1.5, a matriz de espalhamento de um centro espalhador conectado a dois guias relaciona as amplitudes que entram no centro com as que saem. No entanto, há como relacionar as amplitudes de um guia com as do outro usando o conceito de matriz de transferência. Seja

$$\mathbf{S} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

a matriz de espalhamento de um centro espalhador. Com um pouco de álgebra, pode se mostrar que sua matriz de transferência é [39]

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} (\mathbf{t}^\dagger)^{-1} & \mathbf{r}'(\mathbf{t}')^{-1} \\ -(\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{r} & (\mathbf{t}')^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Maiores detalhes sobre a definição da matriz de transferência e a dedução da eq. (3.12) estão presentes no apêndice E.

Há um problema de dimensão de matrizes na eq. (3.12). Perceba que para inverter a matriz de transferência, é necessário que ela seja quadrada. Isso só seria possível se o número de canais dos dois guias fossem iguais. Porém, quando os guias possuem números

de canais diferentes, podemos executar cálculos via matriz de transferência usando um truque. Ele consiste em criar “pseudocanais” com transparência ϵ no guia com menor número de canais, para igualar com o número de canais do outro guia. Assim, podemos manipular todos os cálculos tendo apenas o cuidado de no final tomar o limite de $\epsilon \rightarrow 0$ para fechar os pseudocanais³.

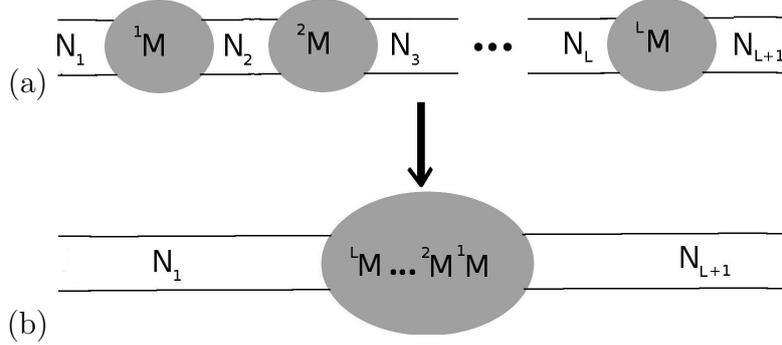


Figura 3.3 Concatenação em série via matriz de transferência. Em (a), L centros espalhadores em série e em (b), o centro espalhador efetivo da concatenação dos L centros.

Uma das maiores vantagens no uso da matriz de transferência para concatenação de centros espalhadores em série é que, por ela relacionar amplitudes de um guia com as do outro, sua operação de concatenação em série é, simplesmente, o produto convencional de matrizes. Por exemplo, uma rede de L centros espalhadores em série, como ilustrada na fig. 3.3, possui a seguinte matriz de transferência efetiva

$$\mathbf{M} = {}^L\mathbf{M} \dots {}^2\mathbf{M} {}^1\mathbf{M}. \quad (3.13)$$

Podemos obter os autovalores de transmissão invertendo o primeiro bloco da matriz de transferência efetiva [ver eq. (3.12)]: $(\mathbf{M}^{11})^{-1} = \mathbf{t}^\dagger \implies \mathbf{t}^\dagger \mathbf{t} \implies$ autovalores de transmissão.

Além disso, é importante notar que se a matriz de espalhamento de uma concatenação em paralelo de dois centros espalhadores for transformada numa matriz de transferência de acordo com as equações (3.8-3.12), a estrutura de bloco da operação de concatenação

³O algoritmo de matriz de transferência com o artifício dos pseudocanais foi testado simulando um ponto quântico caótico assimétrico, produzindo os mesmo resultados que estão ilustrados na fig. 4.2, os quais serão discutidos com mais detalhes no próximo capítulo.

em paralelo se conserva, ou seja

$${}^{\alpha}\mathbf{M} \otimes {}^{\gamma}\mathbf{M} = \begin{pmatrix} {}^{\alpha}\mathbf{M}^{11} & \mathbf{0} & {}^{\alpha}\mathbf{M}^{12} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^{\gamma}\mathbf{M}^{11} & \mathbf{0} & {}^{\gamma}\mathbf{M}^{12} \\ {}^{\alpha}\mathbf{M}^{21} & \mathbf{0} & {}^{\alpha}\mathbf{M}^{22} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^{\gamma}\mathbf{M}^{21} & \mathbf{0} & {}^{\gamma}\mathbf{M}^{22} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Podemos sempre transformar \mathbf{S} em \mathbf{M} através das eqs. (3.11) e (3.12) e assim, realizar concatenações em série e em paralelo via matriz de transferência usando as eqs. (3.13) e (3.14). Chamaremos este algoritmo de matriz de transferência (MT).

3.2.2.2 Estube

Vamos definir a operação de concatenação das matrizes de espalhamento de dois centros espalhadores em série α e γ da seguinte forma [2]

$${}^{\alpha}\mathbf{S} \bullet {}^{\gamma}\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^{\alpha}\mathbf{r} + {}^{\alpha}\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^{\gamma}\mathbf{r}'\mathbf{r}')^{-1}]\gamma\mathbf{r}'\mathbf{t} & {}^{\alpha}\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^{\gamma}\mathbf{r}'\mathbf{r}')^{-1}]\gamma\mathbf{t}' \\ \gamma\mathbf{t}[(\mathbf{1} - {}^{\alpha}\mathbf{r}'\mathbf{r}')^{-1}]\alpha\mathbf{t} & \gamma\mathbf{r} + \gamma\mathbf{t}[(\mathbf{1} - {}^{\alpha}\mathbf{r}'\mathbf{r}')^{-1}]\alpha\mathbf{r}'\mathbf{t}' \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

A dedução da eq. (3.15) está presente no apêndice F.

Considere agora o sistema de três centros espalhadores em série como visto na fig. 3.4. Podemos concatenar o sistema usando uma transformação de estube [46], a qual consiste em transformar o sistema (a) no (c) girando os guias em torno do centro espalhador 2, como ilustrado em (b). Como não estamos considerando processos de espalhamento inelásticos, em cada guia os elétrons não podem mudar de canal [2], podemos considerar os guias 1 e 4 como se fossem apenas um de $N_1 + N_4$ canais de espalhamento, bem como os guias 2 e 3 como um efetivo de $N_2 + N_3$ canais. Entre esses guias efetivos está a concatenação em paralelo dos centros espalhadores 1 e 3, com uma observação: devido a rotação em (b), os guias 3 e 4 permutam de posição em relação a (a), fazendo com que o centro 3 em (c) possua a seguinte matriz de espalhamento

$${}^3\mathbf{S}' = \begin{pmatrix} {}^3\mathbf{r}' & {}^3\mathbf{t} \\ {}^3\mathbf{t}' & {}^3\mathbf{r} \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

onde seus blocos são dados pela matriz de espalhamento original em (a)

$${}^3\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^3\mathbf{r} & {}^3\mathbf{t}' \\ {}^3\mathbf{t} & {}^3\mathbf{r}' \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

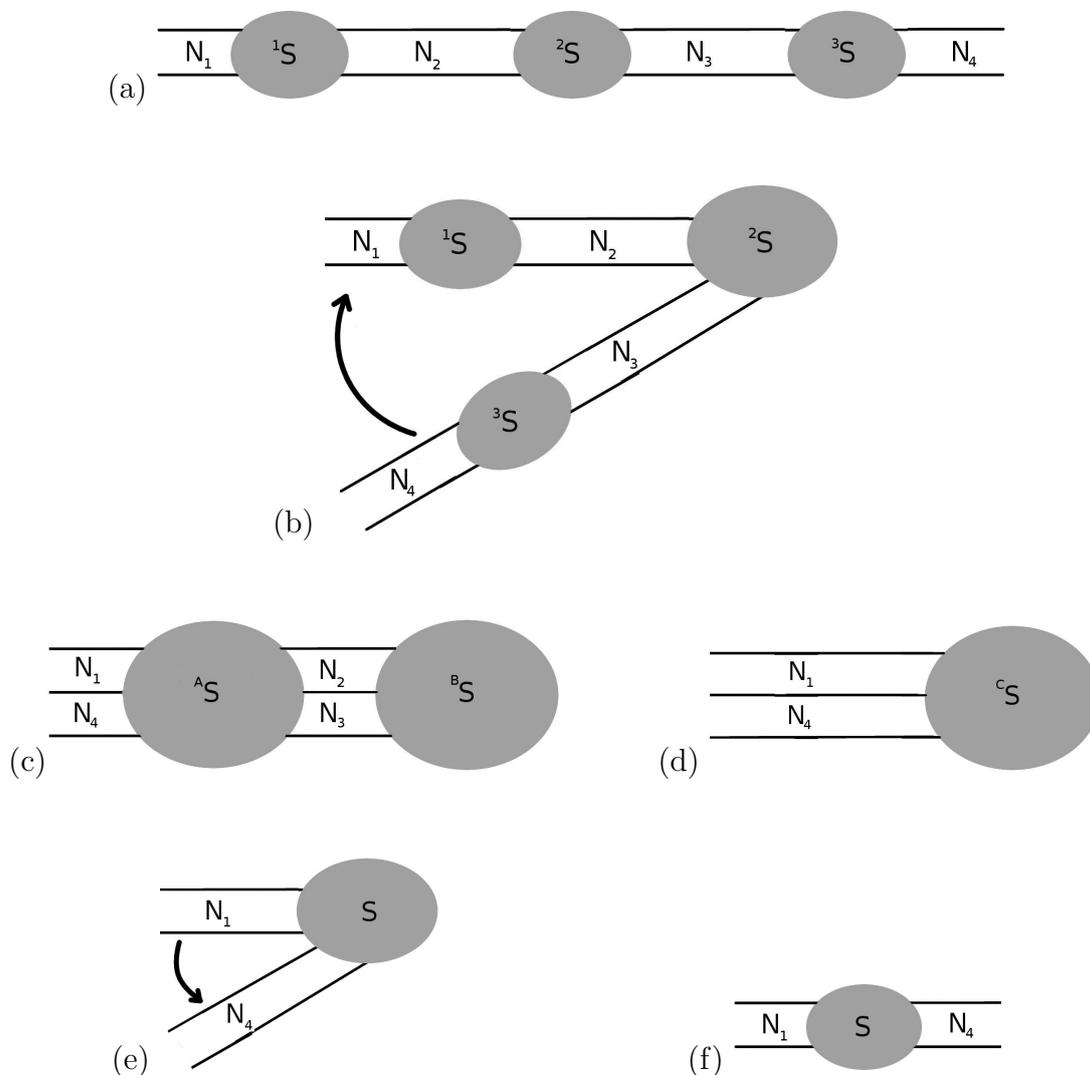


Figura 3.4 Concatenação em série de três centros espalhadores através de uma transformação de estube. Em (a), os três centros espalhadores em série. Em (b), o guia 3 gira em torno do centro espalhador 2 até formar o sistema (c), onde o centro A é a concatenação em paralelo dos centros 1 e 3. Ainda em (c), o centro B é um espalhador entre o guia efetivo da esquerda devido ao sistema em paralelo e um guia fictício à direita, com ${}^B\mathbf{r} = {}^2\mathbf{S}$, ${}^B\mathbf{r}' = \mathbf{1}$ e ${}^B\mathbf{t}' = \mathbf{0} = {}^B\mathbf{t}$. Em (d), a concatenação em série dos centros A e B forma um estube caracterizado por ${}^C\mathbf{S}$. Em (e), a separação dos guias 1 e 4 desfaz a transformação de estube. Em (f) o centro efetivo da concatenação do sistema em (a) é obtido através do bloco de reflexão do centro C, $\mathbf{S} = {}^C\mathbf{r}$.

Em outras palavras, devemos permutar os blocos com “linha” com os que não a possuem. Portanto, o centro efetivo A possui a matriz de espalhamento dada pela operação (3.8)

$${}^A\mathbf{S} = {}^1\mathbf{S} \otimes {}^3\mathbf{S}'. \quad (3.18)$$

Podemos visualizar o centro B na figura (c) como um espalhador entre o guia efetivo formado pelos guias 2 e 3 à esquerda e um guia fictício à direita, onde há canais de espalhamento de transparência nula (canais fechados). Sendo assim, o bloco ${}^B\mathbf{r}$ de ${}^B\mathbf{S}$, que caracteriza o transporte entre os canais nos guias 2 e 3 é a matriz de espalhamento do centro 2. Como não há transporte no guia fictício à direita do centro B, concluímos que

$${}^B\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^2\mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Usando a operação (3.15), podemos concatenar os centros e A e B para obtermos a matriz de espalhamento do centro efetivo C ilustrado em (d)

$${}^C\mathbf{S} = {}^A\mathbf{S} \bullet {}^B\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^A\mathbf{r} + {}^A\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{S}{}^A\mathbf{r}')^{-1}]^2\mathbf{S}{}^A\mathbf{t} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Sendo assim, percebemos que ${}^C\mathbf{S}$ possui a mesma estrutura de ${}^B\mathbf{S}$. Porém, seu bloco de reflexão caracteriza o transporte entre os guias 1 e 4. Como ilustrado em (e), podemos separar os guias 1 e 4 para obter sistema (f), o qual é o centro espalhador efetivo do sistema original (a), com sua matriz de espalhamento sendo dada pelo bloco ${}^C\mathbf{r}$

$$\mathbf{S} = \mathbf{R} + \mathbf{T}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{S}\mathbf{R}')^{-1}]^2\mathbf{S}\mathbf{T}, \quad (3.21)$$

onde, de acordo com as eqs. (3.18), (3.10) e (3.20)

$$\begin{aligned} \mathbf{R} = {}^A\mathbf{r} &= \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{r} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^3\mathbf{r}' \end{pmatrix}, & \mathbf{T}' = {}^A\mathbf{t}' &= \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{t}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^3\mathbf{t} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T} = {}^A\mathbf{t} &= \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{t} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^3\mathbf{t}' \end{pmatrix}, & \mathbf{R}' = {}^A\mathbf{r}' &= \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{r}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}^3\mathbf{r} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

A prova de que a matriz de espalhamento efetiva desta concatenação em série via estube [eq. (3.21)] é unitária $\mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{1}$ está no apêndice G.

Chamaremos de estube (ST) o algoritmo que realiza concatenações em série usando

a eq. (3.21) e através da eq. (3.8) faz as concatenações em paralelo. Fica claro que para concatenar em série uma cadeia de vários centros espalhadores, podemos usar a eq. (3.21) para concatenar os centros três a três, até chegar nos últimos três centros, onde finalmente obtemos a matriz de espalhamento efetiva da cadeia.

3.3 SUMÁRIO

Neste capítulo apresentamos algoritmos baseados em teoria de matrizes aleatórias para serem aplicados ao estudo do transporte quântico em sistemas mesoscópicos através do formalismo de espalhamento de Landauer-Büttiker.

Mostramos a abordagem hamiltoniana através do algoritmo de Mahaux-Weidenmüller, que se demonstrou ineficiente numericamente. Usando o formalismo de matriz de espalhamento, desenvolvemos regras de concatenação em série e em paralelo de centros espalhadores, os quais podem ser barreiras de tunelamento (matrizes determinísticas) ou cavidades caóticas (matrizes aleatórias). Inspirados no acoplamento de resistores em um circuito clássico, adaptamos a lei de Kirchhoff (conservação de corrente) para exprimir a unitariedade das matrizes de espalhamento.

Desenvolvemos uma operação algébrica bem definida para concatenação em paralelo de centros espalhadores, a qual se aplica a matrizes de espalhamento ou de transferência. Para concatenar em série, mostramos o método da matriz de transferência, regrado por operações usuais de multiplicações de matrizes. Este método é de simples implementação se as matrizes \mathbf{t} e \mathbf{t}' forem quadradas. Mostramos como superar esta dificuldade com a criação de pseudocanais que servem para controlar as ordens das matrizes de \mathbf{t} e \mathbf{t}' . Alternativamente, o método de estube possibilita a concatenação dos centros em série três a três. Apesar de ser um algoritmo menos intuitivo do que o de matriz de transferência, nosso estube é parametrizado de forma a descartar qualquer restrição com as ordens das matrizes de espalhamento, que dependem do número de canais do sistema, sem necessidade de criação de pseudocanais. Além disso, o apêndice D mostra que, numericamente, este estube proporciona um algoritmo mais eficiente que o baseado em matrizes de transferência.

Existem outras parametrizações de estube para encontrar a matriz de espalhamento efetiva de redes de pontos quânticos, como por exemplo a que foi desenvolvida na ref. [32]. Nesse método de estube, criam-se pseudoguias (equivalente à ideia de pseudocanais que usamos no método de matriz de transferência) para modelar a rede de centros espalhadores em um único centro efetivo. Com isso, geralmente a matriz de espalha-

mento efetiva é de ordem maior do que a usual⁴, tendo inúmeros blocos nulos ou iguais à identidade devido à modelagem de pseudoguias. Estes blocos carregam informações redundantes, as quais são eliminadas com aplicações de técnicas perturbativas de expansão diagramática. Numericamente, esta redundância seria de difícil eliminação, fazendo com que o processador realizasse mais cálculos inutilmente com matrizes maiores do que deveriam ser. Sendo assim, nossa parametrização de estube é otimizada para o uso de métodos numéricos por fornecerem matrizes de menor ordem possível, eliminando as informações redundantes desde sua implementação. No entanto, nada impede de se trabalhar algebricamente com nossos algoritmos para construir a matriz de espalhamento efetiva do sistema e depois aplicar métodos diagramáticos, os quais conseguem acessar o regime semiclássico do transporte quântico.

No próximo capítulo, aplicaremos nossos algoritmos para simular o transporte em um ponto quântico não-ideal. Mostraremos as distribuições dos quatro primeiros cumulantes de transferência de cargas em diversos regimes de transporte, variando os números de canais de espalhamento abertos nos dois guias e as transparências das barreiras. Enfatizaremos o limite quântico extremo, onde discutiremos em detalhes a importância de se conhecer as distribuições completas dos observáveis neste regime, as quais apresentam diversas irregularidades, como a presença de não-analiticidades. Mostraremos que as distribuições de condutância apresentam semelhanças mesmo com parâmetros diferentes do sistema, sugerindo uma lei de escala aproximada que torna as distribuições mais próximas, a qual remete à lei de Ohm. A aplicação dos nossos algoritmos em redes de pontos quânticos mais complexas será apresentada no cap. 6.

⁴A matriz de espalhamento é quadrada e, em geral, sua ordem é dada pela soma do número de canais de espalhamento abertos nos guias acoplados aos reservatórios.

DISTRIBUIÇÕES DE CUMULANTES DE TRANSFERÊNCIA DE CARGA NUM PONTO QUÂNTICO NÃO-IDEAL

O ponto quântico é um dos sistemas mesoscópicos mais fundamentais para o estudo do transporte de cargas. No entanto, a maioria dos métodos analíticos só conseguem descrever transporte quântico neste sistema em situações particulares, como para contatos ideais ou no regime semiclássico. O método de supersimetria é não-perturbativo e capaz de fornecer resultados de momentos dos cumulantes de transferência de carga para os diversos regimes de transporte. No entanto, além de ser um método matematicamente complexo e pouco intuitivo, supersimetria não é capaz de fornecer a distribuição completa dos observáveis de transporte.

Motivados pelas dificuldades dos métodos analíticos, implementamos numericamente simulações baseadas nos algoritmos expostos no cap. 3 para o caso particular de um ponto quântico. Através deste método numérico, mostraremos as distribuições de probabilidade dos quatro primeiros cumulantes de transferência de carga para um ponto quântico, variando a transparência dos seus contatos, o número de canais dos guias e as simetrias da cavidade. Exploraremos a importância de conhecer completamente estas distribuições para a caracterização do transporte quântico, principalmente no limite quântico extremo, onde as distribuições geralmente apresentam não-analiticidades. Além disso, apresentaremos uma lei de escala aproximada que enfatiza semelhanças entre distribuições de condutância para diferentes valores de parâmetros do sistema.

4.1 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

Para simular numericamente um ponto quântico acoplado não-idealmente a dois guias como representado na fig. 3.1, levamos em conta o diagrama de centros de espalhamento ilustrado na fig. 4.1. O sistema é formado por três centros espalhadores: barreira 1 - cavidade caótica - barreira 2. O apêndice D mostra uma comparação numérica dos algoritmos MW, MT e ST. Como esperado, eles produzem aproximadamente os mesmos

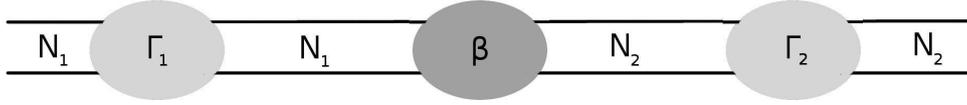


Figura 4.1 Diagrama de centros de espalhamento para um ponto quântico. As barreiras são representadas por suas transparências Γ_1 e Γ_2 . A cavidade caótica é caracterizada pelo seu índice de simetria β .

resultados, porém o ST é o mais eficiente e, por isso, ele será usado como padrão para os resultados que mostraremos a seguir.

Vamos apresentar em detalhe o algoritmo de ST para simular este sistema. Os dados de entrada são:

- Transparências das barreiras: Γ_1 e Γ_2 ;
- Número de canais de espalhamento abertos em cada um dos guias: N_1 e N_2 ;
- Índice de simetria da cavidade: β ;
- Número de realizações numéricas: n_{rel} .

As matrizes de espalhamento das barreiras são determinísticas e, portanto, são fixas para todas as realizações. Considerando que em cada contato, os canais possuem as mesmas transparências, seguimos a eq. (3.7) e obtemos as matrizes de espalhamento das duas barreiras

$$\mathbf{S}_j = \begin{pmatrix} r_j \mathbf{1} & t_j \mathbf{1} \\ t_j \mathbf{1} & r_j \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

onde $t_j = \sqrt{\Gamma_j}$ e $r_j = i\sqrt{1 - \Gamma_j}$. A matriz de espalhamento da cavidade, \mathbf{S}_{cav} , é um membro do ensemble circular e, por isso, em cada realização numérica, é gerada aleatoriamente seguindo o algoritmo descrito na sec. 2.3.3.

A concatenação dos três centros espalhadores em série é feita através da fórmula de estube [eq. (3.21)]

$$\mathbf{S} = \mathbf{R} + \mathbf{T}[(\mathbf{1} - \mathbf{S}_{\text{cav}} \mathbf{R})^{-1}] \mathbf{S}_{\text{cav}} \mathbf{T}, \quad (4.2)$$

onde \mathbf{S} é a matriz de espalhamento efetiva do sistema¹ e

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_2 \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_2 \mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

¹Na ref. [46], há uma demonstração de que \mathbf{S} é uma matriz aleatória distribuída de acordo com o núcleo de Poisson.

Com isso, cada realização numérica gera a matriz efetiva do sistema, que por sua vez fornece uma realização dos autovalores de transmissão $\{\tau_j\}$. Conseqüentemente, podemos obter realizações de qualquer função de $\{\tau_j\}$, como por exemplo os quatro primeiros CTC's [eqs. (1.46) e (1.47)]

$$\begin{aligned}
 g &= \sum_{j=1}^n \tau_j, \\
 p &= \sum_{j=1}^n \tau_j(1 - \tau_j), \\
 q_3 &= \sum_{j=1}^n \tau_j(1 - \tau_j)(1 - 2\tau_j), \\
 q_4 &= \sum_{j=1}^n \tau_j(1 - \tau_j)(1 - 6\tau_j + 6\tau_j^2).
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Calculamos os CTC's n_{rel} vezes, armazenando os resultados de cada realização em um arquivo de saída. Com n_{rel} suficientemente grande², implementamos a contagem de frequência de cada um dos CTC's, extraindo seus histogramas. Normalizando os histogramas para que tenham suas integrais iguais à unidade, obtemos a distribuição de probabilidade dos CTC's.

4.2 ESTATÍSTICA DE CONTAGEM DE CARGA

Iniciamos com resultados da simulação para o caso de contatos ideais. Na fig. 4.2, verificamos o êxito da concordância dos dados da nossa simulação com resultados exatos para a distribuição da condutância, para $\beta = 1$, e da potência do ruído de disparo, para $\beta = 2$, de um ponto quântico simples com contatos ideais e $N_1 = 4$. Note que quanto menor N_2 , mais irregulares são as distribuições e, à medida que aumentamos N_2 , as distribuições se tornam mais suaves e se assemelham a gaussianas. Porém, as distribuições para $N_1 < N_2$ apontam efeitos de assimetria (não-gaussianos).

A fig. 4.2 servirá como um ótimo exemplo para analisarmos a transição entre o limite quântico extremo (LQE) e o regime semiclássico através das distribuições de g e de p . Vamos iniciar esta análise mostrando alguns detalhes para a distribuição de condutância. Para $N_2 = 1$, esta distribuição apresenta um comportamento linear $P_1(g) = 2g$ para $g \leq 1$ e se torna nulo para $g > 1$, pois com apenas 1 canal em um dos guias, só há um

²Usamos $n_{\text{rel}} = 10^5$ para obtermos as distribuições dos observáveis exibidos nesta tese.

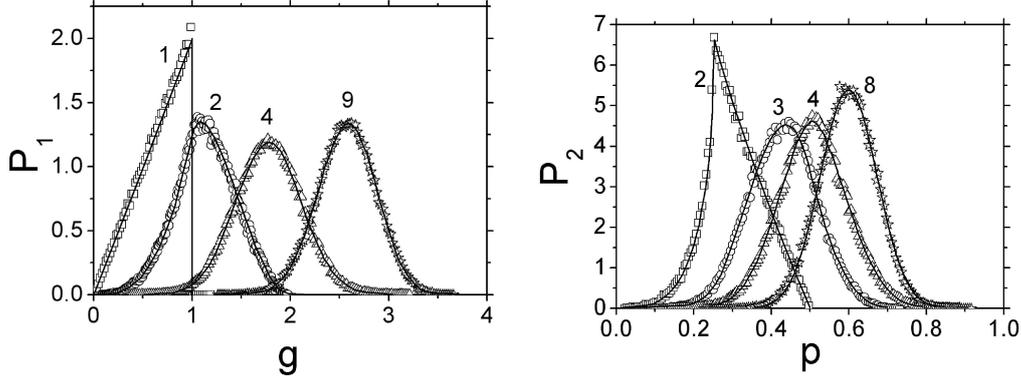


Figura 4.2 Distribuições de condutância e de potência do ruído de disparo para um ponto quântico com contatos ideais. Os números rotulando as curvas são os valores de N_2 , enquanto $N_1 = 4$ para ambos os painéis. Usamos $\beta = 1$ para P_1 e $\beta = 2$ para P_2 . Os símbolos são dados da simulação e as curvas sólidas são resultados exatos extraídos da ref. [23].

único autovalor de transmissão não-nulo e, portanto, $0 \leq (g = \tau_1) \leq 1$. Podemos integrar $P_1(g)$ multiplicado por g , visando obter $\langle g \rangle$. Assim temos,

$$\langle g \rangle = \int_0^1 dg g P_1(g) = \int_0^1 dg g (2g) = \frac{2}{3}, \quad (4.5)$$

o qual é o resultado esperado pela eq. (1.72) para $\beta = 1$. Da mesma forma podemos obter o segundo momento de g

$$\langle g^2 \rangle = \int_0^1 dg g^2 P_1(g) = \int_0^1 dg g^2 (2g) = \frac{1}{2} \quad (4.6)$$

e em seguida a variância

$$\text{var}(g) \equiv \langle (g - \langle g \rangle)^2 \rangle = \langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2 = \frac{1}{2} - \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{1}{18}, \quad (4.7)$$

de acordo com a eq. (1.73). Para $N_2 = 2$, o maior valor de g é $\max(N_1, N_2) = 2$ e por isso, a sua distribuição se anula para $g > 2$. Por outro lado, percebemos que a distribuição se anula de uma forma mais suave, comparado ao caso $N_2 = 1$, indicando efeitos da autopromediação das propriedades de transporte com o aumento do número de canais, como visto na sec. 1.7. O máximo da curva é em torno de $g = 1,085$, que é diferente do valor médio $\langle g \rangle = 8/7 = 1,142857$, onde a barra denota o período da dízima. Além disso, vemos que a curva possui uma assimetria em torno do máximo, ratificando que a distribuição não é gaussiana.

Para $N_2 = 4$, vemos que a assimetria se torna menor e que a curva se assemelha a uma gaussiana. Fazendo um ajuste de curva gaussiano (mínimos quadrados), obtemos que a média é 1,777 e que a variância é 0,112. Por outro lado, pelas eqs. (1.72) e (1.73), obtemos os valores $\langle g \rangle = 16/9 = 1,\bar{7}$ e $\text{var}(g) = 100/891 = 0,\overline{112233445566778900}$, os quais mostram boa concordância com os resultados obtidos pelo ajuste de curvas gaussiano, indicando proximidade do regime semiclassico. Esta proximidade é menor para $N_2 = 9$, pois o ajuste gaussiano fornece média 2,5811 e variância 0,0894, enquanto os resultados exatos são $\langle g \rangle = 18/7 = 2,\overline{571428}$ e $\text{var}(g) = 225/2548 \approx 0,0883$. Por que os resultados obtidos pelo ajuste gaussiano estão mais próximo para $N_2 = 4$ do que para $N_2 = 9$? Afinal, aumentando o número de canais, os resultados não deveriam se aproximar mais dos esperados para o regime semiclassico, onde as distribuições são muito próximas de gaussianas? Para entendermos este efeito de assimetria vamos analisar o terceiro cumulante da distribuição de g , o qual foi calculado recentemente para um ponto quântico com contatos ideais através da técnica de integrais de Selberg [22]

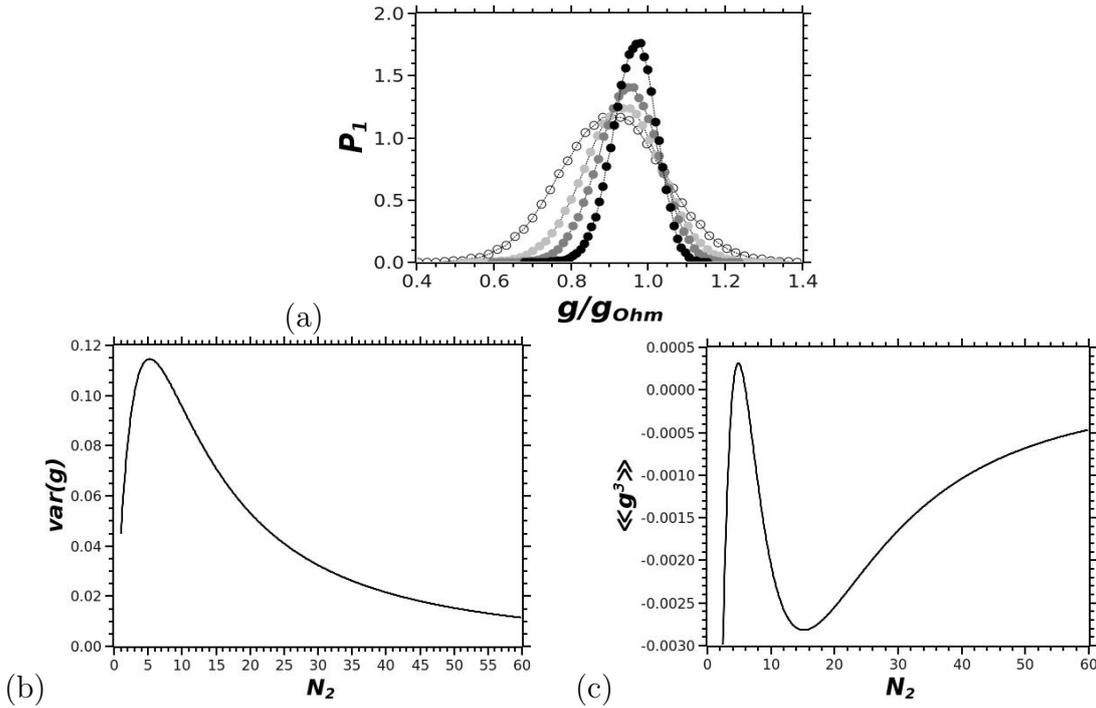


Figura 4.3 Estatística da condutância para um ponto quântico com contatos ideais, $\beta = 1$ e $N_1 = 5$. Em (a) temos a distribuição completa de condutância obtida pela simulação, onde $N_2 = 5, 9, 13$ e 21 dos símbolos mais claros aos mais escuros. Ainda em (a), os valores de g estão normalizados pelo valor esperado pela lei de Ohm: $g_{Ohm} = 5N_2/(5 + N_2)$. Em (b) temos a variância de g [eq. (1.73)], enquanto o terceiro cumulante de g está em (c) [eq. (4.8)].

$$\frac{\langle\langle g^3 \rangle\rangle}{\text{var}(g)} = \frac{4[(1 - 2/\beta)^2 - (N_1 - N_2)^2]}{\beta(N_1 + N_2 - 3 + 2/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 6/\beta)}. \quad (4.8)$$

Note que quando $N_1 = N_2$ e $\beta = 2$ o terceiro cumulante é nulo, e com $\beta \neq 2$ ele possui um valor finito, mas que se torna desprezível quando aumentamos o número de canais. Esta regra se estende a cumulantes de g de ordem ímpar e maior que 1, implicando que a distribuição de g tende a se tornar simétrica em torno do esperado pela lei de Ohm no limite de muitos canais. Na verdade, no limite de grande número de canais os cumulantes de g de ordem maior que dois se tornam desprezíveis comparados à variância e por isso, as distribuições tendem a adquirir um formato aproximadamente gaussiano³ [22]. Para ilustrarmos melhor o efeito do terceiro cumulante, veja a fig. 4.3, onde temos $N_1 = 5$, $\beta = 1$ e percebemos que para $N_2 = 5$ a distribuição se assemelha muito com uma gaussiana, e para $N_2 = 9, 13$ e 21 , a largura da distribuição (variância) vai diminuindo e efeitos de assimetria da distribuição se tornam mais acentuados. Este comportamento é ratificado em (b) e (c), pois a variância diminui à medida que N_2 aumenta, o terceiro cumulante comparado à variância é desprezível para $N_2 \sim 5$ e, à medida que N_2 aumenta, ele se torna significativo e negativo, justificando o comportamento das distribuições de g com $N_1 \neq N_2$. Porém, pelas na eqs. (4.8) e (1.73), no limite de $N_1, N_2 \gg 1$, temos $\langle\langle g^3 \rangle\rangle \propto (N_1 - N_2)^2 (N_1 N_2)^2 (N_1 + N_2)^{-7}$, onde vemos que mesmo para $|N_1 - N_2| \gg 1$, o terceiro cumulante é desprezível, enfatizando a tendência de $P_1(g)$ a uma distribuição aproximadamente gaussiana no regime semiclássico, mesmo para um ponto quântico assimétrico. Além disso, a condição $N_2 \gg N_1$ (ou vice-versa) significa fisicamente que estamos próximo do limite do ponto de contato quântico ($N_2 \rightarrow \infty$), pois o contato com N_2 canais é muito aberto, fazendo com que o sistema deixe de ser uma cavidade caótica, tendo praticamente o ponto de contato com N_1 canais dominando o transporte. No PCQ, o transporte de cargas é estocástico, mas não é caótico e, portanto, os cumulantes de carga são determinísticos, ou seja, passam a ser regidos por uma distribuição do tipo delta de Dirac. Neste caso, a variância e todos os cumulantes de ordem maior dos CTC's são nulos. Por isso que, em (a), à medida que aumentamos N_2 , as curvas se estreitam e se tornam mais altas em torno de $g_{\text{Ohm}} = N_1 N_2 / (N_1 + N_2)$, que no limite do PCQ é $g_{\text{Ohm}} = N_1 + \mathcal{O}(1/N_2)$.

Voltando para a fig. 4.2, vamos analisar a distribuição da potência do ruído de disparo

³Já se sabe que no regime semiclássico a distribuição de condutância é centralmente gaussiana. Porém em suas caldas ($g < 1/4$ e $g > 3/4$), elas se comportam de maneira diferente: a ref. [49] considera que o comportamento é lei de potência, enquanto a ref. [50] afirma ser exponencial. Como trata-se de uma região de eventos raros, não temos precisão numérica suficiente para verificar o comportamento das distribuições neste regime.

para um ponto quântico com contatos ideais, $N_1 = 4$ e $\beta = 2$. Note que a distribuição de p para $N_2 = 2$ possui derivada descontínua⁴, pois para $p > 0,5$ a distribuição é linear $P_2(p) = 25(\frac{1}{2} - p)$ e é não-linear para $p < 0,5$ [22]. Com o aumento do número de canais, as irregularidades são suavizadas devido à autopromediação das propriedades de transporte, como mostram as curvas para $N_2 > 2$. Para $N_2 = 3$, a curva é suave e seu máximo é em aproximadamente 0,435. Por outro lado a expressão exata para a média de p é [23]

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{N_1 N_2 (N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{(N_1 + N_2 - 2 + 2/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 4/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta)} \\ &= \frac{\beta}{2} N_1 N_2 \frac{\text{var}(g)}{\langle g \rangle}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Assim, para $N_2 = 3$, $\langle p \rangle = 3/7 = 0,428571428571$, revelando que o máximo da curva, apesar de próximo, não é a média da distribuição. Além disso, percebemos que a distribuição é assimétrica e, portanto, não é gaussiana. Para $N_2 = 4$, fizemos um ajuste de curva gaussiano e percebemos que a distribuição não se aproxima muito bem de uma gaussiana, apesar do seu máximo em $p \approx 0,507$ estar muito próximo da média $\langle p \rangle = 0,507936$. Para entendermos isso, obtivemos alguns dos momentos centrais de p através da integração numérica

$$\langle (\Delta p)^m \rangle = \langle (p - \langle p \rangle)^m \rangle = \int dp (p - \langle p \rangle)^m P_2(p) \quad (4.10)$$

e encontramos a variância, a obliquidade e a curtose⁵

$$\begin{aligned} \text{var}(p) &\approx 7,68 \cdot 10^{-3}; \\ \gamma_1(p) &\equiv \frac{\langle (\Delta p)^3 \rangle}{\text{var}(p)^{3/2}} \approx 4,03 \cdot 10^{-2}; \\ \gamma_2(p) &= \frac{\langle (\Delta p)^4 \rangle}{\text{var}(p)^2} - 3 \approx -9,574 \cdot 10^{-2}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Com isso, vemos que a obliquidade é da ordem de 10^{-1} , indicando que a cauda direita da distribuição é um pouco mais longa que a esquerda (assimetria). Além disso, o fato da curtose ser da ordem de -10^{-1} justifica o motivo pelo qual o pico da curva é mais

⁴Não-analiticidades são comuns em distribuições de CTC's no limite quântico extremo e serão discutidas em detalhes no cap. 7.

⁵A obliquidade (γ_1) e a curtose (γ_2) estão respectivamente relacionados aos terceiro e quarto cumulantes de uma distribuição gaussiana, onde $\gamma_1 = 0 = \gamma_2$. Estes valores são muito usados para comparar a proximidade de uma distribuição arbitrária à uma gaussiana. Se $\gamma_1 \neq 0$, indica que a distribuição é assimétrica comparada a uma gaussiana. A distribuição possui um achatamento diferente da curva gaussiana se $\gamma_2 \neq 0$.

“achatado” do que o de uma gaussiana usual. Para $N_2 = 8$, observamos que o máximo da distribuição $p \approx 5,993$ está próximo da média $\langle p \rangle = 256/429 = 0,596736$. Através de integração numérica, obtemos a variância, a obliquidade e a curtosa de p , que são respectiva e aproximadamente: $5,23 \cdot 10^{-3}$, $8,88 \cdot 10^{-2}$ e $-9,46 \cdot 10^{-2}$. Estes valores ratificam que a curva não é gaussiana. É importante destacar que a análise da fig. 4.2 indica que as distribuições de g tendem a apresentar características gaussianas com o aumento do número de canais com maior facilidade que as distribuições de p . Isso pode ser entendido pelo fato dos cumulantes de carga de ordem superior serem mais sensíveis aos efeitos de interferência⁶, sendo necessário um maior número de canais para que a autopromediação seja suficiente para suavizar estes efeitos, alcançando o regime semiclássico.

Até agora apresentamos resultados para contatos ideais. Os efeitos da transparência em contatos são relevantes para o transporte quântico, pois eles incluem o tunelamento, o qual é um efeito puramente quântico (ver sec. 1.1). Porém, não existem resultados exatos para as distribuições dos CTC's neste caso, as quais podemos obter com nossas simulações. No entanto, o caso particular de um ponto quântico caótico com apenas um canal de espalhamento foi estudado analiticamente na ref. [51], através da teoria de matrizes aleatórias, onde foi deduzida uma expressão integral exata da distribuição do autovalor de transmissão $\rho(\tau)$ para contatos de transparência Γ e $\beta = 1, 2$ e 4 . Assim, através de uma integração numérica encontramos $\rho(\tau)$. Como visto na sec. 1.8, podemos usar a seguinte relação para obtermos a distribuição de qualquer CTC

$$P_m(q) = \int_0^1 d\tau \rho(\tau) \delta[q - f_m(\tau)]. \quad (4.12)$$

Vamos exemplificar o uso da eq. (4.12) escrevendo as distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo com dependências explícitas de, respectivamente, g e p . Começamos com a condutância

$$P_1(g) = \int_0^1 d\tau \rho(\tau) \delta(g - \tau) = \rho(\tau = g) \Theta(g) \Theta(1 - g), \quad (4.13)$$

onde Θ é a função degrau

$$\Theta(x) \equiv \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 1, & x \geq 0. \end{cases} \quad (4.14)$$

⁶Lembramos que os efeitos de interferência ficam embutidos na estatística dos autovalores de transmissão e, por sua vez, o CTC de ordem m é uma soma de polinômios de grau m destes autovalores [ver eq. (1.46)].

Este resultado é simples de entender, pois para apenas um canal de espalhamento a condutância adimensional é igual ao autovalor de transmissão e, portanto, as distribuições de g e τ são iguais. Agora vamos mostrar como fica para a potência do ruído de disparo

$$P_2(p) = \int_0^1 d\tau \rho(\tau) \delta[p - \tau(1 - \tau)]. \quad (4.15)$$

Podemos usar a propriedade da delta de uma função arbitrária

$$\delta[h(x)] = \sum_j \frac{\delta(x - x_j)}{|h'(x_j)|}, \quad (4.16)$$

onde x_j são raízes de $h(x)$. Na eq. (4.15), a função do argumento da delta é $h(\tau) = p - \tau + \tau^2$, com raízes $\tau_{\pm}(p) = (1 \pm \sqrt{1 - 4p})/2$. Além disso, $|h'(\tau_{\pm})| = |1 - 2\tau_{\pm}| = \sqrt{1 - 4p}$. Como a integração é no intervalo $0 \leq \tau \leq 1$ e por isso, temos que impor que $0 \leq p \leq 1/4$. Com isso, encontramos

$$P_2(p) = \frac{\Theta(p)\Theta(1/4 - p)}{\sqrt{1 - 4p}} \{\rho[\tau_+(p)] + \rho[\tau_-(p)]\}. \quad (4.17)$$

Perceba pela equação acima que a distribuição $P_2(p)$ apresenta não-analiticidade em $p = 1/4$. Iremos mostrar detalhes sobre não-analiticidades nas distribuições de qualquer CTC de uma forma geral (independente da topologia da rede, transparências, número de canais, etc.) no cap. 7.

Podemos seguir este mesmo procedimento para obtermos a distribuição de qualquer CTC. Para CTC's de ordem superior, a dificuldade é a solução analítica da equação polinomial imposta pela função delta: $q - f_m(\tau) = 0$. Porém, podemos encontrar a solução numericamente e, conseqüentemente, obter as distribuições dos CTC's.

Na fig. 4.4, comparamos os resultados da simulação com os exatos obtidos através da eq. (4.12) para contatos não-ideais e percebemos a grande semelhança entre os resultados. Com apenas um canal de espalhamento, a predominância do LQE pode ser notada nas distribuições. O esperado para uma distribuição de CTC no regime semiclássico é que seja aproximadamente uma gaussiana, a qual em escala log-normal é uma parábola com concavidade negativa. No entanto, é notável como as curvas para os quatro CTC's estão longe desse comportamento parabólico. Além disso, vemos que os comportamentos para diferentes β 's são bem distintos por causa da alta sensibilidade dos CTC's aos efeitos de interferência neste regime. Observamos também não-analiticidades nas distribuições dos quatro CTC's. Note que nos valores extremos dos CTC's as distribuições são não-

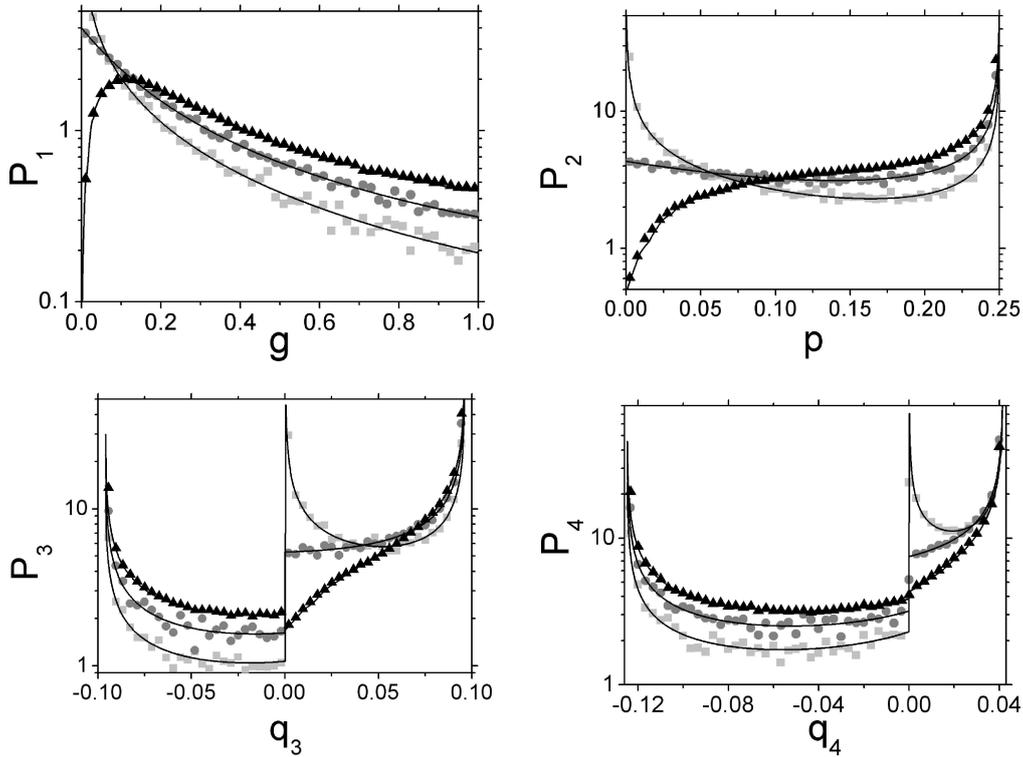


Figura 4.4 Distribuições dos quatro primeiros CTC's para um ponto quântico caótico com um único canal de espalhamento em cada guia e $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 2/3$ e $\beta = 1, 2$ e 4 (do mais claro para o mais escuro: quadrado, círculo e triângulo.). Os pontos são os dados da simulação e as linhas sólidas são resultados exatos [51].

analíticas, pois ou elas, ou suas derivadas são descontínuas. Além disso, o valor do CTC onde as não-analiticidades ocorrem não varia com β , o qual influencia apenas no valor da distribuição. As figuras também sugerem que as distribuições sejam mais irregulares para CTC's de ordem maior. Todas estas características irregulares das distribuições estão justificadas através de uma análise mais geral no cap. 7.

Vamos observar com mais detalhes a distribuição de condutância para $\beta = 1$ na fig. 4.4, pois ela demonstra muito bem a complexidade do LQE. A média e o desvio padrão (raiz quadrada da variância) são $\langle g \rangle \pm \sqrt{\text{var}(g)} \approx 0,20661 \pm 0,24726$. Vamos supor que não conhecemos a distribuição e que a única informação que temos é da média e desvio padrão. Sendo assim, intuitivamente estimamos que se fizéssemos várias medições de condutância do sistema, encontraríamos inúmeras vezes valores em torno de $g = 0,20661$ e que a margem de erro desta estimativa seria $\sigma_g = 0,24726$. Como o desvio padrão é maior que a média, também seríamos induzidos a acreditar que a distribuição é larga, pois, geralmente, esta característica é atribuída à variância. No entanto, percebemos a

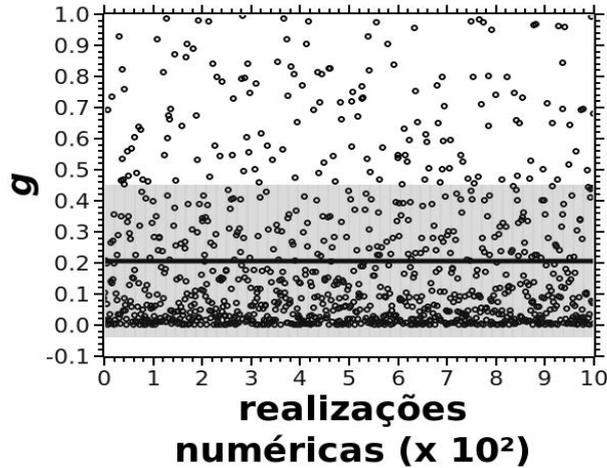


Figura 4.5 Valores de condutância obtidos aleatoriamente via simulação para um ponto quântico caótico com apenas um canal de espalhamento, contatos de transparência $2/3$ e $\beta = 1$. Cada uma das mil realizações numéricas gerou um valor de g , representados por pequenos círculos abertos. A reta em $g = 0,2060731$ representa a média da amostra. A faixa cinza em torno da reta, tem largura do dobro do desvio padrão da amostra $2 \times 0,2462341$.

pobreza desta estimativa, pois vemos na fig. 4.4 que esta distribuição diverge para $g = 0$, indicando que se fizermos várias medições de condutância do sistema, encontraremos inúmeras vezes valores muito próximos de zero. Para enfatizar a diferença entre estas estimativas, veja a fig. 4.5, a qual mostra a flutuação da condutância obtida por nossa simulação para o exemplo que estamos discutindo (um canal, $\beta = 1$ e $\Gamma = 2/3$) em função das realizações numéricas. Com apenas mil realizações, os resultados se concentram em valores muito próximos de zero. Perceba como a média e o desvio padrão da amostra são realmente pobres para estimar a estatística da condutância. Esta figura é análoga ao resultado experimental para um fio quase-unidimensional de ouro exibido pela fig. 1.12. O papel das realizações numéricas é similar ao do campo magnético na fig. 1.12. No entanto, percebemos que no caso experimental, a média e o desvio padrão fornecem uma boa estimativa da estatística da condutância. Isso é devido à proximidade do regime semiclássico, pois para o fio de ouro em questão $\langle g \rangle \pm \sqrt{\text{var}(g)} \approx 186,15 \pm 0,3$ (em unidades de $G_Q = 2e^2/h$). Perceba que a média é muito maior que o quantum de condutância ($186,15 \gg 1$) e que o desvio padrão é pequeno comparado com a média, sugerindo proximidade do regime semiclássico⁷. Sendo assim, alertamos do perigo em fazer estimativas dos CTC's no LQE através de médias e variâncias, pois neste regime as

⁷A ref. [10] mostra que a distribuição de condutância para a amostra da fig. 1.12 se aproxima muito bem de uma gaussiana.

distribuições são irregulares⁸.

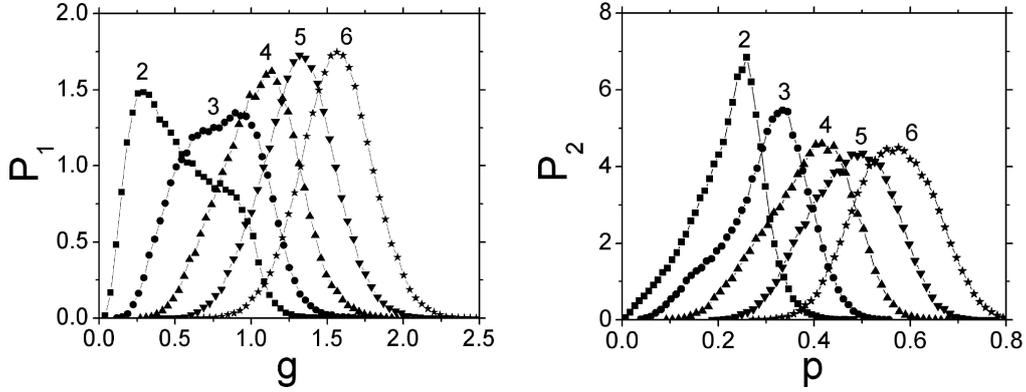


Figura 4.6 Distribuições de condutância e de potência do ruído de disparo para um ponto quântico com guias simétricos, barreiras de transparência $\Gamma = 0,5$ e $\beta = 4$. As curvas estão rotuladas pelos números de canais em cada um dos guias. As linhas são apenas guias de olhos.

Na fig. 4.6, vemos que para contatos não-ideais o comportamento das distribuições dos CTC's com a variação do número de canais é similar ao caso ideal (fig. 4.2), já que, à medida que o número de canais aumenta, as distribuições se tornam mais regulares, com formato aproximadamente gaussiano, sugerindo proximidade do regime semiclassico. Neste regime, para um ponto quântico simétrico, as médias de g e p são [52, 18]

$$\begin{aligned}\langle g \rangle &= \frac{N\Gamma}{2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{\Gamma}{4}, \\ \langle p \rangle &= \frac{N\Gamma}{8}(2 - \Gamma).\end{aligned}\quad (4.18)$$

Para fig. 4.6, temos $\Gamma = 1/2$ e $\beta = 4$ e, portanto,

$$\begin{aligned}\langle g \rangle &= \frac{N}{4} + \frac{1}{16} \\ \langle p \rangle &= \frac{3N}{32}.\end{aligned}\quad (4.19)$$

Perceba na figura que à medida que N aumenta, os máximos das distribuições se aproximam dos valores dados pela eq. (4.19), ratificando a tendência ao regime semiclassico.

A variação das distribuições com Γ pode ser notada na fig. 4.7, onde percebemos que à medida que Γ diminui, as irregularidades das distribuições aumentam. Sabemos

⁸Quando a distribuição é gaussiana, podemos caracterizá-la totalmente pela média e pela variância, pois todos seus outros cumulantes são nulos. Por isso, no regime semiclassico, é comum caracterizar a estatística dos CTC's pela média (que inclui LF) e pela variância, pois neste regime, as distribuições são aproximadamente gaussianas [23].

que ao reduzirmos Γ estamos dificultando o transporte dos elétrons e conseqüentemente diminuindo a condutância. Quando Γ é suficiente pequeno à ponto de $\langle g \rangle \sim 1$, surgem características do LQE, dentre elas, as irregularidades nas distribuições dos CTC's. Além disso, se $\Gamma = 0$ não há transporte e, conseqüentemente, a distribuição de qualquer CTC's é uma função delta localizada em zero. Percebemos esta tendência nas distribuições de q_3 e q_4 para $\Gamma = 0,1$, onde notamos que as curvas começam a ficar estreitas e altas, em valores próximos de zero.

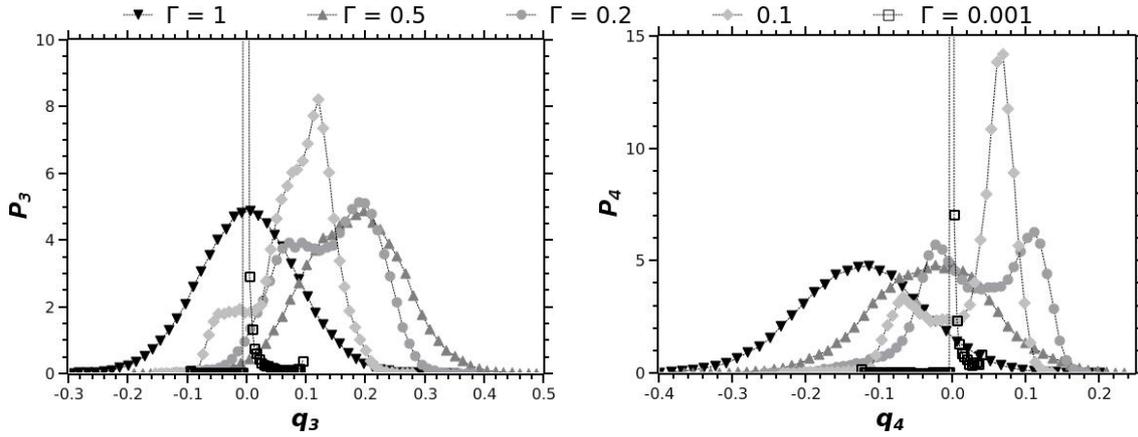


Figura 4.7 Distribuições dos terceiro e quarto CTC's para um ponto quântico com $\beta = 1$, $N_1 = N_2 = 8$ e $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$. As linhas são apenas guias de olhos.

Nossa simulação permite calcular médias facilmente sem precisar realizar integrações ponderadas com as distribuições. Basta fazer médias aritméticas dos valores gerados pelas realizações numéricas. Apesar das distribuições de CTC's serem altamente irregulares no LQE, veja na fig. 4.8 como os valores médios dos CTC's possuem comportamentos suaves em função das transparências das barreiras. Porém, note como as superfícies se tornam mais curvadas à medida que a ordem do CTC aumenta. Para entender isso, voltamos a lembrar que o CTC de ordem m é uma soma de polinômios de grau m dos autovalores de transmissão, que representamos como o vetor multidimensional $\vec{\tau}$. Por isso, quanto maior m , mais sensível o CTC com variações de parâmetros que influenciam $\vec{\tau}$, dentre eles, a transparência das barreiras⁹. Percebemos também nas figuras que elas são simétricas com respeito à troca de Γ_1 por Γ_2 . Esta invariância é esperada, já que o ponto quântico é um sistema que possui simetria no sentido do transporte, ou seja, é invariante injetar os elétrons no sistema pela direita ou pela esquerda¹⁰.

⁹Veremos na sec. 6.1 um resultado analítico [33] que, para guias simétricos, a média de um CTC de ordem m no regime semiclassical é um polinômio de Γ de ordem m .

¹⁰Num experimento, o sentido do transporte é controlado pelo sinal da voltagem aplicada ao sistema.

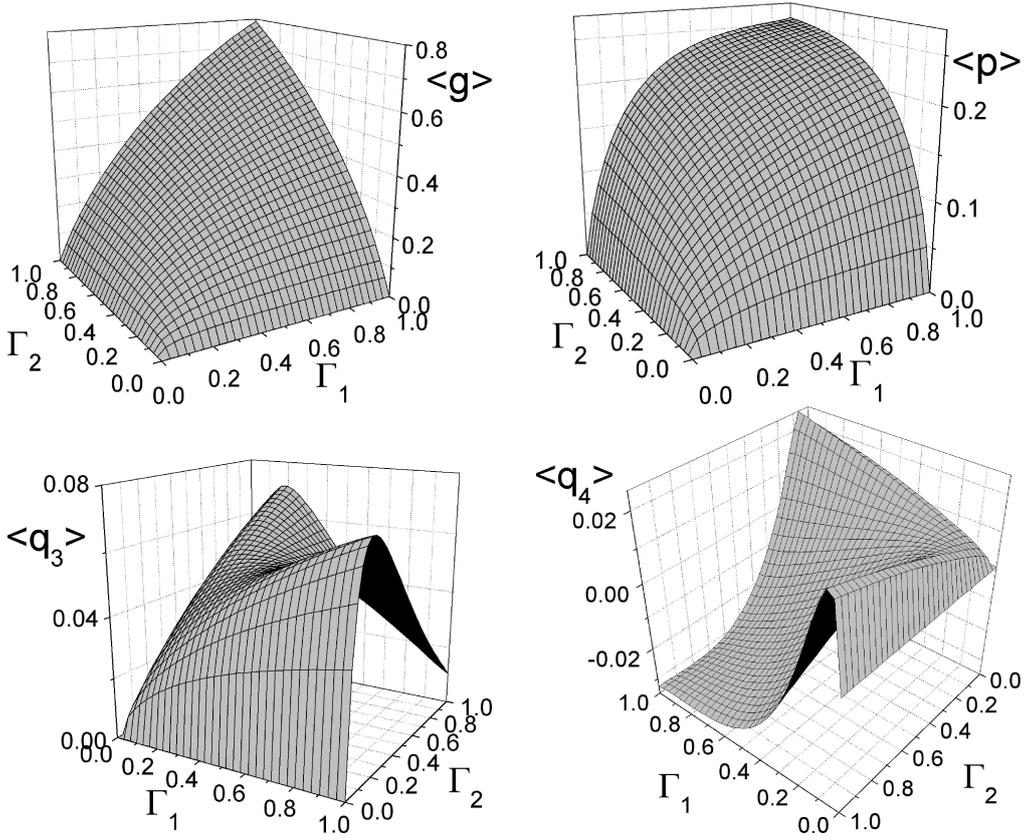


Figura 4.8 Médias dos quatro primeiros CTC's em função das transparências das barreiras para um ponto quântico caótico com dois canais de espalhamento abertos em cada um dos dois guias e $\beta = 1$.

Recentemente, expressões integrais exatas para momentos dos CTC's foram obtidas usando o método de supersimetria (sigla inglesa: SUSY) [28] para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$, número de canais e transparências arbitrárias. Observe nas figs. 4.9 e 4.11 como nossos resultados estão de acordo com os obtidos via SUSY. Na fig. 4.9, vemos que mesmo para contatos não-ideais, fixando valores de N_1 e $\Gamma = 0,6$, as médias de g e p são crescentes com N_2 . Como já discutimos, o limite de $N_2 \rightarrow \infty$ o sistema efetivamente é um PCQ com N_1 canais abertos e, portanto, deixa de ser caótico. Neste regime de PCQ, os autovalores de transmissão são determinísticos e são todos iguais $\tau_j = \Gamma_1$, com $j = 1, \dots, N_1$. Sendo assim, a condutância do PCQ é $g_{\text{PCQ}} = \sum_{j=1}^{N_1} \tau_j = N_1 \Gamma_1$ e a potência do ruído de disparo é $p_{\text{PCQ}} = \sum_{j=1}^{N_1} \tau_j (1 - \tau_j) = N_1 \Gamma_1 (1 - \Gamma_1)$. Como no nosso exemplo, $\Gamma_1 = 0,6$, temos $g_{\text{PCQ}} = 0,6 N_1$ e $p_{\text{PCQ}} = 0,24 N_1$. Portanto, esperamos que tanto a condutância como a potência de ruído de disparo possuam o comportamento assintótico ($N_2 \gg N_1$) de $\langle g \rangle \approx g_{\text{PCQ}}$ e $\langle p \rangle \approx p_{\text{PCQ}}$. Além disso, como no limite do PCQ o sistema deixa de ser caótico, os CTC's não mais flutuam estatisticamente e, conseqüentemente,

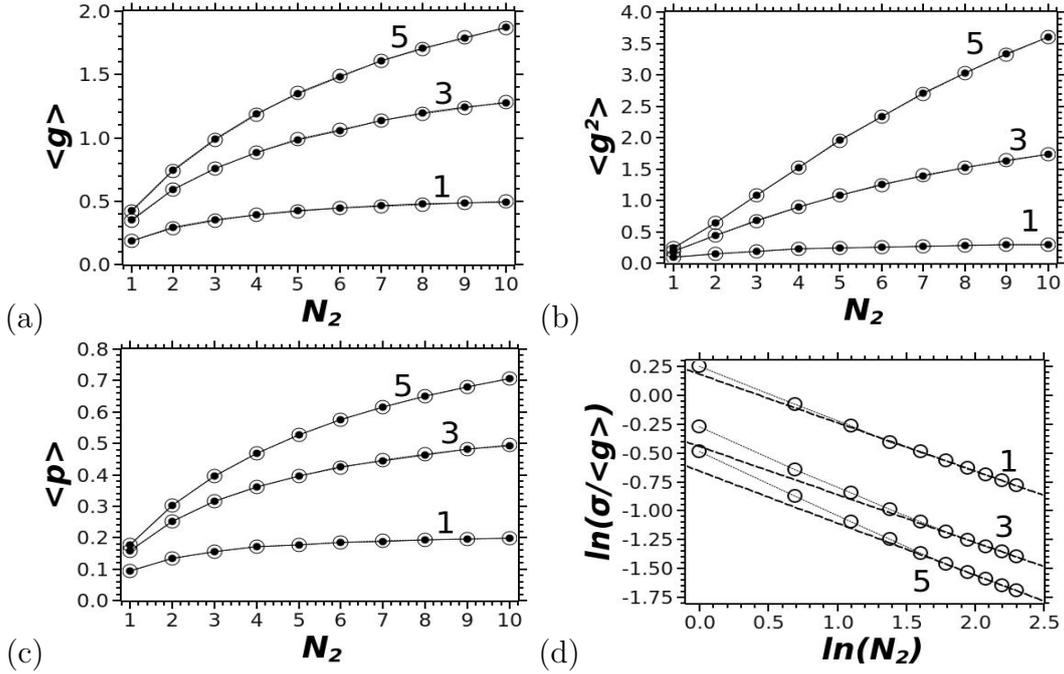


Figura 4.9 Estatísticas de g e de p em função do número de canais para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$. Os números rotulando as curvas são os valores de N_1 , enquanto $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,6$. Os pontos fechados ilustram os resultados via SUSY [28] e os abertos representam os dados da simulação. As linhas sólidas (SUSY) e pontilhadas (simulação) são apenas guias de olhos. Em (d), temos o desvio relativo da condutância em escala ln-ln. As retas tracejadas são regressões lineares obtidas através dos pontos $N_2 = 7, 8, 9$ e 10 , com coeficientes angulares $-0,42; -0,415$ e $-0,45$; e lineares $0,18; -0,446$ e $-0,658$; respectivamente para $N_1 = 1, 3$ e 5 .

suas variâncias devem ser nulas. Para que a variância da condutância seja nula no limite do PCQ, devemos ter $\langle g^2 \rangle = \langle g \rangle^2 \approx g_{\text{PCQ}}^2 = 0,36N_1^2$. Apesar de em (b), a curva de $\langle g^2 \rangle$ não consegue mostrar de maneira convincente este assintótico, podemos ver que isso é verdade através do desvio relativo em (d). Notem que no limite do PCQ, a curva passa a ter um comportamento linear, indicando uma lei de potência do tipo $\sigma/\langle g \rangle \propto N_2^\gamma$, com $\gamma < 0$. Assim, no limite de $N_2 \rightarrow \infty$ o desvio relativo é nulo, indicando que g não flutua estatisticamente, conforme o esperado para o PCQ. Visando maior rigor na investigação do limite do PCQ, obtemos através da simulação $\langle g \rangle$, $\langle g^2 \rangle$ e $\langle p \rangle$ para $10 \leq N_2/N_1 \leq 15$ e em seguida estimamos seus valores para $N_2 \rightarrow \infty$ através de extrapolação numérica. Estes resultados estão ilustrados na fig. 4.10, onde notamos que nossas extrapolações estão de acordo com o esperado no limite do PCQ.

A fig. 4.11 ilustra os resultados para um ponto quântico com apenas dois canais de espalhamento abertos e variando as transparências das barreiras. Perceba que as médias de g , g^2 e de p se anulam quando $\Gamma_2 \rightarrow 0$. Conseqüentemente, o desvio padrão da

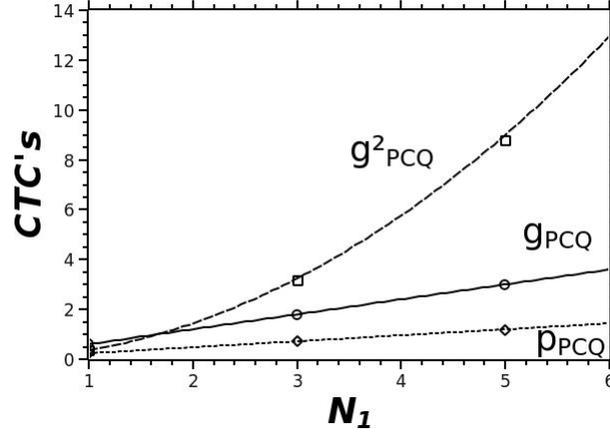


Figura 4.10 Estatísticas de g e de p em função de N_1 para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$ e $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,6$. Os símbolos são extrapolações para $N_2 \rightarrow \infty$ através de resultados da simulação com $10 \leq N_2/N_1 \leq 15$. As curvas são guias de olhos para os resultados exatos para um ponto de contato quântico (PCQ) com N_1 canais abertos e transparência $\Gamma_1 = 0,6$.

condutância (σ) também se anula neste limite, pois $\langle g \rangle^2 = \langle g^2 \rangle = 0$. Este resultado é esperado, já que se pelo menos uma das barreiras tem transparência nula, não há transporte e, portanto, todos os CTC's se anulam e deixam de flutuar estatisticamente. Porém, apesar de neste limite σ e $\langle g \rangle$ se anularem, a razão entre eles possui um valor finito e não-nulo ($0,6455 \lesssim \sigma/\langle g \rangle \lesssim 2,9789$), como podemos ver em (d). Além disso, quanto menor Γ_1 , maior o desvio relativo da condutância. Isso ratifica as altas flutuações no LQE, pois mesmo quando $\langle g \rangle \ll 1$, a flutuação da condutância relativa ao seu valor médio ainda é considerável.

4.3 SEMELHANÇAS ENTRE DISTRIBUIÇÕES DE CONDUTÂNCIA

É intuitivamente simples entender o motivo pelo qual a média da condutância depende de forma crescente do número de canais e da transparência das barreiras, pois aumentar N ou Γ torna mais provável a transmissão de cargas e, portanto, aumenta a condutância. Se fixarmos um valor de N e de Γ para um ponto com guias e contatos iguais, sempre é possível fixar $N' > N$ e encontrar um Γ' que produz o mesmo valor da média da condutância, ou seja, $\langle g \rangle_{N,\Gamma} = \langle g \rangle_{N',\Gamma'}$. Como um exemplo concreto, considere o caso semiclassico onde a média da condutância obedece a lei de composição de Ohm para dois resistores idênticos de resistência $R = 1/(N\Gamma)$ em série. Neste caso $\langle g \rangle = 1/(2R) = N\Gamma/2$ e conseqüentemente, $\Gamma' = N\Gamma/N'$. Todavia, sabemos que a média é apenas o primeiro momento de uma distribuição e, por isso, é interessante investigar se esta reescala se estende para toda a distribuição da condutância.

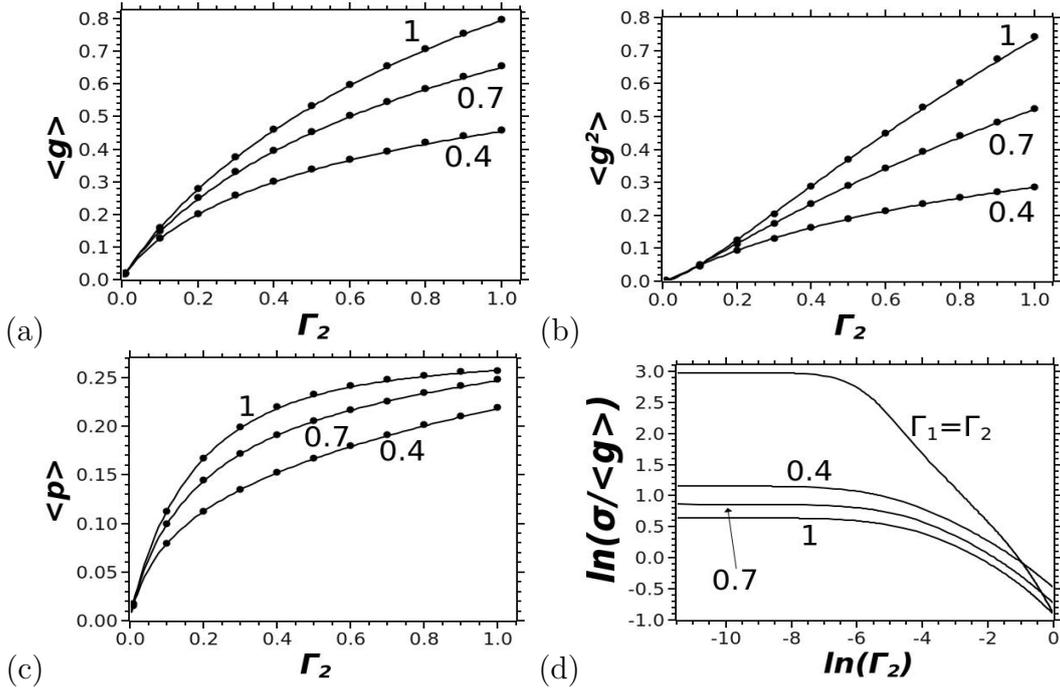


Figura 4.11 Estatísticas de g e de p em função das transparências das barreiras para um ponto quântico caótico com dois canais de espalhamento em cada um dos guias e $\beta = 1$. Os números rotulando as curvas são os valores de Γ_1 . Os pontos ilustram os resultados via SUSY [28] e as linhas sólidas representam os dados da simulação. Em (d), temos o desvio relativo da condutância em escala ln-ln. Através de uma extrapolação numérica, estimamos o desvio relativo no limite $\Gamma_2 \rightarrow 0$: $\sigma/\langle g \rangle \approx 0,6455$; $0,8619$; $1,1582$ e $2,9789$; respectivamente para $\Gamma_1 = 1$; $0,7$; $0,4$ e Γ_2 .

Considere que $P_1(P'_1)$ é a distribuição de condutância para o sistema com N e Γ (N' e Γ'). Primeiramente, fixamos N e Γ . Em seguida escolhemos $N' > N$ e variamos $\Gamma' < \Gamma$, analisando a diferença entre as distribuições P_1 e P'_1 através da entropia relativa (ou distância de Kullback–Leibler)¹¹ [53]

$$\mathcal{K}(P'_1, P_1) \equiv \int dg P'_1(g) \log \left[\frac{P'_1(g)}{P_1(g)} \right]. \quad (4.20)$$

Com esta análise, verificamos que nenhum valor de Γ' torna as distribuições iguais, ou seja, sempre temos $\mathcal{K}(P'_1, P_1) \neq 0$. Porém, similaridades notáveis emergem quando N' é suficientemente próximo de N . Usando a notação $(N; \Gamma)$, percebemos pela fig. 4.12 grandes semelhanças entre as distribuições de condutância dos pares $\{(3; 0,63), (2; 1)\}$,

¹¹Na teoria de probabilidade e na teoria da informação, a entropia relativa é muito usada para quantificar a diferença entre distribuições de probabilidade. Apesar de não se tratar de uma métrica legítima, pois não é simétrica [$\mathcal{K}(P_1, P'_1) \neq \mathcal{K}(P'_1, P_1)$], é conceito muito importante para a teoria da informação quântica [54] e para a física estatística [55, 56].

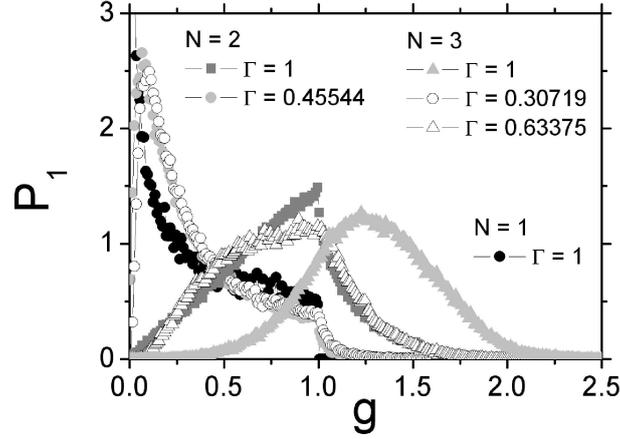


Figura 4.12 Distribuições de condutância para um ponto quântico caótico de guias e contatos simétricos com $\beta = 1$. Cada distribuição está caracterizada pelos parâmetros $(N; \Gamma)$. Perceba a semelhança entre as distribuições de sistemas com diferentes $(N; \Gamma)$. Os valores das transparências não-ideais ($\Gamma \neq 1$) foram estimados através da minimização da diferença entre as distribuições, a qual foi quantificada pela entropia relativa [eq. (4.20)]. As linhas são apenas guias de olhos.

$\{(3; 0,31), (1; 1)\}$ e $\{(2; 0,46), (1; 1)\}$. Estes pares são obtidos fixando N, N' e $\Gamma = 1$ e variando Γ' para achar o mínimo da entropia relativa

$$\frac{d\mathcal{K}(P'_1, P_1)}{d\Gamma'} = 0, \quad \text{com} \quad \frac{d^2\mathcal{K}(P'_1, P_1)}{d\Gamma'^2} > 0, \quad (4.21)$$

indicando que as distribuições são as mais próximas possíveis. Através dos valores numéricos destes pares, observados na fig. 4.12, percebemos que eles sugerem a seguinte lei de escala aproximada

$$P_1 \simeq P'_1 \Big|_{\Gamma' = N\Gamma/N'} \quad (4.22)$$

com N' próximo de N . Perceba que a relação $\Gamma' = N\Gamma/N'$ lembra a lei clássica de Ohm. Não achamos nenhuma lei de escala aproximada semelhante para distribuições dos outros CTC's.

4.4 SUMÁRIO

Vimos neste capítulo resultados da estatística de contagem de carga através dos quatro primeiros CTC's para um único ponto quântico caótico com contatos não-ideais. Usamos os algoritmos descritos no cap. 3 para realizar simulações numéricas, obtendo a estatística completa dos CTC's: distribuições e cumulantes. Parte deste capítulo foi publicado na ref. [30]. Nossa simulação também colaborou em um trabalho que está em fase de

redação para publicação, o qual trata da aplicação do método de supersimetria para calcular momentos dos CTC's em um ponto quântico não-ideal [28].

Variamos as simetrias da cavidade, a transparência das barreiras e os números de canais de espalhamento. Observamos que as distribuições no limite quântico extremo são bastante irregulares apresentando, inclusive, não-analiticidades. No regime semiclássico, vimos a tendência das distribuições serem aproximadamente gaussianas e, por isso, a média e variância fornecem uma boa descrição estatística do CTC.

Notamos semelhanças entre distribuições de condutâncias com diferentes parâmetros, sugerindo uma lei de escala clássica aproximada (lei de Ohm) que torna as distribuições as mais próximas possíveis.

No próximo capítulo, veremos a descrição de um método de inferência bayesiana, que utilizaremos nas estimativas numéricas de correções devido à localização fraca e variâncias dos CTC's. Este método será usado no cap. 6, onde simularemos numericamente redes de pontos quânticos com diferentes topologias: uma cadeia finita de pontos quânticos e um anel de quatro pontos quânticos.

INFERÊNCIA BAYESIANA

As correções devido à localização fraca e variâncias dos CTC's desempenham papel fundamental na caracterização do transporte quântico, pois estas propriedades são consequências de interferências quânticas e do caos presentes em nanoestruturas. Todavia, nossa simulação gera resultados com um elevado ruído numérico para estas grandezas. Uma maneira de superar esta dificuldade é usar métodos de inferência bayesiana, os quais apresentaremos neste capítulo.

Para a *estatística ortodoxa*, a probabilidade é interpretada como *frequência*: realize um experimento, conte quantas vezes acontece um determinado evento e divida pelo número de realizações. Se o sinal de uma determinada grandeza medida é nítido, mesmo com poucas realizações do experimento, podemos obter uma boa estimativa. Porém, se o sinal é ruidoso, precisamos de inúmeras medições para que possamos melhorar a estimativa, o que nem sempre é possível. Por outro lado, podemos entender probabilidade como *lógica*, já que mesmo sem o experimento, se tivermos uma boa informação sobre o fenômeno e sobre seu processo de medição, podemos estimar as chances do evento acontecer. Estas informações podem, por exemplo, ser baseadas em leis físicas rigorosas, as quais podem ser utilizadas para melhorar a estimativa do sinal ruidoso. Como acoplar essas duas estimativas para inferir o resultado final? Para isso, podemos usar a *inferência bayesiana*, a qual iremos de maneira resumida apresentar aqui. Basear-nos-emos nas refs. [57, 56], nas quais existem conteúdos mais detalhados sobre o tema. Para leitores que não estão habituados à estatística bayesiana, recomendamos antes uma leitura na ref. [58], a qual é um texto de divulgação que explica de maneira simplificada a ideia de Thomas Bayes, interpreta e deduz o seu teorema e faz aplicações simples em diagnósticos médicos e testes de paternidade.

5.1 O TEOREMA DE BAYES

Para deduzirmos o teorema de Bayes, primeiramente considere as notações:

- $P(A|B)$: probabilidade de um evento A ser verdade, dado que a proposição B seja verdadeira;

- AB : ambos A e B são verdadeiros;
- BA : ambos B e A são verdadeiros.

Os dois últimos itens ilustram a comutatividade da lógica de Aristóteles: $AB = BA$.

Ao invés de A e B , vamos agora dar nomes as nosso eventos:

- I : informação de base sobre certo fenômeno;
- H : hipótese sobre o fenômeno a ser testada;
- D : dados do fenômeno.

O teste da nossa hipótese é verificar se H é verdadeiro, dado que D e I sejam verdadeiros também e, portanto, precisamos calcular $P(H|DI)$. Para isso, façamos uso da regra do produto da teoria da probabilidade

$$\begin{aligned} P(HD|I) &= P(H|DI)P(D|I); \\ P(DH|I) &= P(D|HI)P(H|I). \end{aligned} \tag{5.1}$$

Porém, como $HD = DH$, então

$$P(HD|I) = P(DH|I). \tag{5.2}$$

Portanto, das eqs. (5.1) e (5.2) temos

$$P(H|DI) = P(H|I) \frac{P(D|HI)}{P(D|I)}. \tag{5.3}$$

A eq. (5.3) é conhecida como *o teorema de Bayes* ou *a fórmula de Bayes*. Ela possui um significado profundo sobre processos de estimativas e por isso, vamos interpretá-la. Seus termos são conhecidos da seguinte forma:

- $P(H|DI)$: probabilidade *a posteriori* da hipótese, condicionada à veracidade dos dados;
- $P(H|I)$: probabilidade *a priori* da hipótese;
- $P(D|I)$: probabilidade direta dos dados;
- $P(D|HI)$: probabilidade do dados (ou probabilidade condicional), sob a condição da hipótese ser verdadeira;

Podemos entender o processo de inferência bayesiana da seguinte forma:

1. Informação de base: verificamos certo fenômeno e inicialmente temos certa informação sobre ele I ;
2. Hipótese: baseado em argumentos lógicos sobre a informação de base, criamos uma hipótese para o fenômeno: $P(H|I)$;
3. Dados: obtemos dados do fenômeno, por exemplo, através de experimentos;
4. Inferência: usando a fórmula de Bayes, unimos a hipótese aos dados e, com isso, obtemos a probabilidade *a posteriori* da hipótese.

Formalmente, a probabilidade direta dos dados pode ser obtida fazendo a decomposição

$$P(D|I) = P(DH|I) + P(D\bar{H}|I) = P(D|HI)P(H|I) + P(D|\bar{H}I)P(\bar{H}|I),$$

onde a barra sobre H indica a negação da hipótese. Porém, uma maneira alternativa e prática é absorver $P(D|I)$ como uma constante de normalização da probabilidade *a posteriori*.

5.2 REGRESSÃO LINEAR BAYESIANA

Vamos agora exemplificar esta inferência bayesiana através de uma regressão linear para ajustar uma reta a um conjunto de pontos ruidosos.

Informação de base: Considere um fenômeno, no qual nossa informação de base é que uma determinada grandeza y possui um comportamento linear em função de x

$$I : f(x; a, b) = ax + b. \quad (5.4)$$

Dados: Considere um determinado processo de medição (experimento, métodos numéricos, etc.) que fornece os pontos

$$D : \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N, \quad (5.5)$$

os quais não estão alinhados, apresentando flutuações em relação ao comportamento linear.

Hipótese e probabilidade *a priori*: O ruído dos dados é definido como

$$\epsilon_i(a, b) \equiv f(x_i; a, b) - y_i. \quad (5.6)$$

A probabilidade *a priori* deve conter o mínimo de informação possível de D , para evitar que estejamos “vendo” coisas nos dados que não estão neles. Sendo assim, considere que não conhecemos D e vamos supor que o processo de medição não produz erro sistemático, em outras palavras, considerar que se trata de um ruído branco gaussiano¹

$$P(\epsilon; \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{2\sigma^2}\right). \quad (5.7)$$

Assim, a probabilidade conjunta dos ruídos é

$$\begin{aligned} P[\epsilon_i(a, b), \dots, \epsilon_N(a, b); \sigma] &= \prod_{i=1}^N P[\epsilon_i(a, b); \sigma] \\ &= (\sigma\sqrt{2\pi})^{-N} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N \epsilon_i^2(a, b)\right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Nossa hipótese consiste em dar valores a a , b e σ . Logo, a eq. (5.8) é, justamente, a probabilidade *a priori* de nossa hipótese

$$P(H|I) = P[\epsilon_i(a, b), \dots, \epsilon_N(a, b); \sigma] \equiv P_0(a, b; \sigma). \quad (5.9)$$

Probabilidade condicional: Considerando H e I , temos valores fixos de a e b e, portanto, a função $f(x; a, b)$. Com isso, tendo os dados D , podemos calcular numericamente os desvios $\epsilon_i(a, b)$ pela eq. (5.6), para $i = 1, \dots, N$. Em seguida fazemos um histograma desses desvios e obtemos a distribuição condicional de ruído $h(\epsilon)$. A probabilidade conjunta é, portanto,

$$h[\epsilon_i(a, b), \dots, \epsilon_N(a, b)] = \prod_{i=1}^N h[\epsilon_i(a, b)] \quad (5.10)$$

Aqui, a eq. (5.10) é a probabilidade condicional dos dados, considerando que H e I são verdade

$$P(D|HI) = h[\epsilon_i(a, b), \dots, \epsilon_N(a, b)] \equiv P_1(a, b). \quad (5.11)$$

Probabilidade *a posteriori*: Agora fazemos uso da fórmula de Bayes, dada pela eq.

¹Para uma discussão detalhada do motivo e das ocasiões que podemos usar ruído branco gaussiano, consulte a ref. [56].

(5.3) e calculamos a probabilidade *a posteriori*

$$P(D|HI) \equiv P(a, b; \sigma) \propto P_0(a, b; \sigma)P_1(a, b). \quad (5.12)$$

Estimativa: Para estimar os parâmetros de H , precisamos definir intervalos: $a \in A$, $b \in B$ e $\sigma \in \Sigma$. A escolha de A e B pode ser feita, por exemplo, baseando-se em estimativas convencionais de métodos de mínimos quadrados (regressão linear tradicional) ou por argumentos sustentados em informações privilegiadas do sistema, como por exemplo, considerar que a seja positivo para certo fenômeno. Já o intervalo Σ pode ser baseado no desvio padrão dos dados. Assim, podemos normalizar a probabilidade *a posteriori* fazendo

$$P(a, b; \sigma) = \frac{P_0(a, b; \sigma)P_1(a, b)}{\int_A da \int_B db P_1(a, b) \int_\Sigma d\sigma P_0(a, b; \sigma)}. \quad (5.13)$$

Desejamos encontrar a reta que melhor se ajusta ao pontos. Sendo assim, precisamos estimar explicitamente a e b . Não temos interesse direto no parâmetro σ , o qual é conhecido como “parâmetro inconveniente”. Para eliminá-lo de nossa estimativa, integramos em σ nossa probabilidade *a posteriori* e ficamos apenas com a probabilidade marginal conjunta de a e b como nossa nova probabilidade *a posteriori*.

$$P(a, b) = \int_\Sigma d\sigma P(a, b; \sigma) \quad (5.14)$$

Os valores estimados a^* e b^* são os que tornam máxima a probabilidade *a posteriori* dentro dos intervalos A e B

$$P(a^*, b^*) = \max[P(a, b)] \quad (5.15)$$

Os erros desta inferência podem ser estimados pelo desvio de cada parâmetro em relação à estimativa.

$$\Delta_a \equiv \sqrt{\int_A da (a - a^*)^2 \int_B db P(a, b)}, \quad (5.16)$$

$$\Delta_b \equiv \sqrt{\int_A da \int_B db (b - b^*)^2 P(a, b)}. \quad (5.17)$$

Com isso, os coeficientes $a^* \pm \Delta_a$ e $b^* \pm \Delta_b$ ajustam a melhor reta para os dados.

5.3 LOCALIZAÇÃO FRACA

Para concretizar a regressão linear bayesiana através de um exemplo, vamos aplicá-la na estimativa da correção de localização fraca para um ponto quântico com contatos ideais, N canais em cada guia e cavidade com $\beta = 1$. Como visto na sec. 1.9, podemos obter g_{LF} , tomando o limite $N \rightarrow \infty$ de $\delta g = \langle g \rangle - g_{\text{Ohm}} = \langle g \rangle - N/2$.

A simulação fornece $\langle g \rangle$, porém não podemos aumentar demasiadamente o valor de N pois, como visto no apêndice D, o tempo de processamento cresce como lei de potência em função do número de canais. Também existe o problema de precisão numérica, pois para $N \gg 1 \Rightarrow \langle g \rangle \sim g_{\text{Ohm}} \Rightarrow \delta g / \langle g \rangle \ll 1$, o que significa que devemos ter uma alta precisão numérica para obtermos diretamente um bom resultado de δg . Na prática isso é inviável, pois o algoritmo envolve inúmeras operações matriciais como somas, multiplicações e inversões. Sendo assim, estas operações carregam um grande erro numérico que aumenta com o crescimento das ordens das matrizes ($2N \times 2N$). Além disso, temos os erros estatísticos, pois se trata de um método numérico estocástico.

Para contornar o problema da inviabilidade computacional de fazer N extremamente grande, a primeira ideia é obter resultados para valores de número de canais razoavelmente grandes e depois extrapolar para $N \rightarrow \infty$. Para isso, fazemos um gráfico cartesiano de $\delta g \times 1/N$ e, em seguida, fazemos uma regressão linear, do tipo $\delta g = ax + b$, onde $x \equiv 1/N$. Assim, podemos obter a correção de LF da condutância pelo coeficiente linear da reta, pois $g_{LF} = \delta g(x = 0) = b$.

Através da fig. 5.1 podemos observar como o ruído numérico é alto, e por isso a estimativa deve ser cautelosa, visto que temos poucos dados ($N = 20, \dots, 50$). Note que a estimativa bayesiana está mais próxima do resultado exato, o qual é obtido através da eq. (1.72)

$$\delta g = \frac{N^2}{2N+1} - \frac{N}{2} = -\frac{1}{4} + \frac{1}{8N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (5.18)$$

Além disso, observe que os erros dos coeficientes das retas da regressão linear tradicional são da ordem de dez vezes maiores do que os estimados por regressão linear bayesiana. Analisando o valor de interesse, o erro relativo da estimativa bayesiana de g_{LF} em relação ao resultado exato é $|0,2507 - 0,25|/0,25 = 0,28\%$, enquanto da estimativa de mínimos quadrados é $|0,278 - 0,25|/0,25 = 11,2\%$.

Há uma sutileza na escolha dos intervalos A , B e Σ . No caso da estimativa de localização fraca, sabemos que os resultados obtidos através de métodos de expansão perturbativa diagramática sugerem que, em geral, $0 < a < b$. Além disso, pela dispersão ilustrada na fig. 5.1, consideramos que $-0,35 < b < -0,15$. Para o intervalo Σ , calculamos

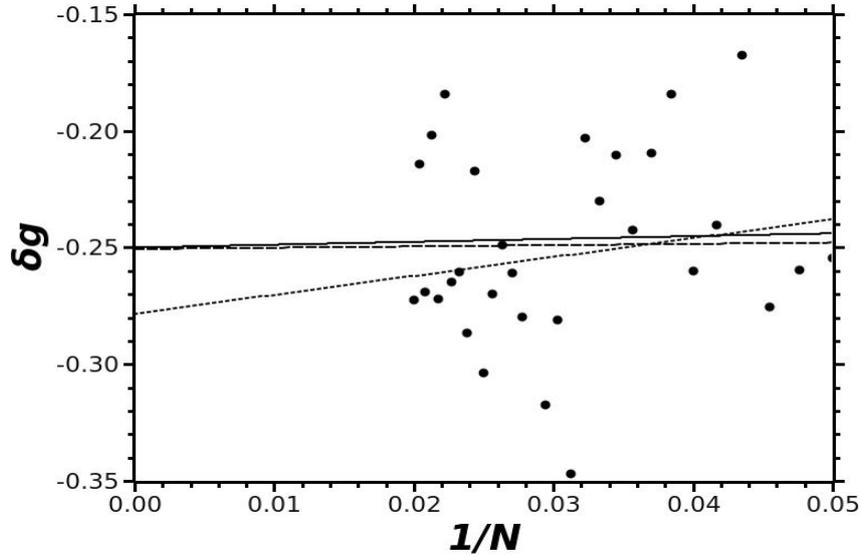


Figura 5.1 Correção da condutância em relação à lei de Ohm ($\delta g = \langle g \rangle - N/2$) para um ponto quântico com contatos ideais, N canais em cada guia e cavidade com $\beta = 1$. Os pontos são dados da simulação. A reta pontilhada foi obtida através de uma regressão linear tradicional, a qual se baseia em mínimos quadrados: $(0,81 \pm 0,97)/N - 0,278 \pm 0,031$. A regressão linear bayesiana forneceu a reta tracejada: $(0,058 \pm 0,067)/N - 0,2507 \pm 0,0031$. A curva sólida é o resultado exato, gerado pela eq. (5.18).

os erros absolutos $\epsilon_i(a, b)$ [ver eq. (5.6)] para todos os pontos (variando i) e em todo o intervalo (A, B) . Em seguida definimos $\min[\epsilon_i(a, b)] < \sigma < \max[\epsilon_i(a, b)]$.

5.4 SUMÁRIO

Ao contrário dos métodos ortodoxos, os quais atribuem apenas frequência à probabilidade, a estimativa bayesiana incorpora lógica ao processo de inferência. Quanto maior a quantidade de informações seguras sobre o fenômeno, mais precisa é a estimativa.

A regressão linear bayesiana tem se mostrado importante para extrapolar numericamente o valores da correção da localização fraca e da variância dos cumulantes de transferência de carga. Se os dados obtidos pela simulação não fossem tão ruidosos, o resultado da regressão linear tradicional seria suficiente. Porém, isso não acontece nos nossos resultados, pois o alto ruído numérico é capaz de induzir uma estimativa pobre pelo método de mínimos quadrados.

No próximo capítulo, estudaremos duas redes de pontos quânticos: uma cadeia e um anel de quatro pontos. Usaremos a regressão linear bayesiana para comparar nossos resultados com os obtidos por outros métodos analíticos no regime semiclássico. Além disso, mostraremos a estatística de contagem de carga em regimes arbitrários de transporte.

TRANSPORTE EM REDES DE PONTOS QUÂNTICOS

Vimos no cap. 4 a estatística de contagem de carga em um único ponto quântico caótico. Porém, os algoritmos apresentados no cap. 3 permitem a simulação de pontos quânticos acoplados formando redes de topologias arbitrárias. Os modelos de redes de pontos quânticos são importantes no estudo do transporte quântico com efeitos de descoerência [31], temperatura e campo magnético [19], e com acoplamento de reservatórios ferromagnéticos e supercondutores [32]. Além disso, é possível acoplar pontos quânticos em experimentos [59, 60, 61, 62]. O estudo de diversas topologias também possui importância em nanotecnologia para a otimização de dispositivos, pois deve haver uma topologia mais adequada dependendo da finalidade do dispositivo.

A maioria dos métodos analíticos possuem limitações ainda maiores para estudar redes de topologias mais complexas em regimes arbitrários de transporte. Por isso, implementamos numericamente simulações baseadas nos algoritmos expostos no cap. 3 para duas redes de pontos quânticos: uma cadeia de pontos e um anel de quatro pontos. Mostraremos os resultados da estatística de contagem de carga destes sistemas em diversos regimes de transporte. No regime semiclássico, estimamos valores de correções devido à localização fraca e variâncias de CTC's, comparando com recentes resultados obtidos via teoria de circuitos [33] e técnicas diagramáticas [32]. Além disso, apresentaremos distribuições dos quatro primeiros CTC's em regimes arbitrários de transporte e mostraremos que as semelhanças nas distribuições de condutância, vistas em um único ponto quântico (sec. 4.3), existem nas estruturas estudadas neste capítulo e também sugerem uma lei de escala aproximada baseada na lei de Ohm.

6.1 CADEIA LINEAR DE PONTOS QUÂNTICOS

6.1.1 Implementação numérica

Modelamos uma cadeia de pontos quânticos seguindo a ilustração da fig. 6.1. Consideramos que todas as cavidades caóticas da cadeia possuem as mesmas características de simetria física e, portanto, o mesmo β .

Os dados de entrada são

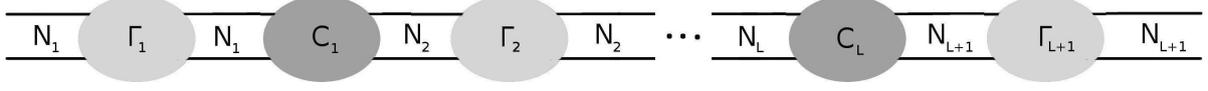


Figura 6.1 Diagrama de centros de espalhamento para uma cadeia de L pontos quânticos. As barreiras são representadas por suas transparências Γ_i , com $i = 1, 2, \dots, L + 1$. As cavidades caóticas são C_j , com $j = 1, 2, \dots, L$.

- Número de pontos quânticos da cadeia: L ;
- Transparência das barreiras: Γ_j , com $j = 1, \dots, L + 1$;
- Número de canais de espalhamento abertos em cada um dos guias: N_j , com $j = 1, \dots, L + 1$;
- Índice de simetria das cavidades: β ;
- Número de realizações numéricas: n_{rel} .

Como podemos ver na fig. 6.1, a cadeia linear é um acoplamento em série de $2L + 1$ centros de espalhamento: $L + 1$ barreiras e L cavidades caóticas. Usando o algoritmo de estube podemos concatenar os centros espalhadores três a três até reduzirmos o sistema à um único centro espalhador efetivo, cuja matriz de espalhamento fornece os autovalores de transmissão que caracterizam o transporte quântico da cadeia.

Análogo ao algoritmo para um único ponto quântico descrito na sec. 4.1, as matrizes das barreiras são determinísticas

$$\mathbf{S}_j = \begin{pmatrix} r_j \mathbf{1} & t_j \mathbf{1} \\ t_j \mathbf{1} & r_j \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

onde $t_j = \sqrt{\Gamma_j}$ e $r_j = i\sqrt{1 - \Gamma_j}$, com $j = 1, \dots, L + 1$. As matrizes de espalhamento das cavidades, ${}^j\mathbf{S}_{\text{cav}}$, com $j = 1, \dots, L + 1$, são membros do ensemble circular e, por isso, em cada realização numérica, devem ser geradas aleatoria e independentemente seguindo o algoritmo descrito na sec. 2.3.3.

Começamos o procedimento da esquerda para direita, concatenando a primeira barreira, a primeira cavidade e a segunda barreira. Pela fórmula de estube [eq. (3.21)]

$$\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{R} + \mathbf{T}[(\mathbf{1} - {}^1\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R})^{-1}]^1\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.2)$$

onde \mathbf{S} é a matriz de espalhamento efetiva da primeira cavidade acoplada às duas pri-

meiras barreiras e

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_2 \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_2 \mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

Com esta operação os três primeiros centros de espalhamento são efetivados em apenas um com matriz de espalhamento \mathbf{S} dada pela expressão 6.2. Agora devemos concatenar este centro efetivo com a segunda cavidade e a terceira barreira. Fazendo uso da fórmula de estube, temos

$$\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{R} + \mathbf{T}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R}')^{-1}]^2\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.3)$$

onde agora

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_3 \mathbf{1} \end{pmatrix}, & \mathbf{T}' &= \begin{pmatrix} \mathbf{t}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_3 \mathbf{1} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T} &= \begin{pmatrix} \mathbf{t} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_3 \mathbf{1}' \end{pmatrix}, & \mathbf{R}' &= \begin{pmatrix} \mathbf{r}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_3 \mathbf{1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

e $\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{t}$ e \mathbf{t}' são os blocos de \mathbf{S} . Desta forma concatenamos o centro efetivo obtido pela primeira iteração do algoritmo (referente à primeira cavidade com as duas primeiras barreiras) com a segunda cavidade e a terceira barreira, obtendo a matriz de espalhamento efetiva dos cinco primeiros centros espalhadores. Desta forma, podemos seguir o mesmo procedimento, concatenando os centros em série até reduzir o sistema a um único centro espalhador. Para isso, fazemos as seguintes iterações para j de 3 a L

$$\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{R} + \mathbf{T}'[(\mathbf{1} - {}^j\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R}')^{-1}]^j\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.5)$$

com

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_{j+1} \mathbf{1} \end{pmatrix}, & \mathbf{T}' &= \begin{pmatrix} \mathbf{t}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_{j+1} \mathbf{1} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T} &= \begin{pmatrix} \mathbf{t} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_{j+1} \mathbf{1}' \end{pmatrix}, & \mathbf{R}' &= \begin{pmatrix} \mathbf{r}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_{j+1} \mathbf{1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Assim, conseguimos a matriz efetiva da cadeia, com a qual calculamos os quatro primeiros CTC's seguindo a eq. (4.4). Análogo ao que fizemos para um único ponto quântico [sec. 4.1], depois de n_{rel} realizações deste procedimento obtemos médias, variâncias e distribuições de probabilidade dos quatro CTC's.

6.1.2 Estatística de contagem de carga

Para não ampliar incontrolavelmente a quantidade de parâmetros do sistema, vamos nos restringir a mostrar resultados para guias com mesmo número de canais N e com barreiras de mesma transparência Γ .

Existem resultados analíticos da estatística de contagem de carga no limite semiclássico, calculados recentemente através da teoria de circuitos [33]. Dentre tais resultados, os termos principais dos quatro primeiros CTC's são

$$\begin{aligned}
 g/N &= \frac{\Gamma}{L+1}, \\
 p/N &= \frac{1}{(L+1)^3} \left[\frac{(L+1)^2 + 2}{3} \Gamma - \Gamma^2 \right], \\
 q_3/N &= \frac{1}{(L+1)^5} \left\{ \frac{(L+1)^4 + 10(L+1)^2 + 4}{15} \Gamma - [(L+1)^2 + 2] \Gamma^2 + 2\Gamma^3 \right\}, \\
 q_4/N &= \frac{1}{(L+1)^7} \left\{ -\frac{(L+1)^6 - 42(L+1)^4 - 56(L+1)^2 - 8}{105} \Gamma - \right. \\
 &\quad \left. \frac{3(L+1)^4 + 20(L+1)^2 + 12}{5} \Gamma^2 + 4[(L+1)^2 + 2] \Gamma^3 - 6\Gamma^4 \right\}. \quad (6.7)
 \end{aligned}$$

É importante lembrar que o termo principal da condutância é justamente o resultado da lei de Ohm clássica, pois a resistência resultante do acoplamento em série de $L+1$ conectores clássicos de resistência $1/(N\Gamma)$ é $(L+1)/(N\Gamma)$ que é o inverso da condutância. Além disso, percebe-se na eq. (6.7) que a dependência do m -ésimo cumulante em relação a Γ é um polinômio de grau m com o termo independente nulo.

Visando comparar os resultados da simulação com a eq. (6.7), obtemos as médias dos cumulantes para $\beta = 2$, com $\langle g \rangle \gg 1$. Sendo assim, considere as seguintes expressões polinomiais de Γ para os CTC's:

$$\begin{aligned}
 \langle g \rangle / N &\equiv \lambda \Gamma, \\
 \langle p \rangle / N &\equiv \zeta_1 \Gamma + \zeta_2 \Gamma^2, \\
 \langle q_3 \rangle / N &\equiv \xi_1 \Gamma + \xi_2 \Gamma^2 + \xi_3 \Gamma^3, \\
 \langle q_4 \rangle / N &\equiv \kappa_1 \Gamma + \kappa_2 \Gamma^2 + \kappa_3 \Gamma^3 + \kappa_4 \Gamma^4. \quad (6.8)
 \end{aligned}$$

Através de resultados com $N = 20, \dots, 50$ e $\Gamma = 0,7; \dots; 1$, estimamos cada um desses coeficientes através de ajustes polinomiais de curvas (mínimos quadrados). Os resultados estão expostos na fig. 6.2, mostrando uma ótima concordância com os resultados exatos.

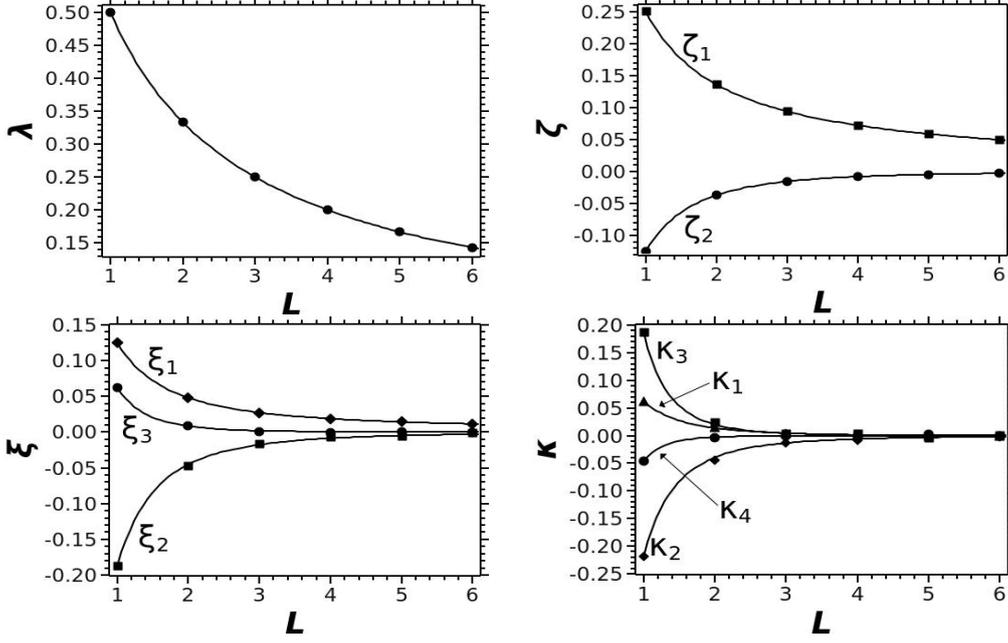


Figura 6.2 Coeficientes dos termos principais dos quatro primeiros CTC's baseados na eq. (6.8). Os pontos foram estimados através de ajustes polinomiais de curvas usando os resultados da simulação com $\Gamma = 0, 7; \dots; 1$ e $N = 20, \dots, 50$. As linhas são guias de olhos para resultados exatos [eq. (6.7)] obtidos via teoria de circuitos [33].

É interessante notar como os coeficientes das potências pares de Γ são negativos, enquanto os dos termos ímpares são positivos e todos tendem a se anular à medida que o número de pontos da cadeia aumenta.

A teoria de circuitos também fornece expressões para a correção devido à localização fraca dos CTC's no limite semiclássico. Para a condutância e para a potência do ruído de disparo, os resultados são [33]

$$\begin{aligned}
 g_{LF} &= \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{L}{(L+1)^2} \left(\frac{L-1}{3} + \Gamma\right), \\
 p_{LF} &= \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{L[(L+1)^2 - 4]}{3(L+1)^4} \left(\frac{L-13}{15} + \Gamma\right).
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

Visando comparar os resultados da nossa simulação com a eq. (6.9) consideramos, por simplicidade, apenas $\beta = 1$. Assim, obtemos médias dos cumulantes com $\beta = 1$ e subtraímos dos resultados já obtidos para $\beta = 2$, conseguindo a diferença

$$\delta q_m \equiv \langle q_m \rangle_{\beta=1} - \langle q_m \rangle_{\beta=2}, \tag{6.10}$$

para o m -ésimo cumulante ($g = q_1$ e $p = q_2$). Logicamente, δq_m depende de N e de Γ e a

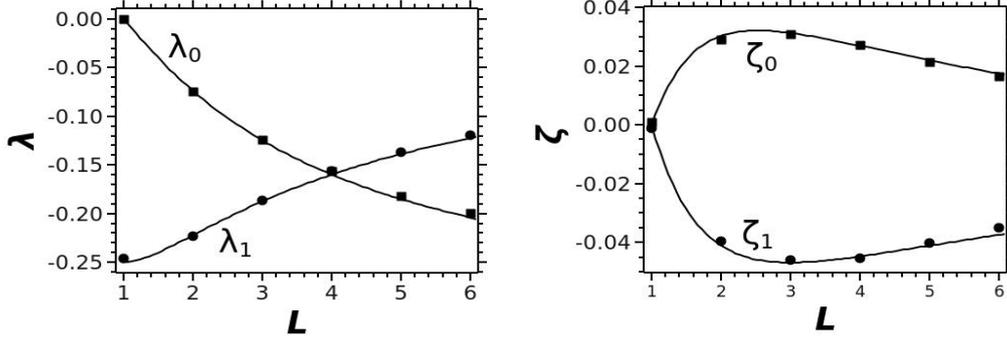


Figura 6.3 Coeficientes das correções de localização fraca para g e p baseados na eq. (6.11). Os pontos foram estimados através de métodos bayesianos (cap. 5) usando os resultados da simulação com $\Gamma = 0,7; \dots; 1$ e $N = 20, \dots, 50$. As linhas são guias de olhos para resultados exatos [eq. (6.9)] obtidos via teoria de circuitos [33].

LF é obtida com a extrapolação para um número infinito de canais $[q_m]_{LF} \equiv \delta q_m(N \rightarrow \infty)$. Como a LF é uma função linear em relação a Γ , através dos mesmos parâmetros usados para inferir os termos principais dos cumulantes ($N = 20, \dots, 50$ e $\Gamma = 0,7; \dots; 1$), fizemos uma regressão linear (mínimos quadrados) para achar os coeficientes das retas para cada valor fixo de N . Porém, os resultados destes coeficientes em função de N apresentam grande ruído numérico e o resultado para LF é obtido com $N \rightarrow \infty$. Para superar este problema, usamos a regressão linear bayesiana descrita no cap. 5 para extrapolar estes coeficientes no limite de $1/N \rightarrow 0$. Assim obtemos os coeficientes das seguintes retas

$$\begin{aligned} g_{LF} &\equiv \lambda_0 + \lambda_1 \Gamma, \\ p_{LF} &\equiv \zeta_0 + \zeta_1 \Gamma. \end{aligned} \quad (6.11)$$

A fig. 6.3 mostra como nossa inferência para localização fraca concorda muito bem com os resultados exatos obtidos via teoria de circuitos.

A variância da condutância no limite semiclássico também foi calculada recentemente através da teoria de circuitos [48]

$$\text{var}(g) = \frac{2}{\beta} \Gamma(\Gamma - 2) \frac{L}{(L + 1)^4} + \frac{2}{15\beta} \left[1 + \frac{15L - 1}{(L + 1)^4} \right]. \quad (6.12)$$

Porém, os resultados da nossa simulação apresentam ruídos numéricos da mesma natureza dos observados para as correções de localização fraca. Usando o método de regressão linear bayesiana de maneira análoga ao que foi feito para a LF, estimamos para $\beta = 1$,

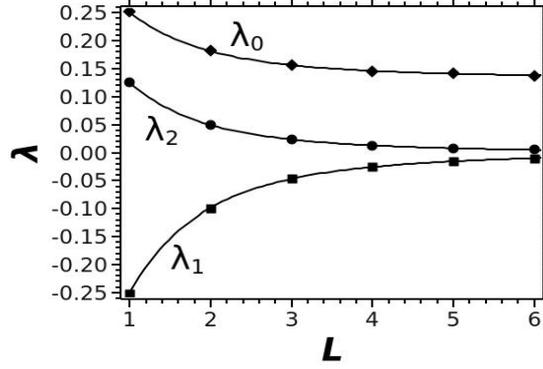


Figura 6.4 Coeficientes da variância da condutância baseados na eq. (6.13). Os pontos foram estimados através de métodos bayesianos (cap. 5) usando os resultados da simulação com $\Gamma = 0,7; \dots; 1$ e $N = 20, \dots, 50$. As linhas são guias de olhos para resultados exatos [eq. (6.12)] obtidos via teoria de circuitos [33].

os coeficientes da parábola

$$\text{var}(g) \equiv \lambda_0 + \lambda_1 \Gamma + \lambda_2 \Gamma^2. \quad (6.13)$$

Nossos resultados estão de acordo com a teoria de circuitos, como mostra a fig. 6.4. Como nos resultados dos termos principais dos CTC's, exibidos pela fig. 6.2, também percebemos para a variância de g que o sinal dos coeficientes são alternados com a ordem da potência de Γ , pois $\lambda_0 > 0$, $\lambda_1 < 0$ e $\lambda_2 > 0$.

A condição de validade das eqs. (6.7), (6.9) e (6.12) é que o transporte, para o observável de interesse, esteja no regime semiclássico. Como discutido na sec. 1.11, se $\langle g \rangle \gg 1$, então a condutância possui comportamento semiclássico e isso garante a validade dos seus valores estimados pelas eqs. (6.7), (6.9) e (6.12). Sendo assim, a validade da eq. (6.7) é estabelecida quando $N\Gamma(L+1)^{-1} \gg 1$. Os outros observáveis são mais sensíveis aos efeitos quânticos e, por isso, para que eles tenham comportamento semiclássico, o valor médio da condutância deve ser cada vez maior. É importante ter este cuidado, para evitar confusão na análise dos assintóticos $\Gamma \ll 1$ e/ou $L \gg 1$. Por exemplo, na fig. 6.2, o coeficiente $\lambda = (L+1)^{-1}$ tende a se anular à medida que o número de pontos aumenta. Porém, devemos ter em mente que isto não significa que a condutância se anula, pois este resultado é obtido mantendo $\langle g \rangle \approx N\Gamma(L+1)^{-1} \gg 1$. Com estas condições, vamos verificar pelas eqs. (6.7), (6.9) e (6.12) o assintótico $L \gg 1$, chamado de limite do fio quântico no regime semiclássico. Pela eq. (6.7), percebemos que os valores médios dos

CTC's tendem a

$$\begin{aligned}
\langle g \rangle &= \frac{\overbrace{N\Gamma}^{g_{\text{Ohm}}}}{L+1} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{1}{3}, \\
\langle p \rangle &= \frac{g_{\text{Ohm}}}{3} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{1}{45}, \\
\langle q_3 \rangle &= \frac{g_{\text{Ohm}}}{15} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \mathcal{O}(N^0), \\
\langle q_4 \rangle &= \frac{g_{\text{Ohm}}}{105} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \mathcal{O}(N^0).
\end{aligned} \tag{6.14}$$

Estes resultados estão de acordo com a ref. [63]. Por indução, percebemos que para um CTC de ordem geral

$$\langle q_m \rangle = \frac{g_{\text{Ohm}}}{(2m-1)!!} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \mathcal{O}(N^0). \tag{6.15}$$

Como a distribuição de transferência de carga é caracterizada por todos os CTC's, a eq. (6.15) nos informa que a distribuição é, em média, caracterizada apenas pelo seu primeiro cumulante, que é a condutância segundo a lei de Ohm, pois todos os outros são múltiplos deste e, quanto maior a ordem do CTC, menores eles são, devido ao fator duplo fatorial no denominador. Porém, apesar da lei de Ohm caracterizar a distribuição de carga, ainda temos efeitos quânticos relacionados à coerência temporal, como por exemplo, a potência do ruído de disparo, que em média é aproximadamente um terço da condutância, mostrando uma supressão do fator Fano, definido como $F = \langle p \rangle / \langle g \rangle$, cujo valor $F = 1$ sugere uma distribuição de carga poissoniana, a qual representa transmissão não correlacionada de carga¹. Outras características quânticas são a existência da correção de LF e a flutuação universal da condutância [ver eq. (6.12)]

$$\text{var}(g) = \frac{2}{15\beta}. \tag{6.16}$$

A eq. (6.16), também está de acordo com a ref. [63].

Até agora estudamos o regime semiclássico do transporte quântico em cadeias. Vamos passar a investigar a estatística dos CTC's para cadeias em regimes arbitrários de transporte.

Na fig. 6.5, vemos distribuições para $N = 8$ e contatos ideais. Vamos analisar

¹Para que em média uma distribuição de carga seja poissoniana, todos os cumulantes devem ser iguais à média, ou seja, $\langle q_m \rangle = \langle g \rangle$.

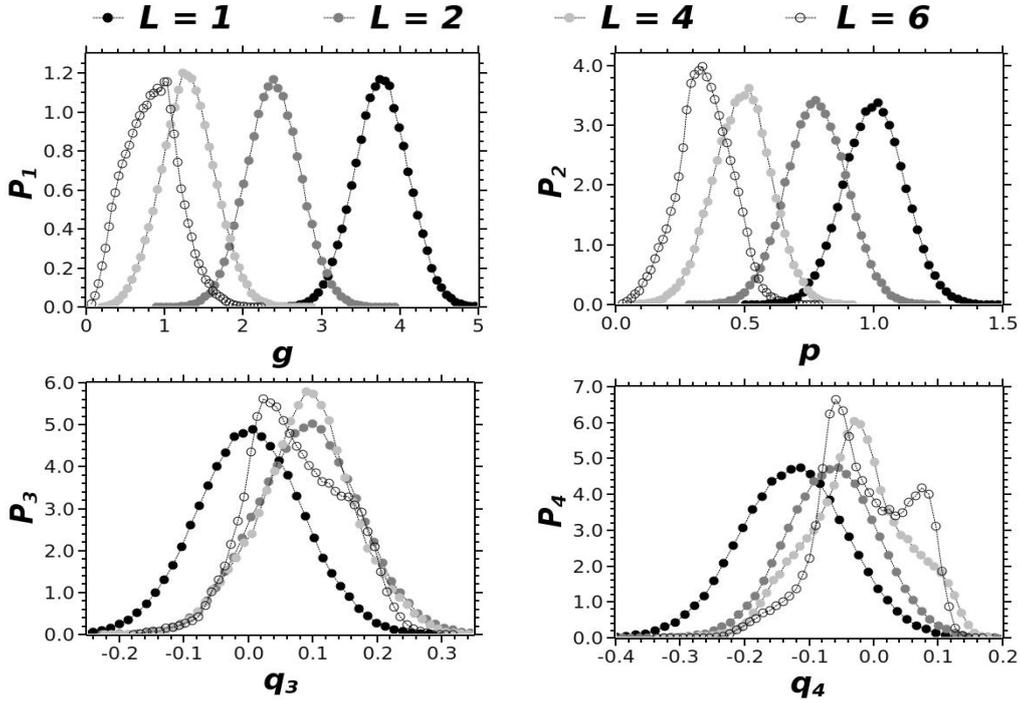


Figura 6.5 Distribuições dos quatro primeiros CTC's para uma cadeia com guias de oito canais, contatos ideais e cavidades com $\beta = 1$, para $L = 1, 2, 4$ e 6 . As linhas são apenas guias de olhos.

em detalhes as distribuições de condutância. Inicialmente fizemos um ajuste de curva gaussiano (mínimos quadrados) da distribuição de condutância para $L = 1$ e obtivemos média 3,765 e variância 0,118. Por outro lado, a simulação fornece $\langle g \rangle = 3,766$, $\text{var}(g) = 0,118$ e $\gamma_1(g) = 4,574 \times 10^{-3}$, onde vemos que a média e a variância são muito próximos dos valores obtidos pelo ajuste de curva gaussiano, e que a obliquidade [eq. (4.11)] é muito pequena, indicando que a distribuição é muito próxima de uma gaussiana. Agora, vamos fazer uma investigação análoga para o caso $L = 2$. Com o ajuste de curva gaussiano, temos média e variância iguais a 2,387 e 0,121. Através da simulação, obtemos $\langle g \rangle = 2,387$, $\text{var}(g) = 0,122$ e $\gamma_1(g) = 9,732 \times 10^{-3}$, onde percebemos que, apesar da média e variância estarem muito próximas dos valores obtidos com o ajuste de curva gaussiano, há um crescimento considerável da obliquidade em relação ao caso $L = 1$, sugerindo que a distribuição está se afastando do comportamento gaussiano, devido ao aumento da sua assimetria. Este afastamento se confirma na análise do caso $L = 4$. O ajuste de curva gaussiano resulta em 1,295 de média e variância 0,117, enquanto a simulação produz $\langle g \rangle = 1,299$ e $\text{var}(g) = 0,117$ e $\gamma_1(g) = 6,81 \times 10^{-2}$, onde obliquidade tem um aumento considerável em relação aos casos anteriores. Para $L = 6$, visivelmente percebemos

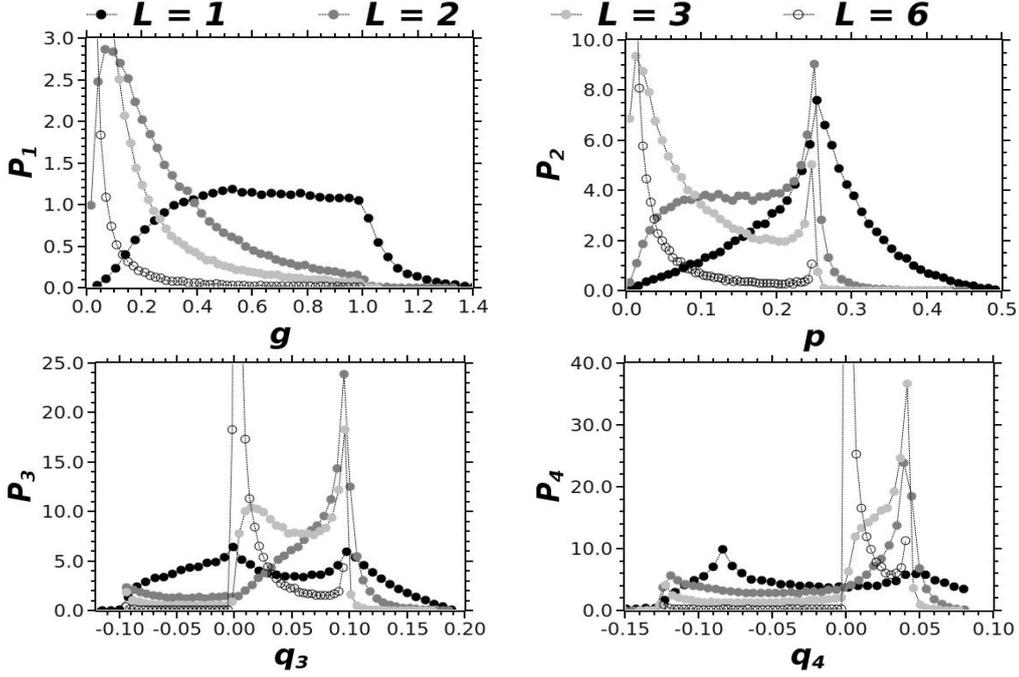


Figura 6.6 Distribuições dos quatro primeiros CTC's para uma cadeia com guias de dois canais, barreiras com $\Gamma = 0,7$ e cavidades com $\beta = 2$, para $L = 1, 2, 3$ e 6 . As linhas são apenas guias de olhos.

que a distribuição não é gaussiana e, aparentemente, é não-analítica² em $g = 1$. Estes comportamentos também estão presentes nas distribuições de p , q_3 e q_4 , indicando que ao aumentarmos o número de pontos da cadeia, mantendo N e Γ fixos, as distribuições se tornam mais irregulares e o transporte tende ao limite quântico extremo.

No caso de $N = 2$ e $\Gamma = 0,7$, ilustrado pela fig. 6.6, fica evidente a proximidade do limite quântico extremo devido ao nível de irregularidades das distribuições. Como visto na sec. 4.2, é pouco informativo analisarmos médias e variâncias neste regime, pois vemos nitidamente que nenhuma das distribuições aparenta ser aproximadamente gaussiana e, portanto, a caracterização de cada CTC deve ser dada por sua distribuição inteira.

Note também nas figs. 6.5 e 6.6, que com o aumento do número de pontos da cadeia as distribuições tendem a se aglomerar em valores dos CTC's próximos de zero. Isto ocorre pois o crescimento do número de pontos, mantendo o número de canais e as transparências das barreiras fixas, aumenta a desordem [64] e causa localização, $\langle g \rangle \ll 1$. Por sua vez, como a condutância é a soma dos autovalores de transmissão, isto implica que $\vec{\tau}$ se aproxima de $\vec{0}$ e, conseqüentemente, todos os CTC's também tendem a valores muito pequenos, pois pelas eqs. (1.45) e (1.46): $q_m = \sum_i f_m(\tau_i = 0) = 0$. Este fenômeno

²Detalhes sobre as não-analiticidades nas distribuições dos CTC's serão apresentados no cap. 7.

é análogo à localização do transporte eletrônico em um condutor causado pelo aumento da densidade de impurezas [65].

6.2 ANEL DE QUATRO PONTOS QUÂNTICOS

6.2.1 Implementação numérica

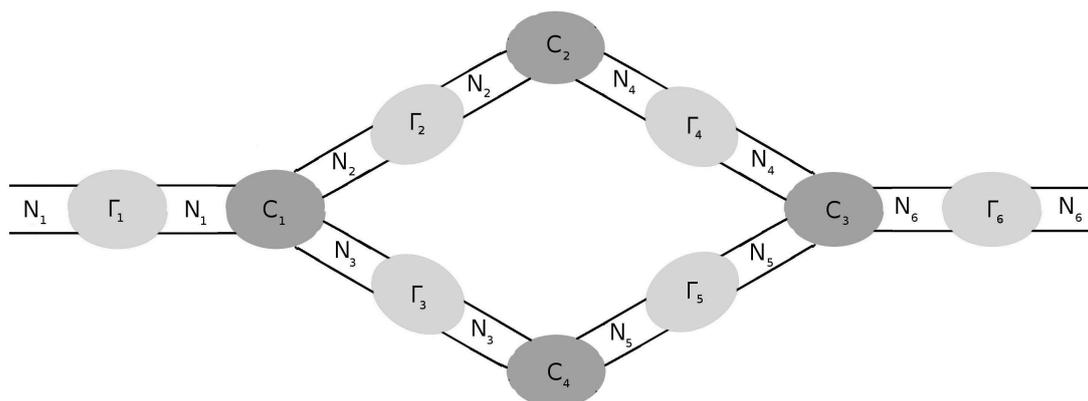


Figura 6.7 Diagrama de centros de espalhamento para um A4PQ. As barreiras são representadas por suas transparências Γ_i , com $i = 1, 2, \dots, 6$. As cavidades caóticas são C_j , com $j = 1, 2, \dots, 4$.

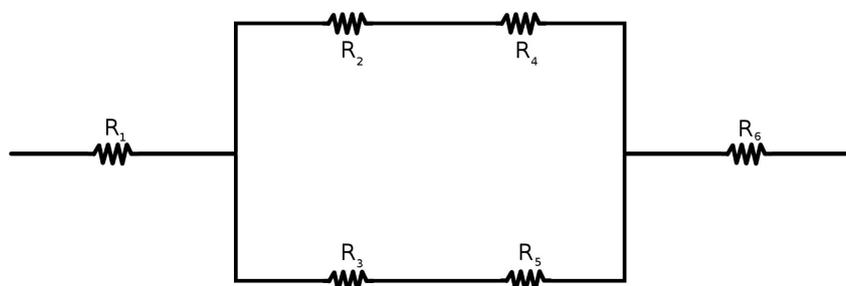


Figura 6.8 Circuito clássico equivalente ao A4PQ, o qual está representado na fig. 6.7. As resistências são $R_j = (\Gamma_j N_j)^{-1}$, pois são o inverso da condutância de cada contato do sistema original.

Chamamos de anel de quatro pontos quânticos (A4PQ) o sistema ilustrado na fig. 6.7. Uma das novidades neste sistema é que as cavidades 1 e 3 possuem, cada uma delas, 3 contatos. Como se pode ver na fig. 6.8, isto é análogo a um nó em um circuito clássico, onde a corrente elétrica se divide em duas mantendo a soma constante (conservação de corrente). Como visto na sec. 3.2, nos inspiramos nesta analogia para acharmos a matriz de espalhamento efetiva do sistema.

Os dados de entrada para simulação deste sistema são os seguintes parâmetros:

- Transparência das barreiras: Γ_j , com $j = 1, \dots, 6$;
- Número de canais de espalhamento abertos em cada um dos guias: N_j , com $j = 1, \dots, 6$;
- Índice de simetria das cavidades: β ;
- Número de realizações numéricas: n_{rel} .

As matrizes das barreiras são determinísticas

$$\mathbf{S}_j = \begin{pmatrix} r_j \mathbf{1} & t_j \mathbf{1} \\ t_j \mathbf{1} & r_j \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (6.17)$$

onde $t_j = \sqrt{\Gamma_j}$ e $r_j = i\sqrt{1 - \Gamma_j}$, com $j = 1, \dots, 6$. As matrizes de espalhamento das cavidades, ${}^j\mathbf{S}_{\text{cav}}$, com $j = 1, \dots, 4$, são membros do ensemble circular e, por isso, em cada realização numérica, devem ser geradas aleatória e independentemente seguindo o algoritmo descrito na sec. 2.3.3.

Iniciamos com a concatenação em série das barreiras 2 e 4 com a cavidade 2

$$\mathbf{S}_A \equiv \mathbf{R} + \mathbf{T}[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R})^{-1}]^2 {}^2\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.18)$$

onde \mathbf{S}_A é a matriz de espalhamento efetiva desta primeira concatenação e

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_2 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_4 \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_2 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_4 \mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

Em seguida concatenamos da mesma forma as barreiras 3 e 5 com a cavidade 4, onde analogamente temos

$$\mathbf{S}_B \equiv \mathbf{R} + \mathbf{T}[(\mathbf{1} - {}^4\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R})^{-1}]^4 {}^4\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.19)$$

onde \mathbf{S}_B é a matriz de espalhamento efetiva desta segunda concatenação e

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_3 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_5 \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_3 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_5 \mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

Agora, vamos concatenar em paralelo os centros efetivos A e B através da operação definida pela eq. (3.8)

$$\mathbf{S}_C \equiv \mathbf{S}_A \otimes \mathbf{S}_B. \quad (6.20)$$

Com isso, obtemos o equivalente a uma cadeia com cinco centros espalhadores em série compostos pelas seguintes matrizes de espalhamento, da esquerda para a direita: \mathbf{S}_1 , ${}^1\mathbf{S}_{\text{cav}}$, \mathbf{S}_C , ${}^3\mathbf{S}_{\text{cav}}$ e \mathbf{S}_1 . Análogo ao algoritmo para a cadeia descrito na sec. 6.1.1, concatenamos em série os três primeiros centros espalhadores

$$\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{R} + \mathbf{T}'[(\mathbf{1} - {}^1\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R}')^{-1}]{}^1\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.21)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} r_1\mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r'_C \end{pmatrix}, & \mathbf{T}' &= \begin{pmatrix} t_1\mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_C \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T} &= \begin{pmatrix} t_1\mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t'_C \end{pmatrix}, & \mathbf{R}' &= \begin{pmatrix} r_1\mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_C \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.22)$$

e \mathbf{S} é a matriz de espalhamento efetiva da concatenação da barreira 1, cavidade 1 e do centro efetivo C. Finalmente, obtemos a matriz efetiva do A4PQ concatenando em série \mathbf{S} com as matrizes de espalhamento da cavidade 4 e a barreira 6

$$\mathbf{S} \leftarrow \mathbf{R} + \mathbf{T}'[(\mathbf{1} - {}^4\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{R}')^{-1}]{}^4\mathbf{S}_{\text{cav}}\mathbf{T}, \quad (6.23)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_6\mathbf{1} \end{pmatrix}, & \mathbf{T}' &= \begin{pmatrix} \mathbf{t}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_6\mathbf{1} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T} &= \begin{pmatrix} \mathbf{t} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & t_6\mathbf{1} \end{pmatrix}, & \mathbf{R}' &= \begin{pmatrix} \mathbf{r}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & r_6\mathbf{1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

e \mathbf{r} , \mathbf{r}' , \mathbf{t} e \mathbf{t}' são os blocos de \mathbf{S} .

Com esta matriz de espalhamento efetiva a qual calculamos os quatro primeiros CTC's seguindo a eq. (4.4) e depois de n_{rel} realizações deste procedimento obtemos médias, variâncias e distribuições de probabilidade dos quatro CTC's.

6.2.2 Estatística de contagem de carga

Por simplicidade, vamos particularizar nossos resultados para o caso de todos os guias com mesmo número de canais abertos N e contatos de mesma transparência Γ .

No regime semiclássico, o termo principal e a correção de localização fraca da con-

duância foram calculados recentemente através de técnicas diagramáticas usando uma parametrização de estube diferente da que mostramos nesta tese [32]

$$\langle g \rangle = \frac{N\Gamma}{3} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{(1 + 2\Gamma)}{9}. \quad (6.25)$$

Visando comparar este resultado com nossa simulação, fizemos uma inferência análoga à que usamos para a cadeia de pontos quânticos e obtivemos o seguinte resultado para $\beta = 1$

$$\langle g \rangle = (0,3334 \pm 0,0003)N\Gamma - [(0,110 \pm 0,004) + (0,224 \pm 0,007)\Gamma], \quad (6.26)$$

Perceba que há um excelente nível de concordância com o resultado analítico. Por outro lado, observe que o erro para correção devido à localização fraca é consideravelmente maior comparado ao erro para o termo principal. Isto é consequência do ruído numérico presente no cálculo da correção de LF. Por isso, optamos pelo método de regressão linear bayesiana para estimar g_{LF} (cap. 5). O termo principal não é tão ruidoso e, consequentemente, a regressão linear tradicional, baseada em mínimos quadrados, foi suficiente para estimá-lo.

O termo principal da eq. (6.25) também pode ser obtido analiticamente através da resistência resultante do circuito clássico equivalente ao A4PQ, ilustrado na fig. 6.8. Perceba que se todas as resistências são iguais a $R = (N\Gamma)^{-1}$, usando as regras clássicas de acoplamento de resistências em série e em paralelo, resultantes da lei de Ohm e da conservação de corrente (lei de Kirchhoff), obtemos $3R$ como resistência resultante e, portanto, a condutância do sistema é o inverso da resistência: $g = (3R)^{-1} = N\Gamma/3$. Por isso, consideramos que o termo principal da eq. (6.25) é equivalente à lei de Ohm, a qual se baseia em física clássica, e como visto na sec. 1.9, o segundo termo da eq. (6.25) representa a localização fraca, a qual é uma correção do valor clássico devido a efeitos de interferências, os quais são apenas justificados por argumentos quânticos. A analogia a circuitos clássicos se estende a todos os sistemas físicos apresentados até aqui ou a qualquer topologia de rede de pontos quânticos, conectada a reservatórios compostos de metais normais³: o termo principal da condutância é a lei de Ohm.

Vamos observar também as distribuições dos CTC's em condições arbitrárias. Na fig. 6.9 temos as distribuições dos quatro primeiros CTC's para contatos ideais e $\beta = 2$. Perceba que as distribuições de condutância para $N = 6$ e 4 são semelhantes a gaussianas

³Outros efeitos surgem quando os reservatórios são ferromagnéticos e/ou supercondutores. Em muitos destes casos, o termo principal da condutância não pode ser justificado classicamente.

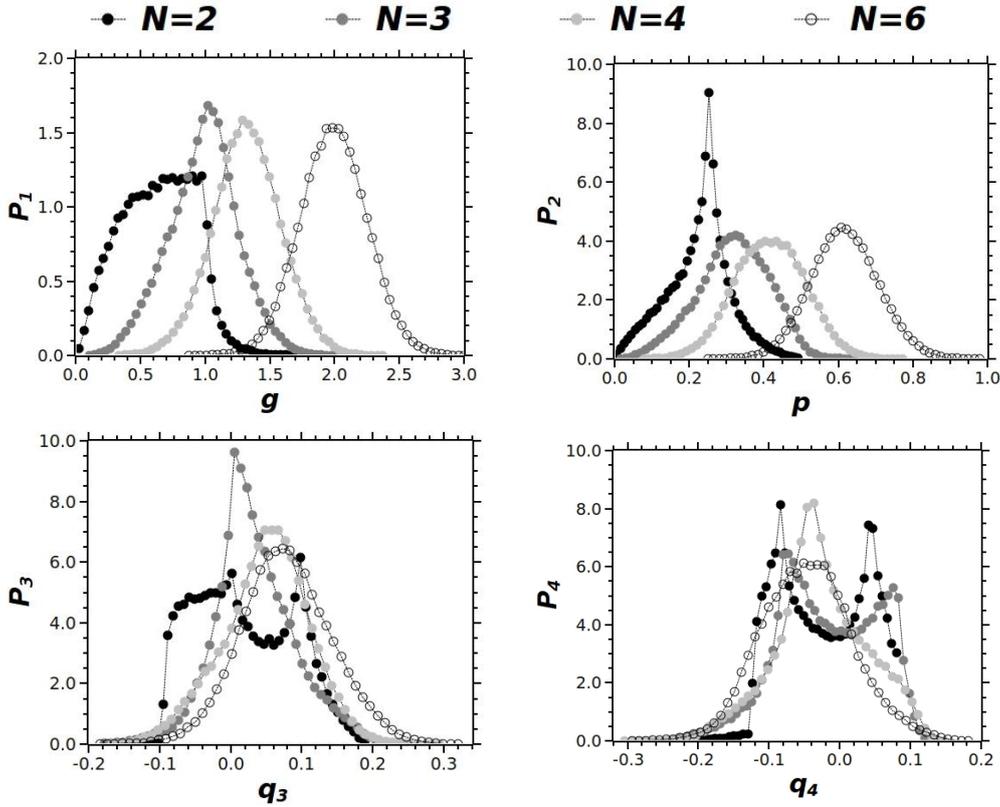


Figura 6.9 Distribuições dos quatro primeiros CTC's para um A4PQ com guias de N canais, contatos ideais e cavidades com $\beta = 2$. As linhas são apenas guias de olhos.

e os valores de condutância dos seus centros, apresentam proximidade com o esperado pela lei de Ohm ($N/3$), ratificando características semiclássicas. Como esperado, note que estas características gaussianas diminuem para CTC's de ordem superior, pois eles são mais sensíveis às flutuações dos autovalores de transmissão e precisam de um valor de N cada vez maior, para que suas distribuições tendam a se aproximar de gaussianas e, com isso, passem a adquirir comportamentos semiclássicos. Além disso, notamos que as distribuições são mais irregulares para valores menores de N . Isto é esperado, pois quanto menor N , menor a condutância e quando $\langle g \rangle$ atinge valores da ordem de 1, as distribuições apresentam irregularidades, as quais enfatizam o limite quântico extremo.

Variando valores da transparência com $N = 9$ e $\beta = 1$, notamos pela fig. 6.10 que quanto maior Γ , mais as distribuições se assemelham a gaussianas. As distribuições de condutância para $\Gamma = 1$ e $\Gamma = 0,6$ se assemelham a gaussianas com centros próximos do esperado para o regime semiclássico [eq. (6.25)]. Como discutido na figura anterior, aqui também percebemos que quanto maior a ordem do CTC, mais irregulares são as distribuições. Além disso, observe que as irregularidades se destacam para valores menores

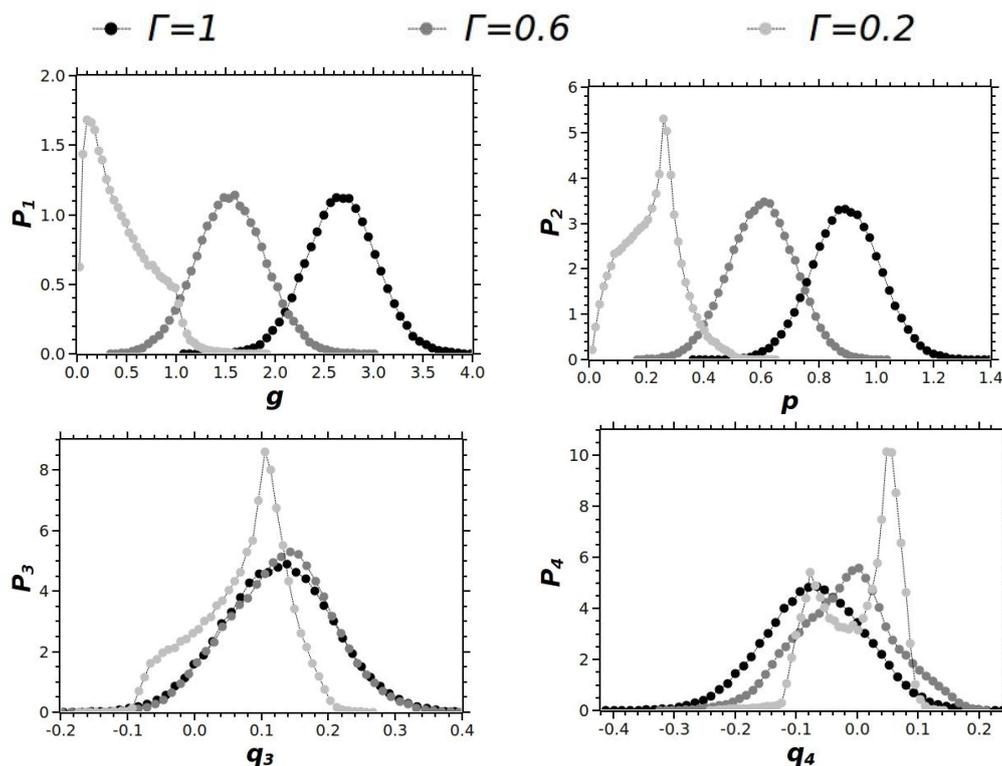


Figura 6.10 Distribuições dos quatro primeiros CTC's para um A4PQ com guias de nove canais, contatos de transparência Γ e cavidades com $\beta = 1$. As linhas são apenas guias de olhos.

de Γ . Na figura anterior vimos este efeito com a redução de N . Na verdade, estes comportamentos indicam que quando os parâmetros N , Γ e β são tais que $\langle g \rangle \sim 1$, o limite quântico extremo se manifesta e, com isso, as distribuições apresentam irregularidades.

6.3 SEMELHANÇAS ENTRE DISTRIBUIÇÕES DE CONDUTÂNCIA

Assim como observamos, para o caso de um único ponto quântico, semelhanças entre as distribuições de condutância com diferentes parâmetros do sistema (sec. 4.3), também constatamos este comportamento para sistemas de topologias diferentes, como a cadeia de pontos e o A4PQ.

A fig. 6.11 mostra alguns exemplos destas semelhanças. Em (a) temos resultados de P_1 para uma cadeia com $L = 1$ (ponto simples) e 2 (dois pontos em série) variando N (número de canais em cada um dos guias) e Γ (contatos de mesma transparência) para tornar as distribuições mais próximas o possível do caso $L = 2$ com (3;1). Os resultados

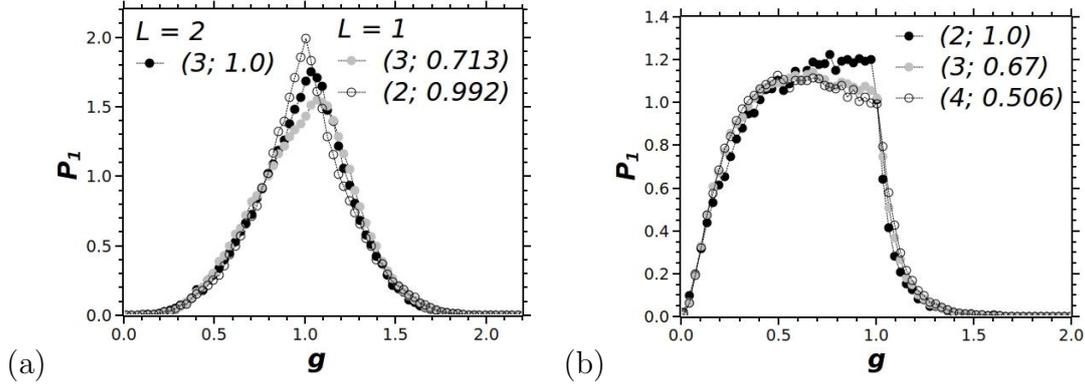


Figura 6.11 Distribuições de condutância para uma cadeia de L pontos (a) e para um A4PQ (b). Em todos os sistemas os guias e os contatos são iguais e $\beta = 2$ para todas as cavidades caóticas. Cada distribuição está caracterizada pelo parâmetro $(N; \Gamma)$. Perceba a semelhança entre as distribuições de sistemas com diferentes $(N; \Gamma)$. Os valores das transparências não-ideais ($\Gamma \neq 1$) foram estimados através da minimização da diferença entre as distribuições, a qual foi quantificada pela entropia relativa [eq. (4.20)]. As linhas são apenas guias de olhos.

sugerem a seguinte lei de escala aproximada

$$P_1 \simeq P'_1 \Big|_{\Gamma' = (N\Gamma/N')(L'+1)/(L+1)}, \quad (6.27)$$

a qual também lembra a lei de Ohm para cadeia $\langle g \rangle = N\Gamma/(L+1)$ [eq. (6.7)]. Para o A4PQ com guias de N canais e barreiras de transparência Γ , temos resultados ilustrados em (b), os quais sugerem novamente a mesma lei de escala aproximada da eq. (4.22)

$$P_1 \simeq P'_1 \Big|_{\Gamma' = N\Gamma/N'}, \quad (6.28)$$

onde novamente podemos recordar a lei de Ohm para este sistema $\langle g \rangle = N\Gamma/3$. Além disso, os resultados sugerem que a aproximação desta lei de escala para o A4PQ é maior em comparação ao ponto quântico simples e à cadeia de pontos.

6.4 SUMÁRIO

Vimos neste capítulo a implementação dos algoritmos descritos no cap. 3 para duas redes de pontos quânticos de diferentes topologias: uma cadeia de pontos e um anel de quatro pontos.

Apresentamos a estatística de contagem de carga no regime semiclássico, onde comparamos nossos resultados com os obtidos por métodos analíticos [33, 32], obtendo termos principais, correções devido à localização fraca e variância dos CTC's. Além disso, ana-

lisamos as distribuições.

Analisamos as distribuições dos quatro primeiros CTC's em regimes arbitrários de transporte. Notamos, que as semelhanças entre distribuições de condutâncias com diferentes parâmetros, que vimos no cap. 4 para um único ponto quântico, também se manifestam nos dois sistemas estudados neste capítulo, sugerindo uma aproximada lei de escala clássica (lei de Ohm) que torna as distribuições as mais próximas possíveis. Além disso, assim como vimos para um ponto quântico no cap. 4, as distribuições dos CTC's no limite quântico extremo são bastante irregulares e geralmente apresentam não-analiticidades. Sendo assim, estas não-analiticidades não devem depender do sistema físico no limite quântico extremo e serão estudadas de forma detalhada e geral no próximo capítulo.

NÃO-ANALITICIDADES NAS DISTRIBUIÇÕES DOS CUMULANTES DE TRANSFERÊNCIA DE CARGA

A presença de não-analiticidades em distribuições de CTC's já foram percebidas na literatura anteriormente [21, 23, 66, 67, 68, 69]. Também notamos em nossos resultados que as não-analiticidades das distribuições de CTC's estão presentes em todos os sistemas que estudamos: um único ponto quântico, cadeia de pontos quânticos e o A4PQ. A ref. [23] justifica estas irregularidades nas distribuições de g e p através de um argumento geométrico, o qual generalizamos para qualquer CTC [30] e iremos apresentá-lo aqui. Mais detalhes sobre esta generalização estão presentes na ref. [32].

7.1 UM ÚNICO CANAL DE ESPALHAMENTO ABERTO

Vimos na sec. 4.2, para o caso de apenas um canal de espalhamento, que as distribuições dos CTC's podem ser dadas em termos da distribuição do único autovalor de transmissão do sistema, como mostra a eq. (4.12). Usando nesta equação as propriedades da delta [eq. (4.16)], obtemos

$$P_m(q) = \sum_{j=1}^k \frac{\rho(\tau_j^*)}{|f'_m(\tau_j^*)|} \Theta(\tau_j^*) \Theta(1 - \tau_j^*), \quad (7.1)$$

onde $\{\tau_j^*\}_{j=1}^k$ são as k raízes da equação $f_m(\tau) - q = 0$. Assim, percebemos três fontes de possíveis não-analiticidades em P_m . A primeira delas é quando algum τ_j^* é raiz de $f'_m(\tau)$ e $\rho(\tau_j^*) \neq 0$. A segunda fonte é a função degrau que limita os autovalores entre 0 e 1. A terceira está embutida em $\rho(\tau)$, pois esta pode apresentar irregularidades a depender do sistema físico. Para exemplificar melhor, considere a distribuição da potência de ruído de disparo [eq. (4.17)]

$$P_2(p) = \frac{\Theta(p)\Theta(1/4 - p)}{\sqrt{1 - 4p}} \{\rho[\tau_+(p)] + \rho[\tau_-(p)]\}, \quad (7.2)$$

com $\tau_{\pm}(p) = (1 \pm \sqrt{1 - 4p})/2$. Na fig. 7.1, temos a distribuição do autovalor de transmissão que produz as distribuições dos CTC's na fig. 4.4. Para $p = 1/4$, $\tau_+ = \tau_- = 1/2$ e, para estes valores, vemos que $\rho(1/2) \neq 0$ para todos os valores de β . Além disso, o denominador da eq. (7.2) é nulo em $p = 1/4$ e, conseqüentemente, P_2 diverge neste valor, como visto na fig. 4.4. Temos outra possível fonte de não-analiticidades, devido à limitação imposta pelas funções Θ , ou seja, $0 \leq p \leq 1/4$. Como já analisamos o limitante superior ($p = 1/4$), nos resta analisar as distribuições em $p = 0$. Neste ponto, temos

$$\begin{aligned} P_2(0^-) &= 0, \\ P_2(0^+) &= \rho(1) + \rho(0). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Note na fig. 7.1, que para $\beta = 1, 2$ e 4 , respectivamente, temos os seguintes valores aproximados: $\rho(0) = \infty, 4, 0$ e $\rho(1) = 0,2; 0,3$ e $0,45$. Com isso, em $p = 0^+$, $P_2 \neq 0$ e para $p = 0^-$, $P_2 = 0$, o que representa uma descontinuidade. Desta mesma forma, notamos outra descontinuidade, pois em $p = \frac{1}{4}^+$ a distribuição é nula e diverge para $p = \frac{1}{4}^-$. Estas descontinuidades, aparecem como consequência da limitação de p impostas pela função Θ . Porém, perceba que o fato de $P_2(0)$ divergir para $\beta = 1$ é consequência de $\rho(0) \rightarrow \infty$, o que não acontece para $\beta = 2$ e 4 . Sendo assim, vemos que quando as irregularidades são consequências explícitas da eq. (7.2) (denominador nulo e as limitações devido à função degrau), elas se manifestam nos três valores de β . Por outro lado, quando as distribuições herdam irregularidades de ρ , estas são consequências de características físicas, pois ρ carrega toda a informação da estatística de transporte do sistema: simetrias (que inclui os valores de β), transparências das barreiras, número de canais em cada guia, topologias, etc. Inspirados neste fato, decidimos analisar as não-analiticidades nas distribuições dos CTC's para um sistema físico geral, visando separar as causas físicas (herdadas de ρ) das outras possíveis.

7.2 DISTRIBUIÇÃO GEOMÉTRICA

Para iniciarmos uma análise mais abrangente, considere a fórmula geral para a distribuição do m -ésimo CTC

$$P_m(q) = \int_C d\vec{\tau} \rho(\vec{\tau}) \delta \left[q - \sum_{j=1}^n f_m(\tau_j) \right], \quad (7.4)$$

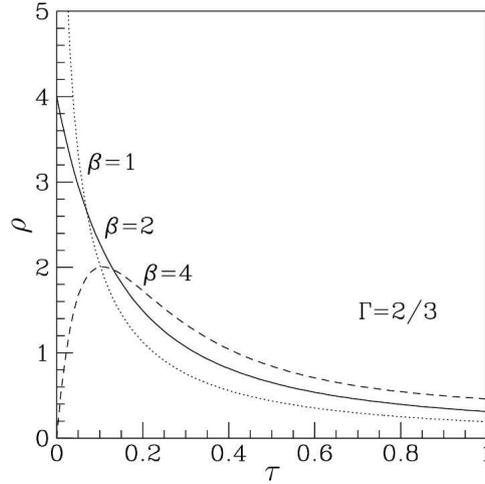


Figura 7.1 Distribuições do autovalor de transmissão de um ponto quântico com apenas um canal de espalhamento aberto em cada guia e contatos de transparência $2/3$, para as três classes de simetria de Wigner-Dyson. Figura retirada da ref. [51].

onde $\vec{\tau} \equiv \{\tau_i\}_{i=1}^n$, $\rho(\vec{\tau})$ é a distribuição conjunta dos autovalores de transmissão, C denota o hipercubo de aresta 1 e dimensão n . O valor de n é a quantidade de autovalores de transmissão não-nulos [1]. Por exemplo, para um ponto quântico simples (fig. 4.1), $n = \min(N_1, N_2)$; para uma cadeia de L pontos (fig. 6.1), $n = \min(N_1, \dots, N_{L+1})$ e para A4PQ (fig. 6.7), $n = \min(N_1, N_2 + N_3, N_5 + N_4, N_6)$. O integrando da eq. (7.4) possui dois fatores que carregam diferentes informações do sistema. A distribuição conjunta ρ contém a estatística completa dos autovalores de transmissão e, portanto, carrega toda informação física do sistema, bem como as simetrias da cavidade, a topologia da rede, as transparências das barreiras, etc. No entanto, a função δ , exceto pelo valor de n , não contém nenhuma informação física do sistema e é uma consequência da eq. (1.46). Considerando o argumento da função δ ,

$$q = \sum_{j=1}^n f_m(\tau_j), \quad (7.5)$$

teremos do ponto de vista geométrico uma hipersuperfície em \mathbb{R}^{n+1} no espaço $\{q; \vec{\tau}\}$ que denotaremos por \mathcal{HS}_n^m . Porém, se deixarmos q fixo, teremos a curva de nível da hipersuperfície \mathcal{HS}_n^m , a qual denotaremos por \mathcal{CN}_n^m . Note que \mathcal{CN}_n^m é uma hipersuperfície em \mathbb{R}^n no espaço $\vec{\tau}$. Para o caso particular de $n = 2$, vemos na fig. 7.2 as ilustrações destas superfícies para $m = 3$ e 4. Por exemplo, para τ_1 e τ_2 próximos de 0,5, \mathcal{CN}_2^4 é aproximadamente uma elipse, correspondendo ao centro da curva de nível à direita de (b).

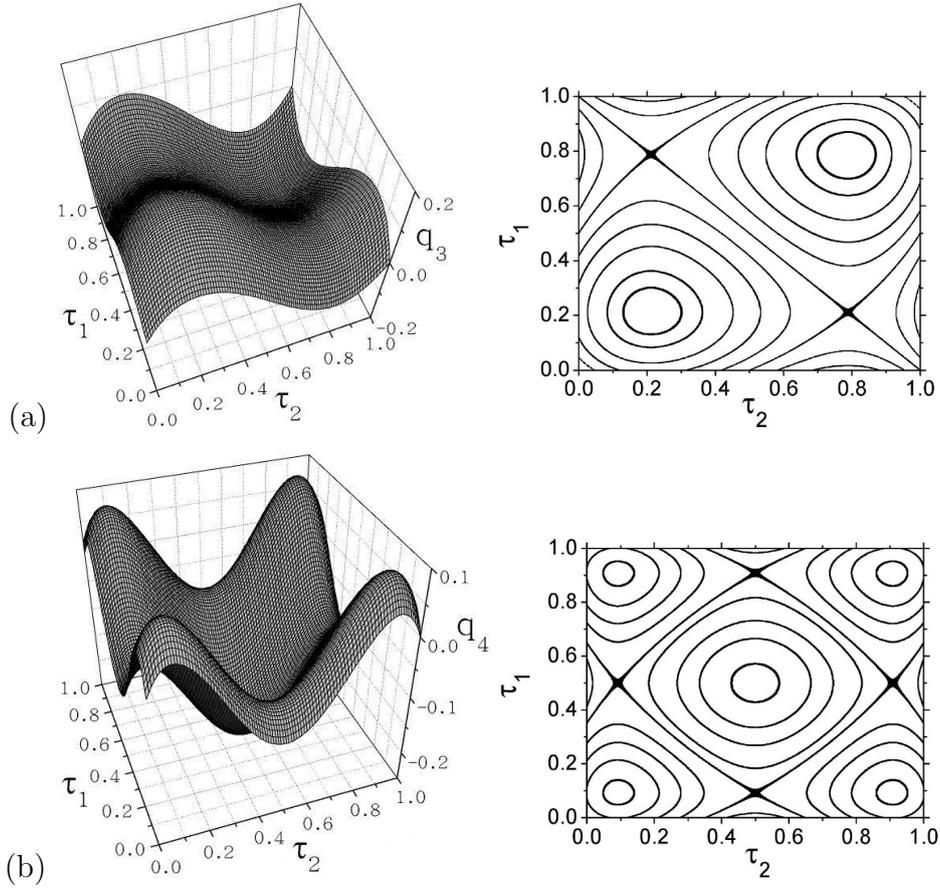


Figura 7.2 Terceiro (a) e quarto (b) CTC's em função dos dois autovalores de transmissão para $n = 2$. À esquerda, temos as curvas em 3D mostrando a forma explícita das superfícies \mathcal{HS}_2^3 (a) e \mathcal{HS}_2^4 (b). À direita temos as curvas de nível \mathcal{CN}_2^3 (a) e \mathcal{CN}_2^4 (b).

Vamos agora introduzir uma distribuição que elimina a informação física inserida em ρ , contendo apenas a função δ e, por isso, chamar-lhe-emos de “distribuição geométrica”

$$P_m^G(q) \equiv \left| \frac{dV_G}{dq} \right| = \left| \frac{d}{dq} \int_C d\vec{r} \Theta \left[q - \sum_{j=1}^n f_m(\tau_j) \right] \right|, \quad (7.6)$$

onde V_G é o volume limitado por \mathcal{CN}_n^m . Vamos analisar como $P_m^G(q)$ pode apresentar irregularidades. A expressão de V_G muda sua forma quando \mathcal{CN}_n^m toca algum dos vértices do hipercubo causando descontinuidades em $P_m^G(q) = |dV_G/dq|$. Para tocar nos vértices, todos os valores de τ_i precisam ser 0 ou 1. Porém, temos como consequência da eq. (1.45) que $f_m(0) = 0$ e $f_m(1) = \delta_{m,1}$. Por isso, nos vértices g é um inteiro no intervalo $[0, n]$ e $q_{m \neq 1} = 0$. Além disso, existem duas situações onde a derivada de $P_m^G(q)$ é descontínua. A primeira acontece quando \mathcal{CN}_n^m passa por um valor extremo (máximo ou mínimo) ou

por um ponto de sela¹. Isto acontece quando

$$\vec{\nabla}q = \sum_{i=1}^n \hat{\tau}_i f'_m(\tau_i) = 0 \Rightarrow f'_m(\tau_i) = 0, \quad (7.7)$$

onde $\hat{\tau}_i$ é o vetor unitário na direção τ_i e

$$\vec{\nabla} \equiv \sum_{i=1}^n \hat{\tau}_i \frac{\partial}{\partial \tau_i}$$

é definido no espaço $\vec{\tau}$. A segunda corresponde ao toque de \mathcal{CN}_n^m em fronteiras diferentes de vértices, como arestas por exemplo. Os outros elementos são tocados quando um ou mais $\tau_j = 0$ ou 1, e os outros $\tau_{i \neq j}$ são tais que o vetor normal da hipersuperfície \mathcal{CN}_n^m seja perpendicular a eles, ou seja, paralelo a $\hat{\tau}_j$. O vetor normal é proporcional ao gradiente de \mathcal{CN}_n^m e, portanto, esta condição é satisfeita com

$$\hat{\tau}_i \cdot \vec{\nabla} \sum_{k=1}^n \hat{\tau}_k f_m(\tau_k) = 0 \Rightarrow f'_m(\tau_i) = 0, \quad (7.8)$$

$$\hat{\tau}_{j \neq i} = 0 \text{ ou } 1.$$

Podemos condensar estas condições, considerando que $\mathcal{Z} \equiv \{\tilde{\tau}_k\}_{k=1}^l$ é o conjunto das l raízes de $f'_m(\tau)$ entre 0 e 1. Então, os valores de CTC's onde a distribuição geométrica é não-analítica são

$$\tilde{g} = \eta, \quad (7.9)$$

$$\tilde{q}_{m \neq 1} = \sum_{k=1}^l \eta_k f_m(\tilde{\tau}_k), \quad (7.10)$$

onde η e η_k são inteiros que satisfazem as relações $0 \leq \eta \leq n$ e $0 \leq \sum_{k=1}^l \eta_k \leq n$.

A eq. (7.9) já apresenta explicitamente os valores irregulares da condutância. Vamos agora aplicar a eq. (7.10) nos três próximos CTC's. Para o caso da potência do ruído de disparo, $p = q_2$, temos $f'_2(\tau) = 1 - 2\tau$ e, conseqüentemente, $\mathcal{Z} = \{1/2\}$ e $f_2(1/2) = 1/4$. Portanto, com a eq. (7.10), vemos que

$$\tilde{p} = \eta/4, \quad (7.11)$$

¹Esta singularidade é análoga às de Van Hove para a densidade de estados eletrônicos de um sólido cristalino [70].

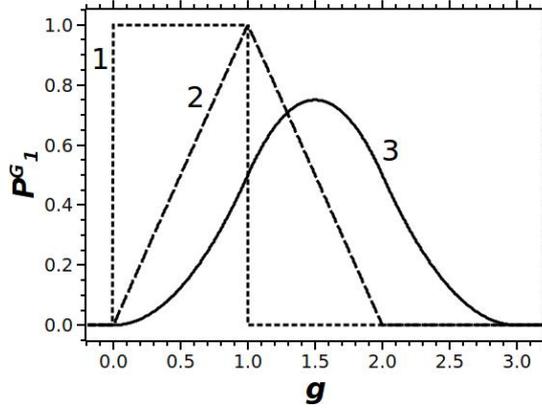


Figura 7.3 Distribuições geométricas da condutância. Os números rotulando as curvas são os valores de n .

com $0 \leq \eta \leq n$. Para o terceiro CTC, $\mathcal{Z} = \{1/2 \pm \sqrt{3}/6\}$, $f_3(1/2 \pm \sqrt{3}/6) = \mp \sqrt{3}/18$ e, portanto, temos

$$\tilde{q}_3 = (\eta_1 - \eta_2)\sqrt{3}/18, \quad (7.12)$$

com $0 \leq \eta_1 + \eta_2 \leq n$. Analogamente, para o quarto CTC $\mathcal{Z} = \{1/2, 1/2 \pm 1/\sqrt{6}\}$, $f_4(1/2) = -1/8$, $f_4(1/2 \pm 1/\sqrt{6}) = 1/24$ e, assim,

$$\tilde{q}_4 = (-3\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)/24, \quad (7.13)$$

onde $0 \leq \eta_1 + \eta_2 + \eta_3 \leq n$.

Através desta análise geométrica é possível saber todos os valores dos CTC's onde a distribuição geométrica é não-analítica. Porém, as não-analiticidades são suavizadas à medida que n aumenta. Por exemplo, de acordo com a eq. (7.6), a distribuição geométrica da condutância para $n = 1, 2$ e 3 é

$$\begin{aligned} n = 1: \quad P_1^G(g) &= \int_0^1 d\tau_1 \delta(g - \tau_1) \\ &= \Theta(g) - \Theta(g - 1), \\ n = 2: \quad P_2^G(g) &= \int_0^1 d\tau_1 \int_0^1 d\tau_2 \delta(g - \tau_1 - \tau_2) \\ &= (2 - g)\Theta(2 - g) - 2(1 - g)\Theta(1 - g) - g\Theta(-g), \\ n = 3: \quad P_3^G(g) &= \int_0^1 d\tau_1 \int_0^1 d\tau_2 \int_0^1 d\tau_3 \delta(g - \tau_1 - \tau_2 - \tau_3) \\ &= \frac{1}{2}(g^2 - 6g + 9)\Theta(3 - g) - \frac{3}{2}(g^2 - 4g + 4)\Theta(2 - g) + \\ &\quad \frac{3}{2}(g^2 - 2g + 1)\Theta(1 - g) - \frac{1}{2}g^2\Theta(-g). \end{aligned}$$

As funções degrau demonstram explicitamente as não-analiticidades nos valores esperados

por nossa análise geométrica, como mostra a eq. (7.9). Porém, a fig. 7.3 indica que para $n = 3$ as não-analiticidades são suavizadas e a distribuição se torna mais regular. Isto ilustra o teorema central do limite, que estabelece que a soma de variáveis aleatórias independentes tende a uma variável aleatória regida por uma distribuição gaussiana com o aumento do número das variáveis independentes. Como na distribuição geométrica, $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$ são distribuídas aleatória e independentemente, a distribuição geométrica de $g = \sum_{i=1}^n \tau_i$ tende a uma distribuição gaussiana à medida que n aumenta.

7.3 SUMÁRIO

A distribuição física dada pela eq. (7.4) contém a distribuição conjunta de autovalores $\rho(\vec{\tau})$, a qual pode suavizar as irregularidades provocadas pela parte geométrica. Sendo assim, a justificativa geométrica informa os valores de CTC's onde *é possível ocorrer* não-analiticidades em suas distribuições, os quais, para os quatro primeiros CTC's, são explicitamente

$$\begin{aligned}
\mathbb{Q}_{1,n} &= \{0, 1, \dots, n\}, \\
\mathbb{Q}_{2,n} &= \{0, 1/4, \dots, n/4\}, \\
\mathbb{Q}_{3,n} &= \{0, \pm\sqrt{3}/18, \dots, \pm\sqrt{3}n/18\}, \\
\mathbb{Q}_{4,1} &= \{-1/8, 0, 1/24\}, \\
\mathbb{Q}_{4,2} &= \mathbb{Q}_{4,1} \cup \{-1/4, -1/12, 1/12\}, \\
\mathbb{Q}_{4,3} &= \mathbb{Q}_{4,2} \cup \{-3/8, -5/24, -1/24, 1/8\}, \\
\mathbb{Q}_{4,4} &= \mathbb{Q}_{4,3} \cup \{-1/2, -1/3, -1/6, 1/6\}, \\
\mathbb{Q}_{4,5} &= \mathbb{Q}_{4,4} \cup \{-5/8, -11/24, -7/24, 5/24\}, \\
\mathbb{Q}_{4,6} &= \mathbb{Q}_{4,5} \cup \{-3/4, -7/12, -5/12, 1/4\}, \\
\mathbb{Q}_{4,7} &= \mathbb{Q}_{4,6} \cup \{-21/24, -17/24, -13/24, 7/24\}, \\
\mathbb{Q}_{4,8} &= \mathbb{Q}_{4,7} \cup \{-1, -5/6, -2/3, 1/3\}, \\
\mathbb{Q}_{4,9} &= \mathbb{Q}_{4,8} \cup \{-9/8, -23/24, -19/24, 3/8\}, \\
\mathbb{Q}_{4,10} &= \mathbb{Q}_{4,9} \cup \{-5/4, -13/12, -11/12, 5/12\},
\end{aligned} \tag{7.14}$$

onde $\mathbb{Q}_{m,n}$ é o conjunto de valores de q_m onde suas distribuições de probabilidade podem apresentar não-analiticidades.

Todos os valores de CTC's onde as distribuições mostradas nesta tese apresentam irregularidades estão presentes na eq. (7.14). Por exemplo, na fig. 7.4, temos distri-

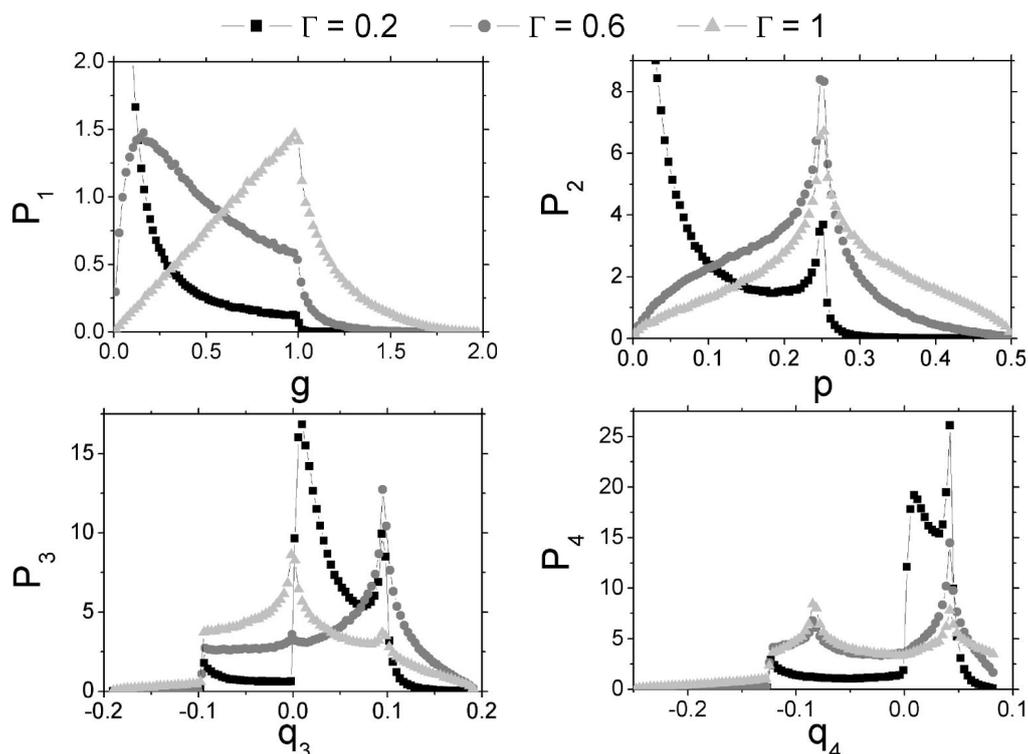


Figura 7.4 Distribuições de condutância para um ponto quântico caótico com $\beta = 1$, dois canais em cada guia e barreiras de transparência $\Gamma = 0,2, 0,6$ e 1 . As linhas são apenas guias de olhos.

buições dos quatro primeiros CTC's para um ponto quântico simétrico com dois canais de espalhamento em cada guia e $\beta = 1$. Note que em $g = 0$, há descontinuidades em P_1 , para $\Gamma = 0,4$, e em sua derivada, para $\Gamma = 0,6$ e 1 . Para $g = 1$, as curvas sugerem que a derivada de P_1 seja descontínua. Não percebemos nenhum tipo de anomalia em $g = 2$. Nas distribuições dos demais CTC's, notamos irregularidades em:

- $p : 0, \quad 1/4 \quad \text{e} \quad 1/2;$
- $q_3 : \pm\sqrt{3}/9(\approx \pm 0,19245), \quad \pm\sqrt{3}/18(\approx \pm 0,096225) \quad \text{e} \quad 0;$
- $q_4 : -1/4, \quad -1/8, \quad -1/12, \quad 0, \quad 1/24 \quad \text{e} \quad 1/12.$

Todos estes valores estão de acordo com as previsões expostas na eq. (7.14) para $n = 2$.

Ainda na fig. 7.4, note que mesmo com a variação dos valores de Γ , as não analiticidades ocorrem nos mesmo valores dos CTC's, influenciando apenas os valores da distribuição. A interpretação deste comportamento é que a informação da transparência das barreiras está na distribuição conjunta de autovalores, a qual não pode alterar os

pontos de possíveis não-analiticidades. Todavia, a mudança de parâmetros físicos (topologia da rede, simetria da cavidade, transparência das barreiras, etc.) podem suavizar estas irregularidades, por causa da influência no valor de $\rho(\vec{\tau})$.

Publicamos parte deste capítulo na ref. [30].

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta tese, estudamos transporte quântico em redes de pontos quânticos através da teoria de matrizes aleatórias e de métodos numéricos.

Apresentamos algoritmos para encontrar a matriz de espalhamento efetiva de redes de pontos quânticos com topologias arbitrárias. A analogia com circuitos clássicos é evidente, pois nesse caso as leis de Ohm (linearidade) e de Kirchhoff (conservação de corrente) geram regras simples para concatenar os elementos do circuito (resistências, capacitores, etc) em série e em paralelo. Dentro da proposta de decompor sistemas mesoscópicos em elementos de circuito, nossa ideia foi de identificar cada elemento como um centro espalhador, caracterizado por sua matriz de espalhamento. Porém, agora a corrente não se comporta classicamente, pois é composta de quase-partículas coerentes, as quais possuem características ondulatórias. Sendo assim, a conservação de corrente é estabelecida pela unitariedade da matriz de espalhamento e, portanto, as operações de concatenação destas matrizes devem conservar a unitariedade da matriz de espalhamento efetiva. Com estes princípios, desenvolvemos uma operação algébrica bem definida que serve para concatenar matrizes de espalhamento (ou de transferência) em paralelo. As concatenações em série são feitas através da regra multiplicativa das matrizes de transferência ou por uma parametrização de estube. Tendo estas regras de concatenações em série e em paralelo, podemos obter o centro espalhador efetivo de qualquer rede de pontos quânticos de maneira análoga ao que se faz para se obter a resistência resultante de um circuito com resistências em série e/ou em paralelo. Por virtude desta analogia clássica, consideramos este algoritmo de concatenações muito prático. Além disso, com a parametrização de estube, as matrizes efetivas são sempre as menores possíveis, eliminando redundâncias em cada etapa da implementação do algoritmo, garantindo assim a otimização numérica.

Implementamos simulações em FORTRAN usando os algoritmos de concatenação e os geradores numéricos de matrizes aleatórias. Comprovamos que, numericamente, os algoritmos baseados no formalismo de espalhamento (estube e matriz de transferência) são muito mais eficientes que o método de Mahaux-Weidenmüller, o qual baseia-se no formalismo hamiltoniano. Cada um dos resultados de simulação desta tese foi obtido

em poucos minutos (muitas vezes segundos) rodando o programa em um computador doméstico (CPU de 2,6 GHz e memória RAM de 4Gb), o que comprova a eficiência numérica dos algoritmos.

Estudamos a estatística dos quatro primeiros cumulantes de transferência de carga (CTC's) em três sistemas:

- um único ponto quântico;
- uma cadeia de pontos quânticos;
- um anel de quatro pontos quânticos.

Obtivemos as distribuições dos CTC's e discutimos como caracterizar o regime de transporte através destas distribuições. Focalizamos nossa atenção no limite quântico extremo, que é um regime não-perturbativo, onde as distribuições são irregulares e apresentam não-analiticidades em muitas situações. Através de um argumento geométrico, justificamos estas não-analiticidades e calculamos valores explícitos dos CTC's onde suas distribuições podem ser não-analíticas. Estas irregularidades reforçam a necessidade de se conhecer toda a distribuição dos observáveis e não se limitar a apenas seus cumulantes como médias e variâncias. Existem vários experimentos que mostram que as distribuições de condutância são irregulares [10, 27] e que média e variância não são suficientes para caracterizar seu comportamento estatístico, essencial para o entendimento do sistema mesoscópico. Sendo assim, reforçamos a importância de se conhecer as distribuições dos observáveis, principalmente no limite quântico extremo, onde os efeitos ocasionados por interferências quânticas são mais intensos. Além disso, observamos que, nos três sistemas estudados, uma lei de escala aproximadamente clássica (lei de Ohm) torna as distribuições de condutância mais próximas.

Descrevemos a inferência bayesiana e exemplificamos com a regressão linear bayesiana. Este método foi fundamental para obter as correções de localização fraca e variâncias dos CTC's no regime semiclássico. Nesta situação, o tamanho das matrizes é grande e, conseqüentemente, o tempo computacional e os erros numéricos aumentam. Por isso, os resultados apresentam elevado ruído numérico e seria inviável obter uma amostragem suficientemente grande destes resultados, pois levaria muito tempo de processamento. Através de métodos bayesianos, conseguimos unir os poucos dados da nossa amostra ruidosa com argumentos lógicos provenientes de leis físicas do fenômeno. Com isso, melhoramos nossa estimativa, obtendo resultados precisos para localização fraca e variâncias dos CTC's, os quais foram comparados a resultados exatos obtidos por técnicas analíticas. O fato destes observáveis estimados possuírem valores muito pequenos dentro da escala

de observação (o termo dominante do observável é muito maior) também provoca dados ruidosos em medidas experimentais. Sendo assim, recomendamos o método bayesiano como uma poderosa ferramenta para estimar valores através de dados ruidosos, tanto em cálculos numéricos como em experimentos.

Abordamos transporte quântico considerando a aproximação de quase-partículas independentes e na presença da coerência de fase em redes de pontos quânticos ligados a reservatórios normais. O próximo passo que propomos para aproximar as simulações realizadas nesta tese dos experimentos é adaptá-las para estudar sistemas de quase-partículas interagentes e com descoerência, incluir efeitos de reservatórios ferromagnéticos e supercondutores e modelar a transição entre as classes de universalidade dos ensembles através da variação de um campo magnético. Como os nossos algoritmos servem para uma rede de topologia arbitrária, muitos destes efeitos podem ser modelados através de cavidades fictícias acopladas ao sistema, as quais desempenham o papel do efeito físico real como a descoerência [31], os graus de liberdade partícula-buraco (ou de spin) em decorrência da presença de reservatórios supercondutores (ou ferromagnéticos) [32, 33], a dependência de temperatura, campo magnético e interação das quase-partículas [19]. Sendo assim, a generalidade dos nossos algoritmos indicam uma boa adaptação a estes efeitos para trabalhos futuros.

APÊNDICE A

DISTRIBUIÇÃO GAUSSIANA DE MATRIZES ALEATÓRIAS

Seja \mathbf{H} uma matriz $M \times M$ hermitiana pertencente ao ensemble gaussiano de matrizes aleatórias, que satisfaz portanto à seguinte distribuição

$$P(\mathbf{H}) \propto \exp [-a \operatorname{tr}(\mathbf{H}^2)]. \quad (\text{A.1})$$

Porém, como $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$ temos que $\operatorname{tr}(\mathbf{H}^2) = \operatorname{tr}(|\mathbf{H}|^2) = \sum_{pq} |H_{pq}|^2 = \sum_p (|H_{pp}|^2 + 2 \sum_{q < p} |H_{pq}|^2)$. Então

$$P(\mathbf{H}) \equiv \prod_{pq} P(H_{pq}), \quad (\text{A.2})$$

onde

$$P(H_{pq}) \propto \begin{cases} \exp(-a |H_{pq}|^2), & \text{se } p = q; \\ \exp(-2a |H_{pq}|^2), & \text{se } p \neq q. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Em geral, cada elemento de \mathbf{H} é um quatérnio real da seguinte forma

$$\begin{cases} H_{pq} = {}^0H_{pq} + {}^1H_{pq} e_1 + {}^2H_{pq} e_2 + {}^3H_{pq} e_3 \\ {}^nH_{pq} \in \mathbb{R} \\ {}^nH_{pq} = 0 \quad \text{para } n > \beta - 1 \\ {}^nH_{pp} = 0 \quad \text{para } n > 0 \\ |H_{pq}|^2 = \sum_{n=0}^{\beta-1} {}^nH_{pq}^2 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

onde $\beta = 1$ (EGO), 2 (EGU) ou 4 (EGS).

De (A.3) e (A.4), temos que

$$\langle H_{pq} \rangle = 0, \quad (\text{A.5})$$

$$\langle |H_{pq}|^2 \rangle = \begin{cases} \frac{\beta}{2a}, & \text{se } p = q, \\ \frac{\beta}{4a}, & \text{se } p \neq q. \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Portanto, para n de 0 a $\beta - 1$

$$\langle {}^n H_{pq} \rangle = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$\langle |H_{pq}|^2 \rangle = \begin{cases} \frac{\beta}{2a} = \langle {}^0 H_{pp}^2 \rangle, & \text{se } p = q, \\ \frac{\beta}{4a} = \beta \langle {}^n H_{pq}^2 \rangle, & \text{se } p \neq q, \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Escolhendo $a = \frac{\beta}{4\mathcal{V}}$ em (A.1) temos que

$$P(\mathbf{H}) \propto \exp \left[-\frac{\beta}{4\mathcal{V}} \text{tr}(\mathbf{H}^2) \right], \quad (\text{A.9})$$

$$\langle {}^n H_{pq} \rangle = 0 \quad (\text{A.10})$$

e

$$\langle {}^n H_{pq} {}^m H_{rs} \rangle = \delta_{pr} \delta_{qs} \delta_{nm} \mathcal{V} \left[\left(2\delta_{n0} - \frac{1}{\beta} \right) \delta_{pq} + \frac{1}{\beta} \right], \quad (\text{A.11})$$

para n, m de 0 a $\beta - 1$ e p, q, r, s de 1 a M .

APÊNDICE B

PARAMETRIZAÇÃO DE BOX-MÜLLER

Sejam u_1 e u_2 variáveis aleatórias independentes e distribuídas uniformemente no intervalo $[0, 1[$. Considere a seguinte parametrização

$$\begin{cases} x_1 = \sqrt{-2 \ln(u_1)} \cos(2\pi u_2), \\ x_2 = \sqrt{-2 \ln(u_1)} \sin(2\pi u_2). \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Percebe-se que x_1 e x_2 estão no intervalo $]-\infty, +\infty[$. Porém, precisamos saber a distribuição que as rege. Para isso, vamos escrever u_1 e u_2 em função de x_1 e x_2

$$\begin{cases} u_1 = \exp[-(x_1^2 + x_2^2)/2], \\ u_2 = (2\pi)^{-1} \arctan(x_2/x_1). \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

A distribuição conjunta de u_1 e u_2 é $f_u(u_1, u_2) = 1$. Através do jacobiano, obtemos a distribuição conjunta de x_1 e x_2

$$dx_1 dx_2 f_x(x_1, x_2) = du_1 du_2 = dx_1 dx_2 \left| \frac{\partial(u_1, u_2)}{\partial(x_1, x_2)} \right|. \quad (\text{B.3})$$

Portanto, temos

$$f_x(x_1, x_2) = \left| \frac{\partial(u_1, u_2)}{\partial(x_1, x_2)} \right| = \frac{1}{2\pi} \exp[-(x_1^2 + x_2^2)/2]. \quad (\text{B.4})$$

A independência estatística entre x_1 e x_2 está garantida, já que a distribuição conjunta é o produto de duas distribuição normais

$$f_x(x_1, x_2) = f(x_1)f(x_2) \quad (\text{B.5})$$

onde $f(x) \equiv (2\pi)^{-1/2} \exp(-x^2/2)$.

Assim, através da parametrização (B.1), transformamos duas variáveis aleatórias independentes uniformemente distribuídas no intervalo $[0,1[$ em duas variáveis aleatórias gaussianas independentes x_1 e x_2 com médias nulas e variâncias iguais à unidade [41].

APÊNDICE C

PARAMETRIZAÇÃO DE HURWITZ E ALGORITMO PARA GERAR MATRIZES DO ECU

Vamos descrever aqui o algoritmo que usamos para gerar aleatoriamente matrizes do ensemble circular unitário [43, 44]. Inicialmente, vamos decompor a matriz $N \times N$ unitária \mathbf{U}_2 em transformações mais elementares, as quais também são unitárias $\mathbf{E}^{(i,j)}(\phi, \psi, \chi)$ e seus únicos elementos não nulos são:

$$\begin{aligned} E_{k,k}^{(i,j)} &= 1; & k &= 1, \dots, N; & k &\neq i, j; \\ E_{i,i}^{(i,j)} &= \cos(\phi_{i,j}) \exp(i\psi_{i,j}); \\ E_{i,j}^{(i,j)} &= \text{sen}(\phi_{i,j}) \exp(i\chi_{i,j}); \\ E_{j,i}^{(i,j)} &= -\text{sen}(\phi_{i,j}) \exp(-i\chi_{i,j}); \\ E_{j,j}^{(i,j)} &= \cos(\phi_{i,j}) \exp(-i\psi_{i,j}). \end{aligned} \tag{C.1}$$

Com base nestas matrizes unitárias elementares, fazemos as seguintes $N - 1$ rotações compostas:

$$\mathbf{E}^{(i)} = \prod_{j=i+1}^N \mathbf{E}^{(i,j)}(\phi_{i,j}, \psi_{i,j}, \chi_{i,j}), \tag{C.2}$$

onde $\chi_{i,j} = \chi_i \delta_{N,j}$ e com o produtório matricial sendo definido na ordem crescente dos índices

$$\prod_{i=1}^M \mathbf{A}_i \equiv \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \dots \mathbf{A}_M. \tag{C.3}$$

Finalmente, podemos obter \mathbf{U}_2 através da seguinte composição

$$\mathbf{U}_2 = e^{i\alpha} \prod_{i=N-1}^1 \mathbf{E}^{(i)}. \tag{C.4}$$

Se os ângulos variam nos intervalos

$$0 \leq \phi_{i,j} \leq \pi/2; \quad 0 \leq \psi_{i,j} < 2\pi; \quad 0 \leq \chi_{i,j} < 2\pi; \quad 0 \leq \alpha < 2\pi, \tag{C.5}$$

respeitando a medida de Haar

$$\mu_2(d\mathbf{U}_2) = d\alpha \left\{ \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^N d[(\cos \phi_{i,j})^{2(N-j+1)}] d\psi_{i,j} \right\} \prod_{k=0}^{N-1} d\chi_k, \quad (\text{C.6})$$

\mathbf{U}_2 pertence ao ECU.

Sendo assim, devemos escolher os ângulos α , $\psi_{i,j}$ e χ_i variando uniformemente no intervalo $[0, 2\pi[$. Além disso, a variável $\xi_{i,j} \equiv (\cos \phi_{i,j})^{2(N-j+1)}$ deve variar uniformemente no intervalo $[0, 1[$ e portanto, devemos tomar $\phi_{i,j} = \arccos \left[\xi_{i,j}^{\frac{1}{2(N-j+1)}} \right]$.

ANÁLISE DE EFICIÊNCIA NUMÉRICA

Aplicamos os três métodos de simulação (MW, ST e MT) para o caso de um ponto quântico acoplado a dois guias simétricos com N canais e contatos de transparência Γ , visando comparar a eficiência numérica entre eles. As realizações numéricas foram geradas através da implementação dos algoritmos em FORTRAN rodando em uma CPU com taxa de processamento (*clock*) de 2,6 GHz em um sistema operacional GNU/Linux 64 bits.

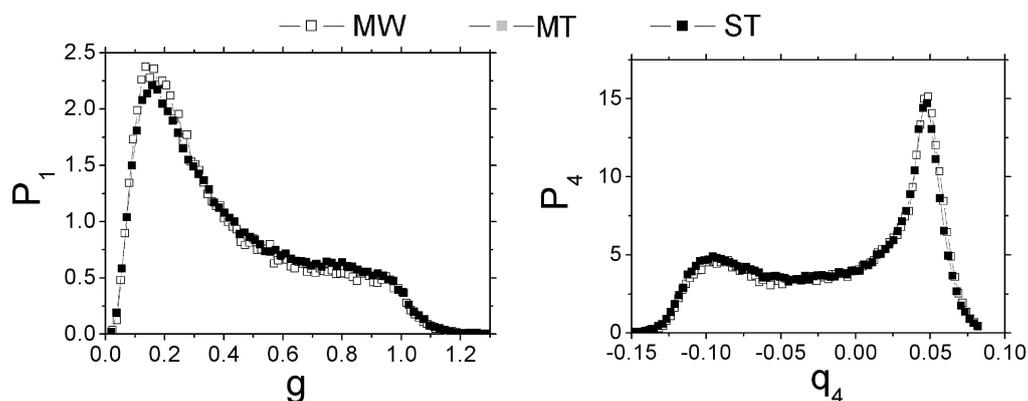


Figura D.1 Distribuições da condutância, g e do quarto CTC, q_4 , para um ponto quântico caótico com dois canais abertos de espalhamento em cada um dos dois guias, transparência das barreiras de 40% e $\beta = 4$, usando os três métodos numéricos apresentados no cap. 3 com 10^5 realizações.

A maior dificuldade no método de MW surge do fato de que o número de ressonâncias da cavidade M deve ser muito grande, para que se possa gerar o núcleo de Poisson. No entanto, percebemos que o uso de 10^5 realizações com a regra prática de $M = 4N$ é suficiente para produzir pelo menos 98% de precisão no cálculo da média da condutância para contatos ideais e portanto, adotamos isso como padrão para todos os cálculos via MW. Apesar dessa aproximação finita, a fig. D.1 mostra que as distribuições obtidas através do método de MW são muito próximas das obtidas através dos métodos de ST e MT, os quais possuem apenas erros estatísticos usuais e numéricos.

Observamos que para os três métodos, o tempo de processamento por realizações T_{CPU}

varia com o número de canais de acordo com a seguinte lei de potência

$$T_{\text{CPU}} = \vartheta N^\gamma. \quad (\text{D.1})$$

Usando os valores dos parâmetros ϑ e γ estimados através do ajuste numérico de pontos via regressão linear em escala log-log, analisamos a eficiência dos métodos através do tempo de processamento e concluímos que o método ST é sempre o mais eficiente. Podemos definir uma medida de eficiência do método ST em relação aos métodos de MW ou MT da seguinte forma

$$\eta \equiv \frac{T_{\text{CPU}}^{(\text{MW ou MT})}}{T_{\text{CPU}}^{(\text{ST})}} - 1. \quad (\text{D.2})$$

Na fig. D.2, mostramos que para $1 \leq N \leq 30$ a eficiência do método ST está entre 7,5% e 32,5%, em relação a MT, e entre 150% and 310%, em relação ao MW.

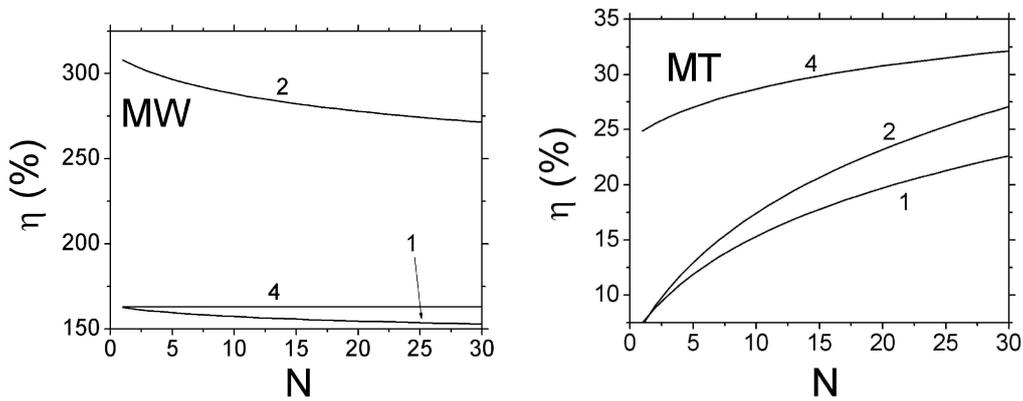


Figura D.2 Eficiência do método ST em relação aos métodos MW e MT versus o número de canais. Os números rotulando as curvas são os valores de β .

A MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

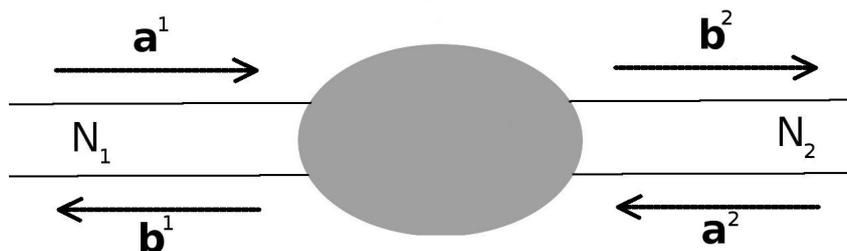


Figura E.1 Centro espalhador conectado a dois guias. As ondas dentro dos guias 1 e 2 incidem ou refletem no centro espalhador. As amplitudes de ondas incidentes são $\mathbf{a}^{1,2}$ e das refletidas são $\mathbf{b}^{1,2}$.

Considere o centro espalhador ilustrado na fig. E.1. As amplitudes de ondas incidentes e refletidas no guia m ($= 1$ ou 2) são respectivamente

$$\mathbf{a}^m \equiv \begin{pmatrix} a_1^m \\ a_2^m \\ \vdots \\ a_{N_m}^m \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{b}^m \equiv \begin{pmatrix} b_1^m \\ b_2^m \\ \vdots \\ b_{N_m}^m \end{pmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

Como sabemos, a matriz de espalhamento relaciona as amplitudes de ondas incidentes com as refletidas da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}^1 \\ \mathbf{b}^2 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 \\ \mathbf{a}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 \\ \mathbf{a}^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.2})$$

Por outro lado, a matriz de transferência relaciona as amplitudes de um guia com as do outro, podendo ser definida da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}^2 \\ \mathbf{a}^2 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 \\ \mathbf{b}^1 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.3})$$

É conveniente, escrever explicitamente \mathbf{M} em termos dos blocos de transmissão e reflexão

da matriz \mathbf{S} . Da eq. (E.2), temos

$$\begin{cases} \mathbf{b}^1 = \mathbf{r}\mathbf{a}^1 + \mathbf{t}'\mathbf{a}^2, \\ \mathbf{b}^2 = \mathbf{t}\mathbf{a}^1 + \mathbf{r}'\mathbf{a}^2. \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

Com isso, podemos extrair as seguintes relações

$$\begin{cases} \mathbf{b}^2 = [\mathbf{t} - \mathbf{r}'(\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{r}]\mathbf{a}^1 + \mathbf{r}'(\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{b}^1, \\ \mathbf{a}^2 = -(\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{r}\mathbf{a}^1 + (\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{b}^1, \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

A unitariedade da matriz de espalhamento implica que

$$\mathbf{t} - \mathbf{r}'(\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{r} = (\mathbf{t}^\dagger)^{-1}. \quad (\text{E.6})$$

Das eqs. (E.3), (E.5) e (E.6), concluímos que a matriz de transferência possui a seguinte forma explícita

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} (\mathbf{t}^\dagger)^{-1} & \mathbf{r}'(\mathbf{t}')^{-1} \\ -(\mathbf{t}')^{-1}\mathbf{r} & (\mathbf{t}')^{-1} \end{pmatrix}. \quad (\text{E.7})$$

As matrizes de transmissão não são quadradas em geral, resultando em um problema na sua inversão, o qual está devidamente solucionado e explicado na sec. 3.2.2.1.

CONCATENAÇÃO EM SÉRIE DE DUAS MATRIZES DE ESPALHAMENTO

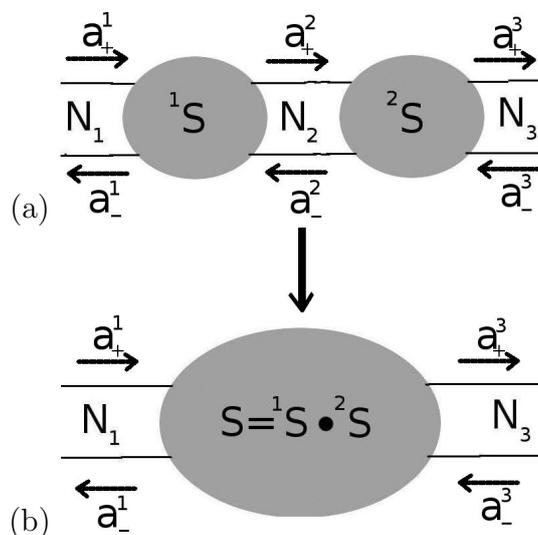


Figura F.1 Concatenação em série de duas matrizes de espalhamento. Em (a), dois centros espalhadores em série e em (b), o centro espalhador efetivo. As amplitudes de onda no guia m com sentido de propagação σ estão denotadas por a_{σ}^m .

Considere o sistema ilustrado na fig. F.1. As matrizes de espalhamento são

$${}^1\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{r} & {}^1\mathbf{t}' \\ {}^1\mathbf{t} & {}^1\mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad {}^2\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^2\mathbf{r} & {}^2\mathbf{t}' \\ {}^2\mathbf{t} & {}^2\mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad (\text{F.1})$$

onde $\mathbf{S} \equiv {}^1\mathbf{S} \bullet {}^2\mathbf{S}$ é a matriz de espalhamento resultante da concatenação em série dos dois centros espalhadores. É interessante expressar \mathbf{S} em termos dos blocos de reflexão e transmissão dos centros 1 e 2.

Usando a notação da fig. F.1, já que as matrizes de espalhamento relacionam as

amplitudes de ondas incidentes com as refletidas, temos as seguintes equações

$$\begin{cases} \mathbf{a}_-^1 = {}^1\mathbf{r}\mathbf{a}_+^1 + {}^1\mathbf{t}'\mathbf{a}_-^2, \\ \mathbf{a}_+^2 = {}^1\mathbf{t}\mathbf{a}_+^1 + {}^1\mathbf{r}'\mathbf{a}_-^2. \end{cases} \quad (\text{F.2})$$

$$\begin{cases} \mathbf{a}_-^2 = {}^2\mathbf{r}\mathbf{a}_+^2 + {}^2\mathbf{t}'\mathbf{a}_-^3, \\ \mathbf{a}_+^3 = {}^3\mathbf{t}\mathbf{a}_+^2 + {}^2\mathbf{r}'\mathbf{a}_-^3. \end{cases} \quad (\text{F.3})$$

$$\begin{cases} \mathbf{a}_-^1 = \mathbf{r}\mathbf{a}_+^1 + \mathbf{t}'\mathbf{a}_-^3, \\ \mathbf{a}_+^3 = \mathbf{t}\mathbf{a}_+^1 + \mathbf{r}'\mathbf{a}_-^3. \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

Das eqs. (F.2) e (F.3), obtemos

$$\begin{cases} \mathbf{a}_-^1 = \{ {}^1\mathbf{r} + {}^1\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{r}^1\mathbf{r}')^{-1}]^2\mathbf{r}^1\mathbf{t} \} \mathbf{a}_+^1 + {}^1\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{r}^1\mathbf{r}')^{-1}]^2\mathbf{t}'\mathbf{a}_-^3, \\ \mathbf{a}_+^3 = {}^2\mathbf{t}[(\mathbf{1} - {}^1\mathbf{r}'^2\mathbf{r})^{-1}]^1\mathbf{t}\mathbf{a}_+^1 + \{ {}^2\mathbf{r}' + {}^2\mathbf{t}[(\mathbf{1} - {}^1\mathbf{r}'^2\mathbf{r})^{-1}]^1\mathbf{r}'^2\mathbf{t}' \} \mathbf{a}_-^3. \end{cases} \quad (\text{F.5})$$

Com isso, das eqs. (F.1), (F.4) e (F.5) concluímos que a matriz de espalhamento efetiva da concatenação em série dos dois centros é

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{r} + {}^1\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{r}^1\mathbf{r}')^{-1}]^2\mathbf{r}^1\mathbf{t} & {}^1\mathbf{t}'[(\mathbf{1} - {}^2\mathbf{r}^1\mathbf{r}')^{-1}]^2\mathbf{t}' \\ {}^2\mathbf{t}[(\mathbf{1} - {}^1\mathbf{r}'^2\mathbf{r})^{-1}]^1\mathbf{t} & {}^2\mathbf{r}' + {}^2\mathbf{t}[(\mathbf{1} - {}^1\mathbf{r}'^2\mathbf{r})^{-1}]^1\mathbf{r}'^2\mathbf{t}' \end{pmatrix}. \quad (\text{F.6})$$

APÊNDICE G

UNITARIEDADE NA CONCATENAÇÃO VIA ESTUBE

Considere a eq. (3.21) com $\mathbf{U} \equiv {}^2\mathbf{S}$ e $\mathbf{A} \equiv (\mathbf{1} - \mathbf{UR}')^{-1}$

$$\mathbf{S} = \mathbf{R} + \mathbf{T}'\mathbf{A}\mathbf{U}\mathbf{T}. \quad (\text{G.1})$$

Para mostrar que a concatenação em série via estube produz uma matriz de espalhamento unitária, precisamos provar que $\mathbf{SS}^\dagger = \mathbf{1}$. Para isso, vamos realizar o seguinte cálculo

$$\mathbf{SS}^\dagger = \mathbf{RR}^\dagger + \mathbf{XR}^\dagger + \mathbf{RX}^\dagger + \mathbf{XX}^\dagger, \quad (\text{G.2})$$

onde $\mathbf{X} \equiv \mathbf{T}'\mathbf{A}\mathbf{U}\mathbf{T}$. Lembramos que a matriz ${}^A\mathbf{S}$ [eqs. (3.18) e (3.22)] é unitária.

Vamos calcular o segundo e o terceiro termos da eq. (G.2) usando a relação $\mathbf{TR}^\dagger + \mathbf{R}'\mathbf{T}'^\dagger = \mathbf{0}$, a qual é consequência da unitariedade da matriz ${}^A\mathbf{S}$

$$\mathbf{XR}^\dagger = -\mathbf{T}'\mathbf{A}\mathbf{U}\mathbf{R}'\mathbf{T}'^\dagger = (\mathbf{RX}^\dagger)^\dagger. \quad (\text{G.3})$$

Porém,

$$\mathbf{A}(\mathbf{1} - \mathbf{UR}') = \mathbf{1} \rightarrow \mathbf{A}\mathbf{U}\mathbf{R}' = \mathbf{A} - \mathbf{1}. \quad (\text{G.4})$$

Portanto, das eqs. (G.3) e (G.4) obtemos

$$\mathbf{XR}^\dagger = \mathbf{T}'(\mathbf{1} - \mathbf{A})\mathbf{T}'^\dagger = (\mathbf{RX}^\dagger)^\dagger. \quad (\text{G.5})$$

Agora vamos desenvolver o quarto termo da eq. (G.2) através da eq. (G.4), da relação $\mathbf{R}'\mathbf{R}^\dagger + \mathbf{TT}^\dagger = \mathbf{1}$ vinda da unitariedade da matriz ${}^A\mathbf{S}$ e de $\mathbf{UU}^\dagger = \mathbf{1}$

$$\mathbf{XX}^\dagger = \mathbf{T}'\mathbf{A}\mathbf{U}(\mathbf{1} - \mathbf{R}'\mathbf{R}^\dagger)\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}^\dagger\mathbf{T}'^\dagger = \mathbf{T}'(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\dagger - \mathbf{1})\mathbf{T}'^\dagger. \quad (\text{G.6})$$

Da relação $\mathbf{RR}^\dagger + \mathbf{T}'\mathbf{T}'^\dagger = \mathbf{1}$ proveniente da unitariedade de ${}^A\mathbf{S}$ e das eqs. (G.5), (G.6) e (G.2), concluímos finalmente que \mathbf{S} é unitária

$$\mathbf{SS}^\dagger = \mathbf{1}. \quad (\text{G.7})$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Y. V. Nazarov e Y. M. Blanter. *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009; Y. V. Nazarov. Quantum Transport and Circuit Theory. Em: M. Rieth e W. Schommers. *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology (10-Volume set)*. Los Angeles: American Scientific Publishers, 2006. v. 1, cap. 95, p. 1-83.
- [2] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [3] Yuri M. Galperin. *Quantum Transport: Lecture Notes*. Lund, 1998. Disponível em: <<http://folk.uio.no/yurig/>>. Acesso em: 30 de novembro de 2009.
- [4] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Filadélfia: Saunders College.
- [5] B. J. van Wees et al. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.* **60**:848, 1988.
- [6] D. Wharan et al. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**:L209, 1988.
- [7] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.* **69**:731, 1997.
- [8] <http://pages.unibas.ch/phys-meso/Pictures/pictures.html>. Acesso em 23 de setembro de 2009.
- [9] M. Büttiker et al. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Phys. Rev. B.* **31**:6207, 1985.
- [10] P. Mohanty e R. A. Webb. Anomalous Conductance Distribution in Quasi-One-Dimensional Gold Wires: Possible Violation of the One-Parameter Scaling Hypothesis. *Phys. Rev. Lett.* **88**:146601, 2002.

- [11] M. Kindermann e Y. V. Nazarov. Full counting statistics in electric circuits. *arXiv.org*. cond-mat/0303590, 2003.
- [12] R. Landauer. Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction. *IBM J. Res. Dev.* **1**:223, 1957; R. Landauer. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philos. Mag.* **21**:863, 1970.
- [13] L. S. Levitov e G. B. Lesovik. Charge distribution in quantum shot noise. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **58**:225, 1993 [*JETP Letters.* **58**:230, 1993]; L. S. Levitov e G. B. Lesovik. Quantum Measurement in Electric Circuit. *arXiv.org*. cond-mat/9401004, 1994.
- [14] E. Scheer et al. Conduction Channel Transmissions of Atomic-Size Aluminum Contacts. *Phys. Rev. Lett.* **78**:3535, 1997.
- [15] C. W. J. Beenakker et al. Entanglement production in a chaotic quantum dot. Em: I. V. Lerner; B. L. Altshuler e Y. Gefen *Fundamental Problems of Mesoscopic Physics (NATO Science Series II)*. Dordrecht: Kluwer, 2004. v. 154, cap. 10, p. 167-177. [*arXiv.org*. cond-mat/0310199v1, 2003].
- [16] N. Argaman. Semiclassical Analysis of the Conductance of Mesoscopic Systems. *Phys. Rev. Lett.* **75**:2750, 1995; Semiclassical analysis of the quantum interference corrections to the conductance of mesoscopic systems. *Phys. Rev. B.* **53**:7035, 1996.
- [17] W. K. Wootters. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. *Phys. Rev. Lett.* **80**:2245, 1998.
- [18] P. W. Brouwer e C. W. J. Beenakker. Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems. *J. Math. Phys.* **37**:4904, 1996.
- [19] Joern N. Kupferschmidt e Piet W. Brouwer. Temperature and magnetic-field dependence of the quantum corrections to the conductance of a network of quantum dots. *Phys. Rev. B.* **78**:125313, 2008.
- [20] K. B. Efetov. *Supersymmetry in Disorder and Chaos*. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [21] H. U. Baranger e P. A. Mello. Mesoscopic transport through chaotic cavities: A random S-matrix theory approach. *Phys. Rev. Lett.* **73**:142, 1994.

- [22] D. V. Savin, H.-J. Sommers e W. Wieczorek. Nonlinear statistics of quantum transport in chaotic cavities. *Phys. Rev. B.* **77**:125332, 2007.
- [23] H.-J. Sommers, W. Wieczorek e D. V. Savin. Statistics of Conductance and Shot-Noise Power for Chaotic Cavities. *Acta Phys. Pol. A.* **112**:691, 2007.
- [24] Marcel Novaes. Full counting statistics of chaotic cavities with many open channels. *Phys. Rev. B.* **75**:073304, 2007.
- [25] Marcel Novaes. Statistics of quantum transport in chaotic cavities with broken time-reversal symmetry. *Phys. Rev. B.* **78**:035337, 2008.
- [26] S. Gustavsson et al. Counting Statistics of Single Electron Transport in a Quantum Dot. *Phys. Rev. Lett.* **96**:076605, 2006.
- [27] A. G. Huibers et al. Distributions of the Conductance and its Parametric Derivatives in Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.* **81**:1917, 1998.
- [28] Jorge G. G. S. Ramos, F. A. G. Almeida e A. M. S. Macêdo. (Em preparação)
- [29] J. G. G. S. Ramos. Modelo sigma não-linear supersimétrico: aplicações em nanoestruturas caóticas. Tese (Doutorado em física). Universidade Federal de Pernambuco. Departamento de Física, 2010.
- [30] F. A. G. Almeida, S. Rodríguez-Pérez e A. M. S. Macêdo. Distributions of charge cumulants of a chaotic quantum dot with non-ideal contacts. *Phys. Rev. B.* **80**:125320, 2009.
- [31] C. W. J. Beenakker e B. Michaelis. Stub model for dephasing in a quantum dot. *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**:10639, 2005.
- [32] Sergio Rodríguez Perez. Transporte coerente em sistemas mesoscópicos. Tese (Doutorado em física). Universidade Federal de Pernambuco. Departamento de Física, 2009.
- [33] Gerson C. Duarte Filho. Estatística de Contagem de Carga e Teoria Quântica de Circuitos em Sistemas Híbridos Metal Normal-Supercondutor e em Cadeias de Pontos Quânticos. Tese (Doutorado em física). Universidade Federal de Pernambuco. Departamento de Física, 2010.
- [34] M. L. Mehta. *Random Matrices*. Nova Iorque: Academic Press, 1991.

- [35] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*. Berlin: Springer, 1991.
- [36] T. Guhr, A. Müller–Groeling e H. A. Weidenmüller. Random Matrix Theories in Quantum Physics: Common Concepts. *Phys. Rep.* **299**:189, 1998 [*arXiv.org*. cond-mat/9707301v1, 1997].
- [37] C. W. J. Beenakker e B. Rejaei. Random-matrix theory of parametric correlations in the spectra of disordered and chaotic billiards metals. *Physica A.* **203**:61, 1994.
- [38] C. Mahaux e H. A. Weidenmüller. *Shell-model Approach to Nuclear Reactions*. Amsterdã: North-Holland, 1969.
- [39] P. A. Mello e N. Kumar. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*. Nova Iorque: Oxford University Press, 2004.
- [40] E. P. Wigner, *Group Theory*. Nova Iorque: Academic Press, 1959. cap. 26.
- [41] G. E. P. Box e Mervin E. Müller. A note on the generation of random normal deviates. *Ann. Math. Stat.* **29**:610, 1958.
- [42] F. J. Dyson. Statistical theory of statistical levels of complex systems I. *J. Math. Phys.* **3**:140, 1962.
- [43] K. Życzkowski e M. Kuś. Random unitary matrices. *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**:4235, 1994.
- [44] A. Hurwitz. *Nachr. Ges. Wiss. Gött. Math.-Phys. Kl.* **71**:309, 1898.
- [45] J. J. M. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller e M. R. Zirnbauer. Grassmann integration in stochastic quantum physics: The case of compound-nucleus scattering. *Phys. Rep.* **129**:367, 1985.
- [46] P. W. Brouwer. Generalized circular ensemble of scattering matrices for a chaotic cavity with non-ideal leads. *Phys. Rev. B.* **51**:16878, 1995.
- [47] A. M. S. Macêdo. Average conductance coefficients in multiterminal chaotic cavities. *Phys. Rev. B.* **63**:115309, 2001.
- [48] G. C. Duarte-Filho, A. F. Macedo-Junior e A. M. S. Macêdo. Circuit theory and full counting statistics of charge transfer through mesoscopic systems: A random-matrix approach. *Phys. Rev. B.* **76**:075342, 2007.

- [49] Pierpaolo Vivo, Satya N. Majumdar e Oriol Bohigas. Distributions of Conductance and Shot Noise and Associated Phase Transitions. *Phys. Rev. Lett.* **101**: 216809, 2008.
- [50] Vladimir Al. Osipov e Eugene Kanzielper. Integrable Theory of Quantum Transport in Chaotic Cavities. *Phys. Rev. Lett.* **101**: 176804, 2008.
- [51] P. W. Brouwer e C. W. J. Beenakker. Conductance distribution of a quantum dot with nonideal single-channel leads. *Phys. Rev. B.* **50**:11263, 1994.
- [52] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa e A. M. S. Macêdo. Quantum interference correction to the shot-noise power in nonideal chaotic cavities. *Phys. Rev. B.* **78**:235305, 2008.
- [53] S. Kullback e R. A. Leibler. On information and sufficiency. *Ann. Math. Stat.* **22**:79, 1951.
- [54] T. M. Cover e J. A. Thomas. *Elements of Information Theory*. Nova Iorque: Wiley, 1991.
- [55] H. Qian. Relative Entropy: Free Energy Associated with Equilibrium Fluctuations and Nonequilibrium Deviations. *arXiv.org*. math-ph/0007010, 2000.
- [56] E. T. Jaynes. *Probability Theory: The Logic of Science*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
- [57] G. Larry Bretthorst. Bayesian Spectrum Analysis and Parameter Estimation. Em: J. Berger et al. *Lecture Notes in Statistics*. Nova Iorque: Springer-Verlag, 1988. v. 48.
- [58] Sérgio D. Pena. Thomas Bayes: o cara!. *Ciência Hoje.* **38**:22, 2006.
- [59] August Dorn et al. Electronic transport through a quantum dot network. *Phys. Rev. B.* **70**:205306, 2006.
- [60] F. Molitor et al. Transport through graphene double dots. *Appl. Phys. Lett.* **94**:222107, 2009.
- [61] S. Oberholzer et al. Shot noise of series quantum point contacts intercalating chaotic cavities. *Phys. Rev. B* **66**:233304, 2002; S. Oberholzer et al. Shot Noise by Quantum Scattering in Chaotic Cavities. *Phys. Rev. Lett.* **86**:2114, 2001.

- [62] S. Oberholzer et al. Drastic Reduction of Shot Noise in Semiconductor Superlattices. *Phys. Rev. Lett.* **96**:126803, 2006.
- [63] A. M. S. Macêdo e J. T. Chalker. Exact results for the level density and two-point correlation function of the transmission-matrix eigenvalues in quasi-one-dimensional conductors. *Phys. Rev. Lett.* **49**:4695, 1994.
- [64] M. Vanević e W. Belzig. Quasiparticle transport in arrays of chaotic cavities. *Europhys. Lett.* **75**:604, 2006.
- [65] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Phys. Rev.* **109**:1492, 1958.
- [66] K. A. Muttalib et al. Nonanalyticity in the distribution of conductances in quasi-one-dimensional wires. *Europhys. Lett.* **61**:95, 2003.
- [67] K. A. Muttalib e P. Wölfle. “One-Sided” Log-Normal Distribution of Conductances for a Disordered Quantum Wire. *Phys. Rev. Lett.* **83**:3013, 1999.
- [68] P. Markos. Probability Distribution of the Conductance at the Mobility Edge. *Phys. Rev. Lett.* **83**:588, 1999.
- [69] A. García-Martín e J. J. Sáenz. Universal Conductance Distributions in the Crossover between Diffusive and Localization Regimes. *Phys. Rev. Lett.* **87**:116603, 2001.
- [70] L. Van Hove. The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal. *Phys. Rev.* **89**:1189, 1953.