Universidade Federal da Paraíba
Departamento de Física

Pós-Graduação em Física - Doutorado

PARADOXO DE KLEIN EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva

TESE DE DOUTORADO

João Pessoa
12 de Abril de 2019

Universidade Federal da Paraíba
Departamento de Física

Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva

PARADOXO DE KLEIN EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física - Doutorado do Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos*

João Pessoa
12 de Abril de 2019

Catalogação na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

S586p Silva, Adson Felipe Melo Rodrigues da.
Paradoxo de Klein em sistemas mesoscópicos / Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva. - João Pessoa, 2019.
113 f. : il.

Tese (Doutorado) - UFPB/CCEN.

1. Física Mesoscópica. 2. Paradoxo de Klein. 3. Paradoxo de Klein em Grafeno. 4. Transporte Eletrônico Quântico. 5. Teoria de Matrizes Aleatórias. I. Título

UFPB/BC

Ata da Sessão Pública da Defesa de Tese de **Doutorado** do aluno **Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva**, candidato ao Título de Doutor em Física na Área de Concentração Física da Matéria Condensada.

Aos doze dias do mês de abril do ano de dois mil e dezenove, às 10:00, no Auditório da Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para examinar o candidato ao grau de Doutor em Física na área de Física da Matéria Condensada, **Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva**. A comissão examinadora foi composta pelos professores doutores: *Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos* (UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, *Dionísio Bazeia Filho* (UFPB), *Knut Bakke Filho* (UFPB), *Adauto José Ferreira de Souza* (UFRPE) e *Ailton Fernandes de Macêdo Júnior* (UFRPE). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra para que o candidato fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de tese intitulado "*Paradoxo de Klein em sistemas mesoscópicos*". Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora, que emitiu o seguinte parecer: **"aprovado".** Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na forma da lei. E para constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, redigi esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **12 de abril de 2019**.

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
Orientador – PPGF/UFPB

Prof. Dr. Dionísio Bazeia Filho
PPGF/UFPB

Prof. Dr. Knut Bakke Filho
PPGF/UFPB

Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza
UFRPE

Prof. Dr. Ailton Fernandes de Macêdo Júnior
UFRPE

Danilo Wilson Lemos Menezes
Técnico em Assuntos Educacionais
Mat. SIAPE 2647774

Ao meu bem maior, minha família.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus por tudo que ele representa em minha vida. Agradeço também a todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para minha formação pessoal e acadêmica, em especial:

- Aos meus pais José Nauci e Katia Cristina pelo amor, carinho e por todo apoio, sem vocês nada disso seria possível;

- Aos meus irmãos Adriano Regis, Anderson Rodrigues e Alessandra Cristina por fazerem parte dessa história. Adriano, obrigado por todos os conselhos e ensinamentos mano;

- A minha sempre linda avó Euridice Eleuteria por ter me ensinado junto com minha amada mãe o significado de família, amor e dedicação. Sem dúvida uma das mulheres mais fortes que já conheci;

- A minha futura esposa Talita Alencar por todo amor e companheirismo. Obrigado por tornar minha vida com mais significado;

- Ao meu orientador, professor Jorge Gabriel, primeiramente por ter me apresentado a física mesoscópica, por todo empenho e dedicação em debater pesquisa, experiências profissionais e acadêmicas, pela compreensão e pelos conselhos em momentos difíceis que passei ao longo desses anos;

- Aos amigos irmãos Daniel de Souza, Maelyson Rolim, Mário Jorge e Milton Viana por compartilhar momentos e vida;

- Aos amigos que conquistei na UFPB, aos membros do grupo de pesquisa em sistemas mesoscópicos, em particular a Helena de Albuquerque e Marília Barros. Obrigado meninas pela companhia, amizade e pelas ótimas conversas, deixaram tudo mais leve e alegre. Ao meu amigo Rodrigo Avalos por toda companhia nesses mais de três anos dividindo apartamento, dentre conversas, saídas e momentos que serão sempre lembrados;

- Ao meu amigo Aguinaldo por ter disponibilizado várias de suas horas em reuniões, pela grande força e ajuda que sempre destes;

- Ao professor Adauto de Souza pelas ótimas conversas e por todo aprendizado que certamente levarei para vida;

- Ao professor Anderson Barbosa por toda disponibilidade e atenção em ajudar;

Por fim, agradeço a CAPES pelo apoio financeiro, que foi sem dúvida de fundamental importância.

"Não adianta olhar pro céu, com muita fé e pouca luta."

—GABRIEL O PENSADOR

RESUMO

O estudo dos dispositivos eletrônicos mesoscópicos é um assunto que vem atraindo a atenção de vários grupos de pesquisa, tanto teóricos quanto experimentais. Existem dois exemplos experimentais relevantes nesse sentido, o gás de elétrons bidimensionais e o bilhar quântico de grafeno de camada única. A principal diferença entre os dois sistemas é o comportamento da função de onda dos elétrons dentro deles. O primeiro é descrito pela equação de Schrödinger e o segundo é descrito pela equação de Dirac sem massa. Esse último em particular, devido a sua simetria de sub-rede, apresenta interessantes e peculiares fenômenos físicos de transporte não observados em outros sistemas.

Nesta tese, analisamos o comportamento de alguns dos fenômenos universais de transporte de elétrons nos chamados sistemas mesoscópicos. Tais fenômenos são estudados no contexto de espalhamento quântico seguindo o modelo hamiltoniano, onde, para isso, seguimos a fórmula de Mahaux-Weidenmüller para o caso particular de uma cavidade caótica acoplada a dois terminais - guias de onda. Nesse sentido, foi comparado os chamados Bilhares de Schrödinger, não-relativístico, e de Dirac, relativístico, com respeito às propriedades físicas de transporte como condutância e potência do ruído de disparo com suas respectivas variâncias, além dos termos de interferência quântica.

O modelo hamiltoniano Mahaux-Weidenmüller relaciona o espalhamento quântico de canais de propagação eletrônicos por uma cavidade caótica, ou ponto quântico, com um número muito grande de ressonâncias, a uma matriz de espalhamento S, onde as amplitudes das ondas incidentes são relacionadas com as amplitudes das ondas de saída da cavidade de interação. Através do formalismo de Landauer-Büttiker, é possível relacionar as propriedades de transporte à matriz de espalhamento. O modelo consiste em gerar matrizes de espalhamento seguindo a teoria de matrizes aleatórias. Além do comparativo entre os bilhares, foi possível relacionar o bilhar de Dirac caótico, devido a simetria de sub-rede, ou simetria quiral, presente em estruturas como a do grafeno, com o paradoxo de Klein.

Muitos dos resultados relativos às propriedades de transporte desses bilhares são conhecidos apenas para contatos ideais, ou seja, quando o acoplamento dos guias com a cavidade de interação é ideal - sem barreira de potencial. Fizemos um estudo completo tanto para contatos ideais como para não ideais, onde mostramos resultados universais que revelaram comportamentos anômalos na condutância, na a potência do ruído de disparo e nas respectivas distribuições de autovalores. Em particular, demostramos o paradoxo de Klein nas transições de supressão/amplificação dos observáveis de transporte do bilhar de Dirac caótico.

Palavras-chave: Física Mesoscópica, Paradoxo de Klein, Paradoxo de Klein em Grafeno, Transporte Eletrônico Quântico, Simulação Numérica.

ABSTRACT

The research on mesoscopic electronic devices has attracted the curiosity of many theoretical, as well as experimental, research groups. There are two meaningful experimental examples, the two-electron electron gas and the quantum billiard single-layer graphene. The main difference between them is the behavior of its electron's wave function. Schrödinger's equation describes the former, and Dirac's massless equation describes the latter. Particularly, the latter, due to its subnetting symmetry, exhibits interesting and peculiar transport physical phenomena not observed in others.

In this thesis, we analyzed the behavior of some universal electron transport phenomena in mesoscopic systems. Such events are usually studied under the light of quantum scattering following the Hamiltonian model, to that end, we used Mahaux-Wiedenmüller formulation to the special case of a chaotic cavity coupled to two terminals - waveguides. In this context, we compared the so-called Schrödinger's, non-relativistic, and Dirac's, relativistic, Billiards with respect to transport physical properties, such as conductance and shot-noise power and its respective variances, in addition to the quantum interference terms.

The Mahaux-Weidenmüller Hamiltonian Model relates the quantum scattering of electronic propagation channels through a chaotic cavity or quantum dot with a large number of resonances with a scattering matrix S, which associates the incident waves to the output waves amplitudes from the interaction cavity. We were able to link the transport properties to the scattering matrix through the Landauer-Büttiker formalism. The model generates scattering matrices following the random matrix theory. Besides the billiards comparison, we were able to associate Dirac's chaotic billiard with Klein's paradox, because of the subnetting symmetry, also called chiral symmetry, found in structures like the graphene's.

Many of the previous results concerning the transport properties of these billiards are known only for ideal contact, that is, the coupling of the guides and the interaction cavity is ideal - without a potential barrier. Our study, however, is complete, with both ideal and non-ideal contacts. We show universal results that revealed abnormal behaviors in the conductance, in the firing noise power and in the respective distributions of eigenvalues. Particularly, we demonstrate Klein's paradox in the suppression/amplification transitions of the observables' transport in chaotic Dirac billiards.

Keywords: Keywords: Mesoscopic Physics, Klein's Paradox, Klein's Paradox in graphene, Quantum Electronic Transport, Numerical Simulation.

SUMÁRIO

Capítulo 1—Introdução 1

1.1 Nesta Tese . . . 7
1.1.1 Capítulo 2 . . . 7
1.1.2 Capítulo 3 . . . 7
1.1.3 Capítulo 4 . . . 8
1.1.4 Capítulo 5 . . . 8
1.1.5 Capítulo 6 . . . 9
1.1.6 Capítulo 7 . . . 9

Capítulo 2—Fundamentos Teoricos 10

2.1 Física Mesoscópica . . . 10
2.1.1 Comprimento Característicos e Regimes de Transporte . . . 10
2.2 Fenômenos em Sistemas Mesoscópicos . . . 12
2.2.1 Gás de Elétrons Bidimensional . . . 13
2.2.2 Pontos Quânticos . . . 14
2.2.3 Ponto de Contato Quântico . . . 15
2.2.4 Quantização da Condutância . . . 18
2.2.5 A Fórmula de Landauer . . . 20
2.2.6 Localização Fraca . . . 22
2.2.7 Flutuação Universal da Condutância . . . 23
2.2.8 Flutuações da Corrente e Potência do Ruído de Disparo . . . 25
2.3 Bilhar e Caos . . . 26
2.3.1 Bilhar de Schrödinger . . . 27
2.3.2 Bilhar de Dirac . . . 28

Capítulo 3—Efeitos de Interferência 31

Capítulo 4—Teoria de Matrizes Aleatória e Formalismo de Espalhamento 36

4.1 Teoria de Matrizes Aleatórias . . . 36
4.1.1 TMA para Classe de Simetria de Wigner-Dyson . . . 38
4.1.1.1 Ensembles Gaussianos: . . . 38
4.1.2 TMA para Classe de Simetria Quiral . . . 41
4.1.2.1 Ensembles Gaussianos: . . . 41
4.2 Teoria de Espalhamento . . . 43

4.2.1 Matriz de Espalhamento 43
4.2.2 Fórmula de Landauer-Büttiker 47
4.2.3 Fórmula de Mahaux-Weidenmüller 49

Capítulo 5—Abordagem Mahaux-Weidenmüller 57

5.1 Bilhar de Schrödinger 57
5.1.1 Geração Numérica 59
5.2 Bilhar de Dirac 62
5.2.1 Geração Numérica 63

Capítulo 6—Resultados 65

6.1 Resultados Analíticos 65
6.1.1 Sem Barreira de Potencial 66
6.1.1.1 Bilhar de Schrödinger 66
6.1.1.2 Bilhar de Dirac 67
6.1.2 Com Barreira de Potencial 68
6.1.2.1 Bilhar de Schrödinger 68
6.1.2.2 Bilhar de Dirac 68
6.2 Resultados Númericos 68
6.2.1 Sem Barreira de Potencial 69
6.2.1.1 Bilharde Schrödinger 69
6.2.1.2 Bilhar de Dirac 70
6.2.2 Com Barreira de Potencial 74
6.2.2.1 Bilhar de Schrödinger 74
6.2.2.2 Bilhar de Dirac 78
6.2.2.3 Comparação entre os Bilhares 81

Capítulo 7—Conclusões 85

LISTA DE FIGURAS

1.1 Tunelamento em grafeno (painel superior), e em semicondutores convencionais (painel inferior). 3

1.2 Formas alotrópicas do carbono. (a) Diamante, (b) Grafite, (c) Fulereno e (d) Nanotubo de carbono (onde é possível visualizar a geometria de um nanotubo de parede única como o enrolamento de uma folha de grafeno). 5

2.1 Ponto quântico difusivo (a) balístico (b). No regime difusivo, os elétrons sofrem várias colisões com as impurezas da amostra ao atravessar o ponto quântico enquanto no regime balístico, por existir poucas impurezas, os elétrons se movem sem sofrer colisões. Os elétrons podem se chocar várias vezes nas fronteiras do ponto antes de atravessá-lo. 12

2.2 (a) Junção de amostras de AlGaAs e GaAs para formação de um gás de elétrons bidimensional. Mostramos o perfil das bandas de condução e valência entre a junção (b) antes e (c) depois da transferência de carga. . 14

2.3 Em a), um ponto quântico construído sobre $2DEG$ e 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. 15

2.4 a) Representação de um ponto de contato quântico. Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada de forma que ocorra o fluxo de elétrons da esquerda para direita. b) Imagem de um ponto de contato quântico obtida através de microscopia eletrônica de varredura. O cinza mais escuro representa um gás de elétrons bidimensional. O cinza mais claro é a constrição impenetrável de largura L e abertura de tamanho W. 15

2.5 Representação a) de um guia de onda retangular com potencial nulo no interior e infinito nas paredes e no exterior e b) sua visualização lateral em duas situações: quando a altura a e a largura b do guia são constantes (imagem superior) e variáveis (imagem inferior). Em c), as linhas tracejadas representam os canais fechados e as sólidas, os canais abertos. 16

2.6 Reservatório macroscópico em equilíbrio termodinâmico nas extremidades de um condutor mesoscópico, caracterizado pelo seu potencial eletroquímico. 19

2.7 Condutância do ponto de contato quântico como função da voltagem de porta aplicada na constrição. Observamos o comportamento tipo escada da condutância, revelando a quantização da condutância em semicondutores. 20

2.8 Figura com o esquema do modelo de Landauer para transporte quântico. 21

2.9 Resultado numérico da flutuação da condutância normalizada em e^2/h como função da mudança de fase no modelo teórico de distribuição de impurezas. Percebemos que a média da condutância $\langle G \rangle$ é menor que a condutância clássica G_{CL}, mostrada na figura para comparação. 23

2.10 À esquerda, temos a condutância em função do campo magnético B para um fio de ouro quase-unidimensional. À direita, vemos a distribuição da condutância $P(G)$ construída a partir da Figura anterior. Percebemos que $P(G)$ é gaussiana em torno da média $\langle G \rangle$ e dominada, essencialmente, pela variância $var(G)$ 24

2.11 a) Flutuação da condutância como função do campo magnético perpendicular aplicado em um fio de ouro de 310 nm de comprimento e 25 nm de largura, a $T = 10mk$. (b) Condutância G medida em uma cavidade balística caótica como uma função de k_F . A condutância cresce com o aumento de k_F , mas a magnitude da flutuação é constante da ordem de e^2/h. 24

2.12 (a) O movimento de uma só bola em uma mesa retangular não é caótico. No entanto, (b) a adição de uma segunda bola altera fundamentalmente o movimento da primeira, mesmo que ela seja fixa. Em geral, um bilhar qualquer, mesmo com uma forma pouco irregular, será caótico (c). 27

2.13 Em (a), a rede bipartida é hexagonal, em forma de um favo-de-mel. Em (b) a rede é irregular e em (c) não há bipartição. Sítios de uma sub-rede "A" são representados por bolas pretas, enquanto que sítios da sub-rede "B" são representados por bolas brancas. As bolas cinzas representam os sítios que não pertencem a nenhuma sub-rede. 28

2.14 Ilustração do Bilhar de Dirac caótico com estrutura rede favo-de-mel similar a estrutura hexagonal bipartida do grafeno. (Esquerda) micrografia eletrônica de um transistor de grafeno. O pequeno ponto quântico (*Quantum dot*) no centro é conectado a regiões de contato através de estritas constrições. (Direita) esquema mostrando um hipotético transistor baseado em um ponto quântico de grafeno. 29

2.15 Estrutura de banda da mono-camada de carbono. As bandas de valência ($E < 0$) e de condução ($E > 0$) formam os cones. Os cones marcados por pontos brancos (pretos) são conectados por vetores da rede recíproca, então eles são equivalentes. 30

3.1 Representação esquemática de possíveis trajeórias de um elétron viajando de $\vec{r}_1$ até $\vec{r}_2$ de modos eletrônicos dentro de uma amostra. Em (a) temos trajetórias sem interseções (difuso) entre os pontos. Em (b) Trajetórias que se cruzam, com auto-interseção. 32

3.2 Caminho óptico de uma onda ao sofrer inúmeras reflexões entre dois planos parcialmente refletores. Após cada reflexão a onda adquire efetivamente uma fase $e^{i\delta/2}$. A intendidade da onda incidente é $I_0 = |E_0|^2$ e o comprimento de onda no meio é λ. 33

3.3 Franjas de interferência devido às múltiplas reflexões sofridas pela onda incidente entre os planos refletores. Mantivermos $T_2 = 0,5$ e variamos T_1. A linha tracejada refere-se a média sobre a fase acumulada com $T_{0,4}$ e $T_2 = 0,5$. 35

4.1 Cavidade caótica bidimensional conectada a L guias de onda ideais. As setas dentro dos guias indicam as ondas entrando a_n e saindo b_n da cavidade. 44

4.2 Cavidade $2D$ acoplado a dois guias semi-infinito. 46

4.3 Condutor conectado a dois reservatório de elétrons por meio de guias ideais. 47

4.4 Espalhamento de modos propagantes em guia semi-infinito causado na região de interação. 49

5.1 Visão esquemática de um ponto quântico. Cada guia é caracterizado pelo número de canais de espalhamento abertos N_1 e N_2, associados respectivamente aos guias um e dois. Γ_1 e Γ_2 são as transparências das barreiras. As simetria físicas da dinâmica dos elétrons na cavidade caótica estão rotuladas pela simetria β do sistema. 57

6.1 Média e variância da condutância para o bilhar de Schrödinger caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as linhas são resultados analíticos das Eq's. (6.4) e (6.5) 69

6.2 Média e variância da potência do ruído de disparo para o bilhar de Schrödinger caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as linhas são resultados analíticos das Eq's. (6.6 $\rightarrow$ 6.9) . . 70

6.3 Média e variância da condutância para o bilhar de Dirac caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as linhas são resultados analíticos das Eq's. (6.10) e (6.11). 71

6.4 Média e variância da potência do ruído de disparo para o bilhar de Dirac caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as lindas são resultados analíticos da Eq. (6.12). 71

6.5 Gráfico comparando os resultados da simulação numérica e do resultado exato do termo de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=4}$) fraca da condutância para os Bilhares de Schrödinger (a e b) e de Dirac (c e d) em função do número de canais N. Resultado numérico obtido com 10^6 realizações da matriz S. 72

6.6 Média da condutância em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Schrödinger, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos, e as linhas são resultados analíticos, válidos no limite $N \gg 1$, equação (6.13). 74

6.7 Média da potência do ruído de disparo em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Schrödinger, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos, e as linhas são resultados analíticos, válidos no limite $N \gg 1$, equação (6.14). 75

6.8 Gráfico da variância da condutância (lado esquerdo da figura) e da variância da potência do ruído de disparo (lado direito) em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Schrödinger, com terminais simétricos $N = 1$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos, e as linhas é o resultado analítico via equação (6.15). 76

6.9 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar de Schrödinger simétrico dos ensembles de Wigner-Dyson, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $G_0 = 2e^2/h$ com 10^4 realizações da matriz S. 77

6.10 Distribuição da potência do ruído de disparo $P(P)$ para o bilhar de Schrödinger simétrico dos ensembles de Wigner-Dyson, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $P_0 = 4e^2V/h$ com 10^4 realizações da matriz S. 77

6.11 Média da condutância em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Dirac, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos. 78

6.12 Média da potência do ruído de disparo em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Dirac, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos. 78

6.13 Gráfico da variância da condutância (lado esquerdo da figura) e da variância da potência do ruído de disparo (lado direito) em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Dirac, com terminais simétricos $N = 1$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos. 79

6.14 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar de Dirac simétrico dos ensembles quirais, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $G_0 = 4e^2/h$ com 10^4 realizações da matriz S. 80

6.15 Distribuição da potência do ruído de disparo $P(P)$ para o bilhar deDirac simétrico dos ensembles quirais, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $P_0 = 8e^2V/h$ com 10^4 realizações da matriz S. 81

6.16 Resultados numéricos da Média da Condutância do Bilhar de Schrödinger, (a), (b) e (c), e do Bilhar de Dirac, (d), (e) e (f), em função da barreira de potencial Γ para o regime $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 82

6.17 Resultados numéricos da Média da Potência do ruído de disparo do Bilhar de Schrödinger, (a), (b) e (c), e do Bilhar de Dirac, (d), (e) e (f), em função da barreira de potencial Γ para o regime $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 82

6.18 Gráfico da simulação numérica do termo de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) fraca da condutância para os Bilhares de Schrödinger (a e b) e de Dirac (c e d) em função da barreira de potencial Γ no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$. 83
6.19 Gráfico da simulação numérica do termo de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) fraca da potência do ruído de disparo para os Bilhares de Schrödinger (a e b) e de Dirac (c e d) em função da barreira de potencial Γ no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$. 84

LISTA DE TABELAS

4.1 Tabela de Cartan para espaços simétricos. Mostra a relação entre cada classe de simetria e o tipo de de simetria que o sistema poderá apresentar. As simetrias fundamentais que classificam cada tipo de ensemble são: simetria de reversão temporal (SRT), partícula-buraco (SPB) e sub-rede (SSR). **B** é o campo magnético, **SC** representa a supercondutividade do sistema e **SO** a interação spin-órbita. Quebra de simetria temos o valor 0, se a simetria for preservada ± 1. 37
4.2 Classes Wigner-Dyson. 38

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O objetivo central de nossa investigação é o estudo dos fenômenos do transporte de elétrons nos chamados sistemas mesoscópicos. Devido à grande complexidade de se obter resultados exatos para muitos dos sistemas [1, 2, 3], e pela necessidade de se conhecer melhor tais fenômenos, seguimos uma abordagem numérica.

O termo mesoscópico, tem seu prefixo "meso-", do grego, que significa intermediário. É uma expressão que relaciona escalas de comprimento entre o macroscópico e o microscópico. Sendo assim, sistemas mesoscópicos são dispositivos que, devido ao seu caráter microscópico, contemplam aspectos relevantes típicos da mecânica quântica. Por outro lado, uma certa quantidade suficientemente grande de átomos aproxima o sistema do "macro"e torna possível uma descrição estatística do transporte quântico de elétrons em escalas mesoscópicas. Nesse tipo de sistema, onde o regime de escalas é reduzido, escalas da ordem de nanômetros, efeitos ondulatórios dos elétrons são absolutamente relevantes e fundamentais para compreender melhor os fenômenos de transporte quântico. Algumas propriedades desses sistemas possuem a interessante característica de não dependerem, necessariamente, do seu material, estrutura ou da sua composição atômica. Propriedades como essa são chamadas de propriedades universais do transporte quântico.

Esses estudos e tratamentos só foram possíveis graças ao desenvolvimento da mecânica quântica, a partir do século XX. Desde a formulação da equação de Schrödinger, várias aplicações para diferentes tipos de potenciais foram estudadas, como é o caso das barreiras e poços de potencial. Essas soluções permitiram uma maior compreensão dos fenômenos quânticos, os quais acontecem nas escalas atômicas - moleculares. Conceitos como transmissão, reflexão e tunelamento de ondas de probabilidade são cada vez mais estudados e compreendidos graças ao avanço e estudo dos fenômenos de transportes quânticos. Tais conceitos serão detalhados ao longo desta tese.

Em paralelo a este tema, também temos a Teoria da Relatividade Restrita de Einstein, que explica o comportamento da matéria em velocidades próximas a da luz. A equação de Schrödinger explica a Física de processos não relativísticos. E assim, foi necessária a construção da Mecânica Quântica Relativística, que visa cobrir os aspectos destes dois domínios. E desta forma, foram construídas as equações de Klein-Gordon [4] e de Dirac [5]. E através dos mesmos casos resolvidos com a equação de Schrödinger, pode-se analisar e estudar o funcionamento de outros processos como a criação e aniquilação de pares, tunelamento relativísticos, e propriedades das partículas quânticas com spin. É nesse contexto que introduzimos e investigamos os bilhares de Schrödinger (não - relativístico) e de Dirac (relativístico).

Bilhares são modelos matemáticos usados para muitas situações físicas onde uma ou mais partículas se movem livremente, sofrendo colisões, em uma região de interação. O conceito de Bilhar caótico, onde o nome bilhar está relacionando com o jogo bilhar

de sinuca, está intimamente relacionado com os conceitos da Teoria do Caos. Pequenas perturbações nas condições iniciais do sistema levam a grandes mudanças nos resultados esperados. Mesmo o caos sendo inicialmente estudado em sistemas clássicos (fundamentalmente é uma propriedade clássica), podemos entender sistemas caóticos quânticos como um sistema onde a dinâmica clássica correspondente é caótica. Dessa forma, temos dois regimes diferentes, com simetrias diferentes, para ser estudados e comparados - Bilhar de Schrödinger e de Dirac caótico. O Bilhar de Schrödinger, um dispositivo com dimensões muito pequenas, chamado de ponto quântico, onde os elétrons têm uma dinâmica caótica. O Bilhar de Dirac caótico complementa o bilhar de Schrödinger, além de descrever novos dispositivos, cujas funções de onda dos elétrons incidentes são descritas pela equção de Dirac sem massa [6] da correspondente mecânica quântica relativística, em vez da equação de Schrödinger [7, 8].

O estudo dos Bilhares de Dirac caótico nos permite, em comparação com o Bilhar de Schrödinger, ampliar nosso conhecimento sobre os fenômenos de transporte quântico devido a sua diferenciada simetria (simetria de sub-rede). Devido a essa simetria e suas peculiaridades, foi possível investigar e obter novos resultados a esse respeito, o que nos permitiu a publicação do artigo no Annals of Physics intitulado de Klein Paradox in Chaotic Dirac Billiards [9]. Esses novos resultados possibilitaram relacionarmos o Paradoxo de Klein com o Bilhar de Dirac caótico.

O conceito do Paradoxo de Klein foi introduzido por Klein em 1928 [10], pouco tempo após Paul Adrian Maurice Dirac apresentar sua equação homônima. Klein verificou que para um potencial degrau, dependendo do momento da partícula incidente e da altura do degrau, era possível obter uma solução da equação de Dirac com coeficiente de reflexão maior do que 1 e de transmissão negativo, chegando a um paradoxo. Klein obteve a primeira solução do paradoxo, com a ajuda de Pauli [11], usando a consideração que o momento da partícula transmitida deveria ser negativo para satisfazer a relação da velocidade de grupo.

Na equação de Klein-Gordon, para partículas relativísticas de spin nulo, temos o mesmo paradoxo. No trabalho de Hund [12] publicado em 1941, usando o formalismo da Teoria Quântica de Campos, foi apresentado que para um potencial degrau de alta energia pares de partículas eram criadas no espalhamento. Hund chegou a esta conclusão ao analisar a corrente de cargas e, além disso, mostrou que esta corrente é proporcional à integral do coeficiente de transmissão. O formalismo da Teoria Quântica de Campos para partículas de spin 1/2 foi desenvolvido por Hansen e Ravndal [13]. Neste artigo, os operadores de criação e aniquilação foram utilizados para mostrar que existe a criação de pares e que a probabilidade total é conservada.

Por volta de 1980, a solução em termos da criação de pares estava totalmente aceita e foi publicada em livros de literatura básica para Mecânica Quântica Relativística, como citada no livro de Greiner [14], apresentando a equação de Dirac e o formalismo do "Mar de Dirac" ou "Teoria de buracos de Dirac". Um resultado importante dado pela Equação de Dirac vem de sua solução para o elétron livre, pois além de descrever o elétron, ela também apresenta outra solução que descreve partículas idênticas aos elétrons, mas com carga positiva e energia negativa "buracos" e ocupam todos os estados de energia negativa ("Mar de Dirac").

Ainda sobre o paradoxo, artigos mais recentes sobre o tema, como o de Holstein [15], apresentam um tratamento bem detalhado sobre a solução do paradoxo utilizando o formalismo de Teoria Quântica de Campos, como inicialmente apresentado por Hund, Hansen e Ravndal. Mesmo com o paradoxo resolvido, mais física foi proposta posteriormente como o artigo de Calogeracos e Dombey [16], que apontaram outro paradoxo aparente, o tunelamento das partículas sem o amortecimento exponencial como acontece no caso não relativístico. Este fenômeno foi chamado de tunelamento de Klein. Além disso, estes cientistas também mostraram que este tunelamento é um fenômeno que independe da criação de pares.

Na referência [17], relaciona-se o tunelamento relativístico com a teoria de transporte de elétrons, fazendo assim uma correção para a fórmula de Landauer, a qual relaciona a resistência do material com o coeficiente de transmissão do espalhamento por uma barreira do tipo degrau. Com os resultados obtidos, demostraram que o tunelamento é provável, embora altas energias sejam necessárias, o que inviabilizaria a ocorrência desse processo na Física do Estado Sólido. Porém, com a descoberta do grafeno, estudos referentes à sua banda de condução mostram que fenômenos relativísticos podem ocorrer neste material, o que possibilita a verificação experimental da teoria, como proposto por um artigo de Katsnelson, Novoselov, Gleim [18]. Portanto, uma ligação promissora entre os efeitos relativísticos e a Matéria Condensada pode ser feita [19, 20], e o estudo da Física do Paradoxo de Klein torna-se crucial. É nesse sentido que surge o interesse de verificar tal paradoxo, paradoxo de Klein, para sistemas mesoscópicos - um dos objetivos desta tese. Na física da matéria condensada, a resolução do paradoxo pode ser devida a efeitos coletivos [18, 21] ou, como verificamos com nossos resultados [9], devido ao caos provocado pela fronteira de uma região confinada.

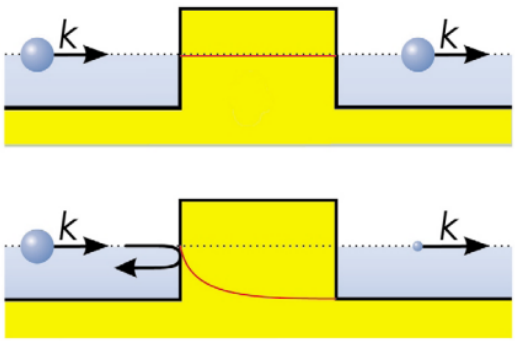


Figura 1.1 Tunelamento em grafeno (painel superior), e em semicondutores convencionais (painel inferior). A amplitude da função de onda dos elétrons (em vermelho) permanece constante no grafeno enquanto decai exponencialmente em semicondutores convencionais. O tamanho da esfera indica a amplitude da onda incidente e transmitida. Figura adaptada de [22].

O Grafeno é o nome dado a uma monocamada de átomos de carbono densamente compactados em uma rede hexagonal bidimensional. Devido as recentes descobertas com relação ao grafeno, o desenvolvimento nesta área de pesquisa tem atraído a atenção de muitos pesquisadores da área da Física, da Química, da Computação, da Biologia, dentre

outras. O Grafeno tem apresentado várias propriedades peculiares: é um material 100 vezes mais forte que o aço [23], devido a ligação carbono-carbono; quase transparente [24]; um excelente condutor elétrico [25] e térmico [26], conduzindo o calor 10 vezes melhor que o cobre, além de ser flexível, resistente, com alta mobilidade eletrônica e boa condutividade térmica. Características que motivam o estudo no que se diz respeito ao transporte de elétrons em estruturas formadas por grafeno - Figura 1.1.

Os elétrons, presentes no Grafeno, que participam do transporte eletrônico, no limite contínuo em baixas energias, podem ser descritos a partir da equação de Dirac. Esta semelhança formal entre as excitações no Grafeno e os férmions de Dirac possibilitou novos testes para alguns fenômenos como: o efeito Hall quântico [27]; o efeito Hall quântico fracionário [28, 29]; e a ausência de localização [30]. Em 2006, Katsnelson, Geim e Novoselov, sugeriram que poderia ser observado no Grafeno um fenômeno relativístico que não é observado na Física de altas energias: o paradoxo de Klein [31] - fenômeno em que elétrons relativísticos penetram em barreiras de potenciais, independente da altura ou largura delas, sendo tal fenômeno verificado por Yong e Kim [32] em 2009. As propriedades eletrônicas do grafeno são descritas pela equação de Dirac da mecânica quântica relativística, ou seja, hamiltoniano de Dirac sem massa [6, 33].

O grafeno, mesmo com sua recente descoberta e principalmente ao conjunto de suas propriedades e características, já apresenta uma ampla aplicação tecnológica [34], como, por exemplo, a combinação da alta condutividade e da pouca absorção de luz para revestimento transparente e condutor, demonstrado com a construção de cristal líquido com base de grafeno [35] e células solares [36]; a alta mobilidade eletrônica do grafeno para aplicação de dispositivos eletrônicos de alta frequência [37]. As diversas estruturas de carbono possuem dimensionalidade que pode variar de $0D$ a $3D$. O carbono é um dos elementos mais intrigantes da Tabela Periódica devido à sua habilidade de formar diferentes tipos de ligações químicas e, assim, levar à formação de materiais com propriedades muito variadas. A habilidade para formar diferentes tipos de ligações químicas resulta em uma grande variedade de formas alotrópicas dotadas de propriedades peculiares. Os alótropos mais conhecidos são grafite e diamante, alguns autores consideram fulerenos e nanotubos como novas formas alotrópicas - Figura 1.2. Todos estes materiais podem ser considerados como estratégicos nas tecnologias atuais e nas próximas décadas. Nesse contexto, o Grafeno é uma das formas alotrópicas do carbono totalmente bidimensional $2D$ composto por anéis hexagonais de átomos de carbono formando uma rede denomiada tipo "favo de mel" (honeycomb lattice). O nome Grafeno tem origem na grafite mais o sufixo -ene.

Além de todas as propriedades eletrônicas peculiares do grafeno, descritas nos parágrafos anteriores, podemos citar outra propriedade única, que o torna interessante do ponto de estudos da área de física de partículas elementares. Nos planos de grafeno, os elétrons se movimentam a velocidades extremamente altas, e podem executar o movimento balístico ao longo de distâncias muito grandes, isto é, os elétrons podem percorrer grandes distâncias no grafeno sem sofrerem nenhum evento de espalhamento com outros elétrons. A velocidade eletrônica é independente da energia, ou seja, os elétrons se movem como se fossem ondas de luz; de modo que os elétrons se comportem como se fossem partículas de massa praticamente nula, por essa razão são chamados de férmions de Dirac sem massa. Inspi-

rando assim o estudo e entendimento dos fenômenos de transporte pelo Bilhar de Dirac caótico. Tal propriedade de transporte foi comprovada por meio de experimentos de efeito Hall Quântico [27].

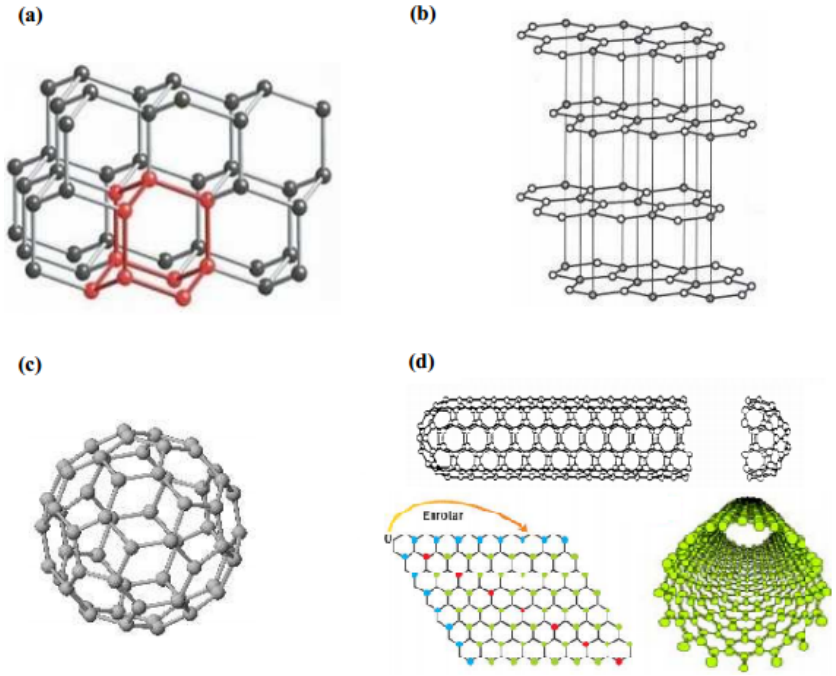


Figura 1.2 Formas alotrópicas do carbono. (a) Diamante, (b) Grafite, (c) Fulereno e (d) Nanotubo de carbono (onde é possível visualizar a geometria de um nanotubo de parede única como o enrolamento de uma folha de grafeno). Figura adaptada de [31].

Apesar de todos os avanços científicos conquistados em torno do grafeno, em tão pouco tempo, ainda existe muito a ser compreendido, principalmente, com respeito as propriedades eletrônicas. A compreensão dos fenômenos de transporte é essencial para a fabricação de dispositivos eletrônicos. Nossa contribuição é proporcionar uma investigação teórica que permita compreender melhor os fenômenos de transporte próximo ao nível de Fermi, elucidando os efeitos reais de parâmetros na estrutura do grafeno.

Muitos dos resultados dos fenômenos de transporte quântico em sistemas mesoscópicos como condutância e potência do ruído de disparo por exemplo, fenômenos esses que serão explicitados e discutido bastante durante esta tese, já são bem conhecidos e difundidos na literatura principalmente para o Bilhar de Schrödinger com contados ideais. Entendemos por contados ideias quando o acoplamento entre a cavidade de interação e o guia de onda é feito de forma ideal, ou seja, sem barreira de potêncial entre eles. Poucos resultados são conhecidos para contatos não ideais - tanto do Bilhar de Schrödinger e principalmente para o Bilhar de Dirac caótico. Uma das contribuições do presente trabalho foi estender os resultados para contatos não ideais, onde a maioria desses resultados são novos na literatura - contribuindo assim de forma direta para um maior entendimento dos fenômenos físicos de tais sistemas.

Alguns dos resultados analíticos usados neste trabalho, principalmente para se poder comparar com alguns resultados obtidos via modelo computacional, foi obtido via método diagramático. Nesse sentido destacamos um em especial, dada pela Equação (6.12). Trata-se de um resultado analítico novo, artigo publicado no Physical Review B [38], intitulado de Shot noise on chaotic chiral devices, obtido via método diagramático - onde demos suporte computacional para sua obtenção. Devido a isso, e também pelo fato de ser um método bastante estudado e utilizado pelo grupo de pesquisa em sistemas mesoscócipos da UFPB, é importante elucidar alguns conceitos introdutórios referentes ao método.

O método diagramático foi proposto por Brouwer e Beenakker [39] para calcular os observáveis físicos de transporte como a condutância através do Bilhar de Schrödinger caótico, isto é, quando a função de onda da partícula é descrita pela equação de Schrödinger. E tem se apresentado como uma boa opção, principalmente quando se necessita estudar sistemas com multiterminais. Este método consiste em representar funções compostas por elementos da matriz unitária na forma de diagramas, cujo objetivo é integrar sobre o grupo unitário $\mathcal{U}(N_T)$. A partir deste método diagramático foi obtido a média e a variância da condutância e da potência do ruído de disparo do transporte eletrônico no Bilhar de Schrödinger para todos os ensembles da classe de Wigner-Dyson. Obtendo resultados exatos para média da condutância, as flutuações universais da condutância assim como também para a potência do ruído de disparo.

Alguns dos resultados, como média e variância da condutância, para o caso sem barreira de potencial, foram obtidos recentemente via método diagramático para o bilhar de Dirac [40]. Foi utilizado uma extensão do método diagramático, que consiste em decompor a matriz de espalhamento em produtos de matrizes ortogonais para realizar estudos sobre o Bilhar de Dirac. A decomposição das matrizes é de acordo com a simetria do ensemble: matriz ortogonal, matriz unitária e por fim uma matriz simplética. Para obter os resultados, foi necessário introduzir uma extensão do método diagramático de integração sobre o grupo unitário, pois o método usual não pode ser usado diretamente para calcular médias sobre os grupos ortogonais. Esses resultados, onde foram determinados exclusivamente pelo método diagramático, foram utilizados, dentre outros resultados encontrados na literatura a respeitos dos Bilhares, como forma de verificação e comparação com os resultados numéricos gerados pelo modelo computacional. Tal modelo computacional empregado, bem como todos os aspectos para sua geração numérica será explicitada durante esta tese. Conceitos mais detalhados sobre o método diagramático, bem como sua extensão, pode ser revisto em [39, 41, 42].

Ao longo do trabalho, e mediante a obtenção e a análise de alguns dos resultados obtidos, alguns deles inéditos na literatura, foi possível abranger e analisar o paradoxo de Klein no contexto de sistemas mesoscópicos - mais precisamente em estruturas com simetrias de sub-rede, como é o caso do grafeno. Detalhes e conceitos relevantes e necessários para o entendimento de tais fenômenos de transporte nos Bilhares, bem como o modelo computacional empregado para tais estudos, será discutida ao longo desta tese.

1.1 NESTA TESE

Apresentaremos nessa seção os principais objetivos dos capítulos que serão abordados, além de revelar nossas reais pretensões nesta Tese. De modo geral, estudaremos o problema de espalhamento quântico seguindo uma abordagem puramente numérica através do modelo hamiltoniano, onde para isso seguimos a fórmula de Mahaux-Weidenmüller para o caso de uma cavidade caótica acoplada a dois terminais. Nosso maior interesse é analisar o comportamento do Bilhar de Schrödinger e o de Dirac caótico para contatos não ideais, onde sua análise, até o presente momento, se dá exclusivamente por métodos numéricos, devido à grande dificuldade de se obtê-los analiticamente - Daí nosso interesse em abordar esse assunto. Nosso trabalho se baseia inicialmente em comprovar a eficiência do método numérico, e para isso fizemos o uso, como forma de comparativo, de equações já bem conhecidas na literatura. Posteriormente, comprovado toda eficiência do método numérico, estendemos a abordagem para contatos não ideias. Analisando principalmente os sistemas quando os mesmos saem do regime quântico extremo em direção ao limite semi-clássico. Por fim, relacionamos o paradoxo de Klein com os resultados presentes no Bilhar de Dirac caótico.

Os objetivos de cada capítulo são descritos abaixo.

1.1.1 Capítulo 2

Faremos aqui uma revisão dos principais conceitos a serem abordados durante o decorrer da tese. Iniciamos introduzindo o regime no qual o sistema mesoscópico está inserido. Escalas de tempo e de comprimento são abordadas, de forma a se definir os regimes para o transporte coerente de condutores mesoscópicos.

Fenômenos de transporte são estudados nesses sistemas mesoscópicos, onde a fase do elétron permanece coerente, ou seja, os elétrons se movem sem perder a coerência de fase e com isso efeitos ondulatórios começam a se tornar relevantes mostrando assim fenômenos físicos como quantização da condutância; flutuações universais da condutância; flutuações da corrente e potência do ruído de disparo; dentre outros.

Conceitos como ponto quântico e ponto de contato quântico (PCQ) também são vistos. Modelamos, como forma de entender melhor o PQC, o transporte quântico por analogia a guias de onda com barreira de potencial. Mostramos a fórmula de Landauer, e como ela se relaciona com as propriedades de espalhamento sofridas pelos elétrons no interior de um condutor mesoscópico. O ponto quântico nesse sentido se trata de um exemplo mais simples de um sistema mesoscópico no qual os elétrons têm uma dinâmica caótica.

Vistos os conceitos anteriores, comentamos sobre os Bilhares de Schrödinger e o de Dirac caótico, no qual são base para nosso estudo, e suas simetrias e peculiaridades que tornarão esses sistemas tão importantes.

1.1.2 Capítulo 3

Comentamos de forma mais detalhada sobre efeitos de interferência. Efeitos esse que estão diretamente relacionados com a coerência de fase dos elétrons. Fenômenos de

Localização e Antilocalização fraca são discutidos. Neste capítulo, relacionamos o efeito de interferência quântica com um exemplo da física ótica. Relacionando ondas incidentes em planos parcialmente refletores, onde frações das ondas incidentes são parcialmente transmitidas e parcialmente refletidas. As intensidades dessas ondas transmitidas são relacionadas, em uma analogia direta, com a corrente que atravessa duas junções de tunelamento.

As correções quânticas devido as interferências tem papel fundamental para esta tese. Relacionamos de forma direta muitos dos resultados obtidos relativos a essas correções com o paradoxo de Klein.

1.1.3 Capítulo 4

Iniciamos este capítulo fazendo uma revisão sobre a teoria de matrizes aleatórias (TMA). Veremos seus principais aspectos aplicados ao estudo das propriedades do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos, como em uma cavidade quântica caótica. A TMA é uma ferramenta estatística moderna com várias aplicações dentre elas sistemas que apresentam propriedades universais. Esse fato é uma característica marcante em sistemas que apresentam caos quântico. Abordaremos nesse sentido o Bilhar de Schrödinger e o de Dirac caótico, descrevendo e revisando os conceitos sobre os ensembles Gaussianos. Tal revisão tem papel importante para determinação dos valores da média e variância dos elementos do hamiltoniano da região de interação, isto é, do hamiltoniano que descreve a dinâmica no interior da cavidade.

Será abordado também, e de forma detalhada devido a sua importância, a teoria de espalhamento. É associado o transporte de elétrons através de condutores a uma matriz chamada de matriz de espalhamento (S). Nesse sentido, as amplitudes das ondas que entram no condutor é conectado com as amplitudes das ondas quem saem desse condutor. Levando em consideração o problema proposto por Landauer, mostramos a fórmula de Landauer-Büttiker relacionando propriedades de observáveis de transporte, como a condutância, com a matriz S.

E por fim, afim de construir nosso método numérico, abordado no capítulo seguinte, para o problema de espalhamento quântico para o caso particular de uma cavidade acoplada a dois terminais, mostramos a fórmula de Mahaux-Weidenmüller para o caso geral de múltiplos terminais. Tal modelo fornece uma descrição hamiltoniana e descreve o espalhamento de canais de propagação por um ponto quântico com um número muito grande de ressonâncias, afim de garantir a universalidade dos observáveis.

1.1.4 Capítulo 5

Usamos a fórmula de Mahaux-Weidenmüller para descrever a matriz de espalhamento para uma cavidade acoplada a dois terminais. Tal abordagem chamamos de Modelo Hamiltoniano Mahaux-Weidenmüller ($MHMW$). Todo sistema quântico é descrito por um operador Hamiltoniano que pode ser representado por uma matriz. Para sistemas quânticos complexos, esta matriz é muito complicada e não se conhece todos os seus detalhes. A ideia básica é substituir a matriz hamiltoniana por um membro de um ensemble de matrizes aleatórias consistentes com as simetrias do hamiltoniano que

especifica o problema. Ou seja, fazendo o uso da TMA, já que no interior da cavidade temos um regime de caos quântico, usamos a abordagem hamiltoniana onde uma matriz pertencente ao ensemble gaussiano representa o hamiltoniano da cavidade.

Mostramos separadamente essa abordagem hamiltoniana para ambos os bilhares, visto que as simetrias dos sistemas nos levam a implicações diferentes a respeito da geração numérica do hamiltoniano. Com isso, explicamos de forma detalhada esse processo de geração numérica, destacando as principais diferenças entre os bilhares como por exemplo uma simetria a mais imposta a matriz S do bilhar de Dirac caótico (devido a simetria de sub-rede - SSR).

1.1.5 Capítulo 6

Mostramos e discutimos nesse capítulo todos os resultados obtidos via modelo computacional. Enfatizando sempre as diferenças entre os Bilhares. Começamos explicitando os vários resultados analíticos já conhecidos na literatura a respeitos dos bilhares de Schrödinger e de Dirac caótico para contatos ideais ($\Gamma = 1$), ou seja, sem barreira de potencial. Logo em seguida, afim de aplicar nosso método numérico aos sistemas com contatos não ideais, explicitamos os poucos resultados analíticos conhecidos a esse respeito. Para o bilhar de Dirac em particular, não temos resultados analíticos para contatos não ideais, e com isso obtemos apenas resultados numéricos. Resultados como médias e variâncias da condutância e da potência do ruído de disparo são mostrados, bem como resultados dos termos de localização e anti-localização tanto da condutância como do ruído de disparo tanto para contatos ideais quanto não ideais.

1.1.6 Capítulo 7

Destacaremos aqui uma breve discussão sobre os principais resultados obtidos nessa tese, bem como perspectivas de trabalhos futuros utilizando nosso modelo numérico para a descrição de outros fenômenos inerentes à física mesoscópica.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEORICOS

2.1 FÍSICA MESOSCÓPICA

2.1.1 Comprimento Característicos e Regimes de Transporte

Para caracterizarmos um sistema mesoscópico, precisamos definir as escalas de comprimento e tempo mais importantes e os regimes que estão associados a elas. Podemos ilustrar as várias escalas de tempo e de comprimento analizando, para efeitos práticos, um exemplo canônico de um sistema mesoscópico. Considere portanto uma amostra mestálica de tamanho linear L, mantida a uma temperatura suficientemente baixa [43]. Nessa situação, participam do transporte somente elétrons com energias próximas à energia de Fermi, $\epsilon = (\hbar k_F)^2/2m$, onde k_F é o número de onda de Fermi. Pode-se atingir um regime no qual o comprimento L da amostra seja menor que o comprimento médio (l_e) de espalhamento elástico (caminho livre médio). Tal comprimento é característico da amostra e fornece a distância que o elétron percorre entre dois espalhamentos consecutivos, mantendo sua energia cinética constante. Se $L < l_e$ o regime é chamado balístico, e para o caso em que $L > l_e$ temos um regime difusivo. Em sistemas mesoscópicos os elétrons podem propagar-se sem sofrer espalhamento inelástico (regime balístico) e a fase da função de onda pode manter sua coerência numa escala da ordem do tamanho do sistema, chamada de comprimento de coerência de fase (L_ϕ), se a amostra satisfaz a relação $L < L_\phi$. O transporte coerente é importante para gerar os típicos fenômenos de interferência quântica, como veremos mais adiante. Esses efeitos dependem das escalas fundamentais que são:

Comprimento de Onda de Fermi (λ) : Está relacionado ao nível de Fermi e é definido pela relação $\lambda_F = 2\pi/k_F$. Esta é a menor escala de comprimento variando de alguns angstroms em metais a centenas de angstroms em heteroestruturas semicondutoras.

Caminho Livre Médio Elástico (l_e) : Distância média percorrida pelo elétron antes de ter seu momento inicial destruído por colisões elásticas. Essa importante e elementar escala de comprimento, varia de alguns angstroms em ligas amorfas a uma dezena de mícrons em heteroestruturas semicondutoras e é definida como $l_e = v_F\tau$. Onde v_F é a velocidade do elétron no nível de Fermi, e τ é o tempo de relaxação do momento.

Caminho Livre Médio Inelástico (l_{in}) : Similar ao l_e, mas com colisões inelásticas, $l_{in} = v_F\tau_\phi$, devido ao espalhamento por elétrons, por fônons e com impurezas da amostra. Nesse limite determinamos τ_ϕ, que é o tempo de defasagem (descoerência), ou de quebra

de fase.

Comprimento de Localização Eletrônica (ξ) : A função de onda de uma partícula confinada em uma região deve ser nula nas extremidades da cavidade. A amplitude da função de onda fornece a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em qualquer região do espaço e varia de forma bem particular dependendo do sistema e dos potenciais aos quais a partícula é submetida [44]. O comprimento de localização eletrônica mede a extensão espacial das funções de onda eletrônicas. Estas funções se estendem sobre toda a amostra para condutores metálicos e decaem exponencialmente em isolantes.

Comprimento de Coerência de fase (L_ϕ) : Quanticamente, o estado de uma partícula é definido por sua função de onda, a qual possui uma fase. A fase está relacionada a efeitos de interferência. Assim como o momento pode ser mudado por processos de espalhamento, a fase de uma onda pode mudar por meio de interações com campos ou partículas. Dessa forma, o comprimento de coerência de fase ou comprimento de relaxação de fase como também é conhecido, L_ϕ, pode ser definido como a distância média que o elétron percorre antes de sofrer um espalhamento inelástico, que destrói sua fase inicial e que modifica sua energia. Além disso, ao modificar sua fase inicial, o movimento do elétron torna-se aleatório, de modo que, o seu transporte é dito decoerente. A partir desse comprimento, podemos caracterizar os processos de transporte em condutores mesoscópicos. Efeitos de transporte que dependem da interferência de funções de onda eletrônicas podem ser utilizados para determinar o tempo de descoerência. Portanto, podemos definir L_ϕ em duas condições: $L_\phi = v_F\tau_\phi$, para sistemas com alta mobilidade, ou seja, ($\tau_\phi \sim \tau$), e $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$, para sistema com baixa mobilidade ($\tau_\phi >> \tau$) onde $D = v_F^2\tau/d$ é a constante de difusão, d é a dimensão do gás de elétrons e o movimento dos elétrons, neste último caso, é considerado não balístico, definição que veremos logo em seguida.

Os regimes de transporte podem ser definidos por meio da relação entre o comprimento da amostra L e os comprimentos característicos. Para um condutor mesoscópico típico à baixa temperatura temos $l_e < L_\phi < l_{in}$. Se o comprimento do dispositivo L for muito maior que o comprimento de coerência de fase, este se comporta como um condutor ôhmico. Porém, se for menor, os efeitos de interferência eletrônica tornam-se relevantes. Portanto, podemos definir três regimes, experimentalmente distintos, para o transporte coerente de condutores mesoscópico em termos das escalas de comprimento, como [45]:

Regime Balístico ($\lambda_F < L << l_e$) - Quando os elétrons se deslocam livremente, sem sofrer espalhamento elástico (se movem através da amostra praticamente sem sofrer colisões). Como exemplo, temos as cavidades caóticas de micro-ondas e pontos quânticos, que explicaremos nas próximas seções.

Regime Difusivo ($\lambda_F << l_e << L < L_\phi$) - Neste caso, o elétron sofre diversos espalhamentos elásticos ao percorrer o sistema. Com isso, a onda atravessa a amostra

sem perder sua coerência. É característico de fios quânticos desordenados.

Regime Localizado ($\xi < L < L_\phi$) - O elétron apresenta uma probabilidade menor de percorrer toda a estrutura. Assim, o sistema se comporta como isolante e uma vez que o elétron não sofre deslocamentos relativamente altos, está menos suceptível a espalhamentos.

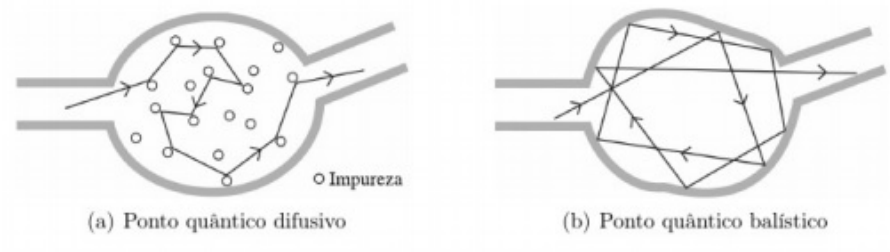


Figura 2.1 Ponto quântico difusivo (a) balístico (b). No regime difusivo, os elétrons sofrem várias colisões com as impurezas da amostra ao atravessar o ponto quântico enquanto no regime balístico, por existir poucas impurezas, os elétrons se movem sem sofrer colisões. Os elétrons podem se chocar várias vezes nas fronteiras do ponto antes de atravessá-lo. Figura retirada de [46]

Nos regimes localizado e difusivo, o transporte é dominado por processos de espalhamentos similares ao caso clássico. No regime balístico (Figura 2.1(b)), todas as dimensões do condutor são menores que os comprimentos característicos dos elétrons de condução, o que torna raro os processos de espalhamento (mesmo que haja, tais colisões serão elásticas e dessa forma há conservação do momento e da energia) e dessa forma os elétrons fluem através do condutor sem alterar seu momento total e a energia total, ou seja, sem perder a coerência de fase. As escalas características de comprimento e de tempo, aqui resumidas, assim como os regimes de transporte, podem ser revistas e revisadas com maiores detalhes nas referências [45, 43, 44, 47].

Os estudos experimentais de fenômenos quânticos em sistemas mesoscópicos estavam mais restritos a sistemas naturais como átomos e núcleos. Pontos quânticos são estruturas artificiais com dimensões bem pequenas, o suficiente para serem regidas pelas leis da mecânica quântica. A vantagem desses sistemas reside na possibilidade de medir suas propriedades de transporte de uma forma direta, tais como a resistência dos pontos de contato, o número de elétrons no ponto, o tamanho e a forma do ponto, tudo sob controle experimental. Além disso, o efeito da quebra de simetria de reversão temporal é medido através da aplicação de um campo magnético. No decorrer do trabalho iremos detalhar melhor esses conceitos.

2.2 FENÔMENOS EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

A física mesoscópica está relacionada a um regime de transporte onde a fase do elétron permanece coerente ao longo do sistema de interesse. Os elétrons se movem sem perder a coerência de fase e esta característica faz o comportamento de amostras me-

soscópicas diferentes dos sistemas ôhmicos, devido á presença de fenômenos ondulatórios que não ocorrem no regime ôhmico. Essa propriedade nos sistemas mesoscópicos revela fenômenos físicos interessantes, como por exemplo: a quantização da condutância, observada experimentalmente quando a resistência de um condutor balístico revelou-se ser diferente de zero e quantificada como função de sua largura [48, 49]; a localização fraca [50, 51]; a flutuação universal da condutância [52]; entre outros fenômenos importantes. Além das condições e possíveis regimes de transporte em sistemas mesoscópicos citados na seção anterior, devemos conhecer a importância das heteroestruturas semicondutoras de GaAs/AlGaAs no que diz respeito à fabricação de dispositivos mesoscópicos. Este sistema é a base de construção dos pontos de contato. Um conjunto de pontos de contato, por sua vez, pode formar uma ou várias cavidades. Este conjunto se chama ponto quântico e veremos isso tudo detalhadamente logo adiante.

2.2.1 Gás de Elétrons Bidimensional

O gás de elétrons bidimensional ($2DEG$) [45] começou a ser muito pesquisado na área de semicondutores entre as décadas 1960 e 1970. Embora o sistema, como um todo, não seja necessariamente bidimensional, o nome bidimensional está associado ao movimento dos elétrons em apenas duas dimensões. Já o termo gás se trata de uma analogia ao comportamento livre dos elétrons. Os elétrons muitas vezes se comportam como partículas não-interagentes, formando um gás ideal bidimensional de elétrons. Embora existam interações elétron-elétron e de elétrons com outros constituintes do sistema, elas podem ser desprezadas se forem sufucientemente fracas [53].

O $2DEG$ mais utilizado na física mesoscópica é a heteroestrutura formada por camadas de Arseneto de gálio (GaAs) e Arseneto de gálio dopado com alumínio (AlGaAs). O AlGaAs fornece elétrons que se acumulam na interface AlGaAs/GaAs, formando uma camada praticamente bidimensional. Esse acúmulo reduz a energia de gap (diferença entre as energias das bandas de valência e de condução). Em geral, essa redução é suficiente para que a energia de Fermi seja maior que a energia da banda de condução. Nesta situação a camada bidimensional deixa de se comportar como isolante e passa a conduzir os elétrons, onde se movem como partículas livres e dependendo da dimensão, sem sofrer choques e sem perder a coerência de fase. E com isso, alcançando o regime mesoscópico. É importante lembrar que se crie uma heteroestrutura com bastante cuidado no intuito de gerar o mínimo de defeitos. É necessário assim conhecer os processos de dopagem, e para uma breve revisão temos a referência [54].

A Figura 2.2(a) mostra o esquema de uma heterojunção onde se forma um $2DEG$. Os elétrons são confinados na interface entre o GaAs e o AlGaAs, onde se movem sem perder sua coerência de fase. Nessa heteroestrutura, o nível de Fermi localiza-se dentro do gap de energia, porém, este gap é maior no AlGaAs que no GaAs. Assim, o nível de Fermi do AlGaAs se encontra acima do nível de Fermi do GaAs (Figura 2.2(b)), fazendo com que os elétrons saltem do AlGaAs, deixando-o carregado positivamente. Isso faz com que surja um potencial eletrostático que curva as bandas de energia. Após atingir o equilíbrio, a energia de Fermi fica constante em toda a heteroestrutura, e na junção aparece um poço de potencial, que confina os elétrons e forma o $2DEG$, conforme

ilustrado na Figura 2.2(c).

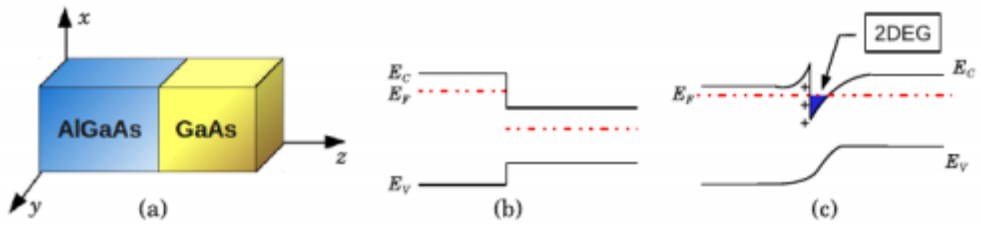


Figura 2.2 (a) Junção de amostras de AlGaAs e GaAs para formação de um gás de elétrons bidimensional. Mostramos o perfil das bandas de condução e valência entre a junção (b) antes e (c) depois da transferência de carga. Figura retirada de [55]

2.2.2 Pontos Quânticos

Os pontos quânticos, são dispositivos, normalmente construidos pela formação do $2DEG$ na região de interface de uma heteroestrutura semicondutora [46], que contêm uma pequena quantidade de elétrons livres. O ponto quântico nada mais é do que uma cavidade de dimensões sub micrométricas [56]. Na Figura 2.3, temos um ponto quântico e sua visão clássica. A coerência de fase do elétron afeta as propriedades eletrônicas do ponto quântico. Além disso, o movimento clássico dentro da cavidade pode ser considerado como caótico em longas escalas de tempo comparadas ao tempo ergódico, τ_{erg}, uma escala de tempo relevante a pontos balísticos [46].

O tamanho e a forma dessas estruturas, além do número de elétrons que elas contêm, podem ser controlados com precisão. A cavidade (centro de espalhamento) se conecta a dois reservatórios de elétrons por meio dos pontos de contato e o transporte ocorre ao se retirar os dois reservatórios do equilíbrio. O fluxo de elétrons é controlado pela voltagem aplicada nos pontos de contato, abrindo ou fechando canais de transporte. Ao entrar na cavidade, o elétron é espalhado diversas vezes ao se chocar com as paredes até sair por qualquer um dos canais de propagação. Assim, existe uma escala de tempo de permanência do elétron no centro de espalhamento $\tau_{\text{permanência}}$. Para que a dinâmica do sistema continue sendo universal, $\tau_{\text{permanência}} >> \tau_{\text{ergódico}}$. Além disso, $\tau_{\text{permanência}}$ precisa ser muito maior que o tempo de Ehrenfest. Ou seja, abaixo (acima) do tempo de Ehrenfest o comportamento do sistema é classico (quântico)). Com isso preservamos as características quânticas da dinâmica, e nessas 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 abordar nos próximos capítulos.

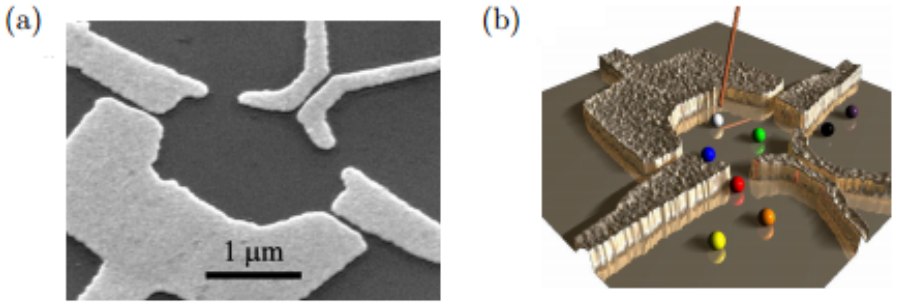


Figura 2.3 Em a), um ponto quântico construído sobre $2DEG$ e b) sua visão clássica. O ponto quântico tem analogia clássica a uma cavidade na qual os elétrons são refletidos nas fronteiras, semelhante a uma mesa de bilhar. Figura retirada de [57].

2.2.3 Ponto de Contato Quântico

O sistema mesoscópico mais simples é o ponto de contato quântico (PCQ), representado na Figura 2.4 por uma imagem obtida através de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e sua ilustração. É similar ao sistema formado pelo confinamento dos elétrons em um guia de ondas retangular de comprimento infinito [54] (como veremos logo adiante). O PCQ é formado por uma constrição com largura L e abertura W. As constrições são formadas por contatos com a aplicação de voltagens apropriadas para controlar o fluxo de elétrons pela abertura. O fluxo de elétrons ocorre na região branca da Figura 2.4(a) e na região mais escura da Figura 2.4(b) de forma balística.

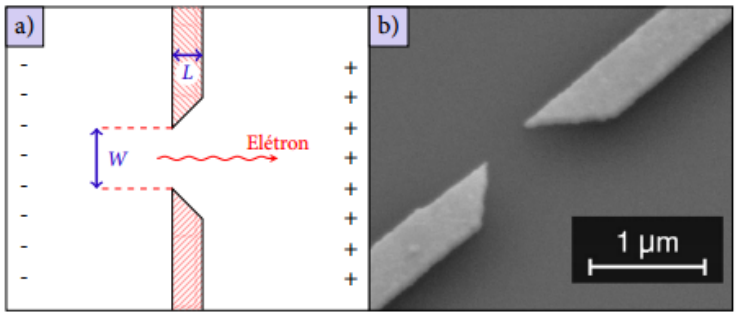


Figura 2.4 a) Representação de um ponto de contato quântico. Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada de forma que ocorra o fluxo de elétrons da esquerda para direita. b) Imagem de um ponto de contato quântico obtida através de microscopia eletrônica de varredura. O cinza mais escuro representa um gás de elétrons bidimensional. O cinza mais claro é a constrição impenetrável de largura L e abertura de tamanho W. Figura baseada e retirada da Ref. [58]

Para entender melhor PCQ, iremos modelar o transporte quântico por analogia a guias de onda com barreira de potencial se baseando na Ref. [54]. Vamos iniciar analisando a Figura 2.5. Consideremos inicialmente um elétron confinado em um guia de ondas retangular e sem barreira de potencial. Considere, por simplicidade, que a altura e a largura do guia de ondas são mantidas constantes e iguais a a e b respectivamente,

e o elétron se desloca livremente ao longo do eixo-x . O elétron está confinado no guia, podemos definir assim o potencial nas nas regiões $|y| < \frac{a}{2}$ e $|z| < \frac{b}{2}$ como sendo $U = 0$ e $U \to \infty$ no restante do espaço, deixando o elétron se mover livremente na direção x. Para essa situação, a solução da equação de Schrödinger fornece a seguinte função de onda associada ao elétron com massa m que se desloca no sentido $+x$:

$$\Psi_{k_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \psi_{k_x}(x)\Phi_{n_x,n_z}(y,z) \tag{2.1}$$

$$\psi_{k_x}(x) = e^{ik_x x} \tag{2.2}$$

$$\Phi_{n_y,n_z}(y,z) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin(k_y^n(y - a/2)) \sin(k_z^n(z - b/2)), \tag{2.3}$$

onde k_x assume valores reais contínuos enquanto $k_y^n = n_y\pi/a$ e $k_z^n = n_z\pi/b$ são valores discretos, pois n_y e n_z assumem apenas valores inteiros não negativos. Assim, o movimento transversal do elétron está quantizado com determinados modos de propagação, também chamadas de canais de propagação e definidos pelo par $n = (n_y, n_z)$. A energia do elétron é então dependente do seu momento e do canal de transporte e escrita por:

$$E_n(k_x) = \frac{(\hbar k_x)^2}{2m} + E_n; \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_y^2}{a^2} + \frac{n_z^2}{b^2}\right). \tag{2.4}$$

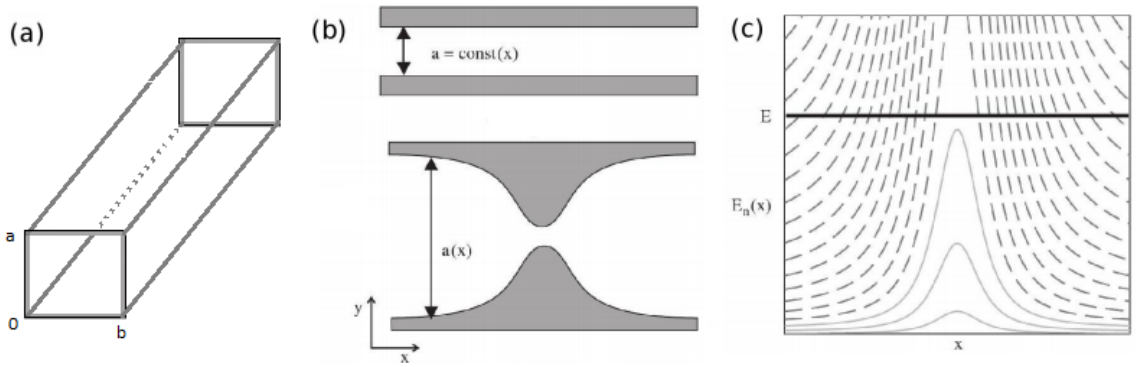


Figura 2.5 Representação a) de um guia de onda retangular com potencial nulo no interior e infinito nas paredes e no exterior e b) sua visualização lateral em duas situações: quando a altura a e a largura b do guia são constantes (imagem superior) e variáveis (imagem inferior). Em c), as linhas tracejadas representam os canais fechados e as sólidas, os canais abertos. Figura retirada da Ref. [54]

O guia de onda que descrevemos é bastante simples e permite que o elétron se propague sempre no mesmo sentido. Mas, é possível adicionarmos uma barreira de potencial em uma região delimitada no interior do guia de ondas. Assim, considere o guia de ondas com a seguinte barreira de potencial:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, \text{ para } 0 < x < d \\ \\ 0, \text{de outro modo} \end{cases} \tag{2.5}$$

A barreira divide o guia de ondas em três regiões e a função de onda associada ao movimento longitudinal do elétron agora é dada pela solução da equação de Schrödinger em cada região:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_x x} + re^{-ik_x x}, & x < 0 \\ Be^{i\kappa x} + Ce^{i\kappa x}, 0 < x < d \\ te^{ik_x x}, x > d \end{cases} \tag{2.6}$$

onde, $k_x = \sqrt{2m(E - E_n)}/\hbar$ e $\kappa = \sqrt{2m(E - E_n - U_0)}/\hbar$. Na região $x < 0$, $\psi(x)$ possui dois termos referentes ao movimento inicial do elétron no sentindo $+x$ e à reflexão no sentindo $-x$. Na região $0 < x < d$, $\psi(x)$ possui dois termos com coeficientes a serem encontrados. A região $x > d$ contém apenas um termo referente à parte transmitida da onda. Os coeficientes r, B, C e t são obtidos pelas condições de Dirichlet. O coeficiente de transmissão $T(E) = |t|^2$ determina a fração da onda transmitida, enquanto que 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

$$T(E) = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa d) + 4k^2\kappa^2}. \tag{2.7}$$

Classicamente, as 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: $T(E) << U_0 \exp\left(-2d\sqrt{2m(U_0 + E_n - E)}/\hbar\right) << 1$.

Considere agora um guia de ondas sem barreira de potencial com seção transversal variável $|y| < a(x)/2$ e $|z| < b(x)/2$, tendo a condição de que para $x \to \pm\infty$ a seção transversal é constante: a_∞ e b_∞. Assim, no meio do guia as paredes vão estreitando e os resultados para um guia de onda ideal não se aplicam. Nesta situação, a visualização lateral do guia de ondas está mostrada na parte inferior da Figura 2.5. Achar a solução da equação de Schrödinger para este guia de ondas é bem mais difícil que para a situação anterior. Podemos, por simplicidade, considerar guias de ondas adiabáticos:

$$|a'(x)|, |b'(x)| << 1 \quad \text{e} \quad a(x)|a''(x)|, b(x)|b''(x)| << 1 \tag{2.8}$$

Sob tais condições, a variação de $a(x)$ e $b(x)$ é muito suave, e localmente as paredes podem ser consideradas planas e paralelas. Assim, também localmente, as variáveis são separáveis e a Equação 2.1 se torna válida também para este caso. A energia de transporte, definida aqui como a energia quantizada, referente ao movimento transversal do elétron, é

$$E_n(x) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_y^2}{a(x)^2} + \frac{n_z^2}{b(x)^2}\right). \tag{2.9}$$

Esse resultado é muito similar ao caso do movimento unidimensional, tendo a pequena diferença 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 Figura 2.5(c) que cada canal possui uma barreira de potencial efetivo ao redor da parte estreita da constrição. Também observamos que quanto maior os números n_y e n_z, maior essa barreira se torna.

As energias dos canais de propagação formam uma barreira de potencial no centro da constrição. Nessa situação, em um determinado canal n, se compararmos a energia E do elétron com a altura máxima da barreira $E_{n,max}$, considerada impenetrável, temos que: Se a $E > E_{n,max}$, ou seja, se a energia do elétron for maior que a da barreira, podemos dizer que o elétron será transmitido. Nesse caso dizemos que se trata de um canal aberto, devido ao elétron poder ultrapassar a constrição. Caso contrário ($E < E_{n,max}$) o elétron será refletido e nesse caso chamamos de canal fechado. Como a energia do canal é crescente com o índice n, há apenas um número finito de canais abertos cujas energias são menores que E.

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 consideramos anteriormente. Como aparentemente o fato de ter considerado o guia de onda adiabático implica em barreiras de potencial aproximadamente clássicas (potencial infinito), podemos então considerar o coeficiente de transmissão como sendo $T_n(E) = 1$ para os canais abertos e $T_n(E) = 0$ para os fechados. Assim, uma das propriedades mais importantes do PCQ é a reflexão praticamente total dos elétrons em canais fechados. Dizemos que os contatos são ideais e definimos por energia de corte ε_n a energia mínima que um elétron deve possuir para ser transmitido através do canal n.

2.2.4 Quantização da Condutância

Uma propriedade importante observada no PCQ é a quantização da condutância [59], observada no $2DEG$ que é formado por uma heteroestrutura semicondutora de $AlGaAs/GaAs$ como já havíamos comentado anteriormente. Para um guia de onda ideal, o vetor de onda não depende de x e, $k_y \to k_y^n$ e $k_y \to k_z^n$. Nesse caso, temos

$$\int \frac{dk_x}{2\pi}\frac{dk_y}{2\pi}\frac{dk_z}{2\pi}(\cdots) \to \int \frac{dk_x}{2\pi}\frac{1}{ab}\sum_n(\cdots). \tag{2.10}$$

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

$$I = 2e\sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) f_n(k_x), \tag{2.11}$$

onde o fator 2 é devido a degenerescência do 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. Para o caso do canal ser fechado ($T_n(E) = 0$) o fator de preenchimento para ondas que se deslocam para direita é igual aos da onda que deslocam para a esquerda ($f_n(k_x) = f_n(-k_x)$) e a contribuição para esses modos se anula na integração. Já para canais abertos ($T_n(E) = 1$) esses fatores são diferentes para sentidos opostos do momento. Para ficar mais claro, iremos entender como os elétrons entram no guia e portanto vamos explicar o conceito de reservatório. Trata-se de um elemento macroscópico em equilíbrio termodinânmico conectado ao sistema mesoscópico que envia e/ou recebe partículas como observado na Figura 2.6. Assim, as partículas provenientes do reservátorio 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

$f_F(E-\mu) = \{1+exp[(E-\mu)/k_BT]\}^{-1}$ é a função distribuição de Fermi. Como os fatores de preenchimento dependem apenas da energia é conveniente introduzir a mudança de variável $k_x \to E$, e assim $v_x = \partial E/\partial k_x$ e $dE = \hbar v_x k_x dk_x$. Dessa forma, a Equação 2.11 pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \sum_{n(\text{abertos})} \int dE[f_1(E) - f_2(E)] \\ &\equiv \frac{2e}{2\pi\hbar} N_{\text{aberto}}(\mu_1 - \mu_2) \\ &\equiv G_0 N_{abertos} V, \end{aligned} \tag{2.12}$$

onde $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$ é a diferença de potencial entre os reservatórios e $G_0 = 2e^2/2\pi\hbar = 2e^2/h \approx 7.7480917 \times 10^{-5}\text{Ohm}^{-1}$ é o quantum de condutância. Com isso, percebemos que a condutância do sitema ($G = I/V$) é quantizada em termos de G_0. Esse fator é formado de constantes fundamentais, sendo assim não dependem portanto das propriedades do material, tamanho da estrutura mesoscópica, geometria, topologia ou de nenhum modelo téorico concreto usado para calcular as propriedades de transporte.

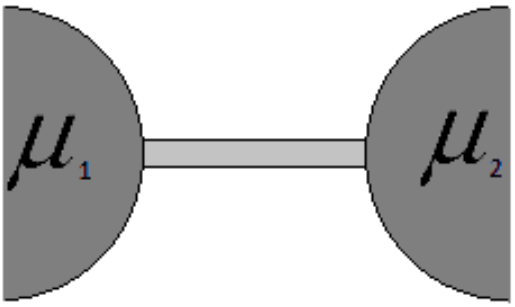


Figura 2.6 Reservatório macroscópico em equilíbrio termodinâmico nas extremidades de um condutor mesoscópico, caracterizado pelo seu potencial eletroquímico.

O transporte de elétrons no $2DEG$ está restrito a duas dimensões e, por isso, é equivalente ao guia de ondas com larguras $b(x) \to 0$. Nesta situação, apenas o primeiro canal de transporte associado à coordenada z é relevante e consideramos apenas os canais $n = (n_y, 1)$ como abertos. A voltagem negativa aplicada aos eletrodos ilustrados na Figura 2.4 modifica $a(x)$ cujo valor mínimo a_{mim} controla o número de canais abertos. Um novo canal $n = (n_y, 1)$ é aberto quando sua energia de corte ε_n passa a ser menor que a energia de fermi do sistema,

$$\varepsilon_n \equiv \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma_{\text{mim}^2}} n_y^2 = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \tag{2.13}$$

Então, o número de canais abertos é dado por

$$N_{\text{abertos}} = [k_F a_{\text{mim}}/\pi]. \tag{2.14}$$

Sendo assim, espera-se que a dependência da condutância em relação à voltagem, que por sua vez está ligado ao número de canais abertos, se assemelhe a degraus de altura G_0. Isso foi medido no experimento pioneiro de medição de condutância em um PCQ em 1988 [59] como mostrado na Figura 2.7 . É interessante notar que esse experimento foi realizado antes da descrição teórica do PCQ.

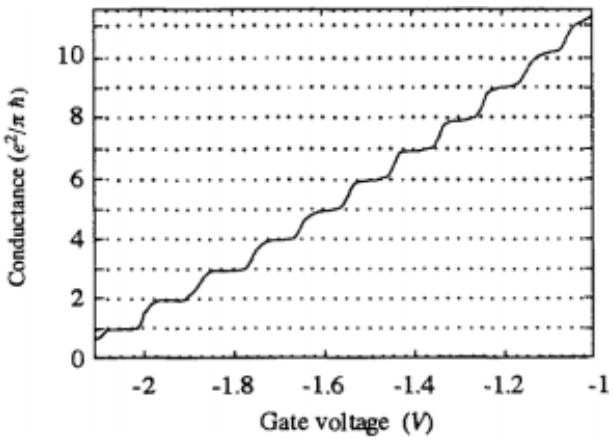


Figura 2.7 Condutância do ponto de contato quântico como função da voltagem de porta aplicada na constrição. Observamos o comportamento tipo escada da condutância, revelando a quantização da condutância em semicondutores. Figura da Ref. [59]

2.2.5 A Fórmula de Landauer

A fórmula de Landauer [60, 61] relaciona a condutância com as propriedades de espalhamento sofridas pelos elétrons ao fluirem através de um condutor mesoscópico. O processo de condução dos elétrons é melhor representado por um processo de transmissão da função de onda que os descreve. Pois, devido as dimensões do sitema, as características ondulaórias se tornam relevantes. As amplitudes das funções de onda desses elétrons estão relacionadas com as correntes no ponto quântico. Consideramos aqui um ponto quântico por se tratar de um exemplo mais simples de um sistema mesoscópico, contendo apenas um centro espalhador. Para dedução da fórmula de Landauer iremos seguir a Referência [45].

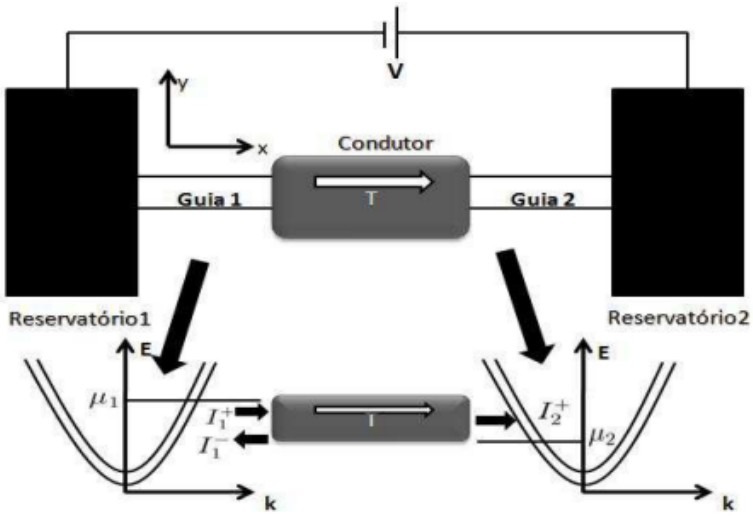


Figura 2.8 Figura com o esquema do modelo de Landauer para transporte quântico retirada de [62].

A Figura 2.8 mostra um condutor conectado a dois reservatórios por meio de guias. Os guias são ideais (balísticos) e carregam cada um N canais de propagação transversais (abordaremos com mais detalhes nos capítulos seguintes). O elétron possui uma certa probabilidade T_n de ser trasmitido no guia n. Assim, por conservação de corrente, a probabilidade de reflexão é $1 - T_n$. Os reservatórios não refletem os canais de propagação e espalhamento, apenas emitem de acordo com o valor do potencial eletroquímico μ. Para o caso em que $\mu_1 > \mu_2$, como mostrado na Figura 2.8, haverá um fluxo de corrente I_1^+ saindo do reservatório 1 dado por

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} N(\mu_1 - \mu_2), \tag{2.15}$$

onde o fator dois refere-se à degenerescência de spin. Como não há reflexão nos reservatórios, o único fluxo no guia 2 será o transmitido do condutor, que em termos de probalididade de transmissão é dado por

$$I_2^+ = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_{n=1}^{N} T_n. \tag{2.16}$$

O guia 1 tem uma parcela do fluxo incidente que é refletido pelo condutor, gerando uma corrente dada por

$$I_1^- = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_{n=1}^{N} (1 - T_n). \tag{2.17}$$

Portanto, a corrente líquida I dada em termos do número de canais e da probabilidade de transmissão é

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \sum_{n=1}^{N} \frac{2e}{h} T_n(\mu_1 - \mu_2), \tag{2.18}$$

Em geral, os T_n variam com o canal. Mas é possível considerá-los iguais se a diferença de potencial entre os reservatórios for pequena, e nesse caso temos $T_n = T \Longrightarrow \sum_{n=1}^{N} T_n = NT$, que simplificando a equação acima temos:

$$I = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2)NT, \tag{2.19}$$

a qual é conhecida como fórmula de Landauer. A condutância do sistema é obtida dividindo-se a corrente que flui do guia 1 para o guia 2, pela tensão aplicada, ou seja,

$$G = \frac{I|e|}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{2e^2}{h} NT. \tag{2.20}$$

2.2.6 Localização Fraca

Como nos sistemas mesoscópicos o elétron se move sem perder a coerência de fase, a interferência nas ondas eletrônicas se manifesta e dá origem a fenômenos ondulatórios, dentre os quais temos a localização fraca. Essas interferências entre trajetórias revertidas no tempo [56] faz com que o valor da condutância flutue e tenha uma correção em relação ao seu valor clássico, Figura 2.9. Para partículas sem spin, essa interferência é construtiva. A fase quântica do elétron na trajetória de retorno à origem é a mesma fase da trajetória revertida no tempo. Desse modo, a probabilidade de reflexão é maior que a de transmissão, ou seja, a condutância é menor que a condutância no limite semiclássico, dada pela lei de Ohm (GCL). Esse fenômeno ficou conhecido como Localização Fraca (LF), originalmente observado em condutores desordenados com dinâmica difusiva. Para partículas com spin, o acoplamento spin-órbita gira o spin dos elétrons e produz uma interferência destrutiva, diminuindo a probabilidade de retorno e causando um aumento na condutância. Esse outro fenômeno ficou conhecido como anti-localização fraca [50, 63]. Uma característica importante do fenômeno de localização fraca é sua universalidade. Este fenômeno depende apenas da simetria de reversão temporal, não tendo dependência de detalhes microscópicos da amostra, como a distribuição de impurezas por exemplo. Pode-se usar experimentos de localização fraca para fazer medidas de comprimento de coerência de fase [46].

Entendemos então que para a condutância, a LF é a correção quântica da lei de Ohm. Dessa forma, no limite semiclássico, a correção de localização fraca (CLF) pode ser dada pela expressão

$$\delta G = \langle G \rangle - G_{CL}. \tag{2.21}$$

onde $\langle G \rangle$ é a média da condutância na presença da simetria de reversão temporal e G_{CL} é o resultado da média da condutância quando a simetria de reversal temporal é quebrada [45], como por exemplo por um campo magnético.

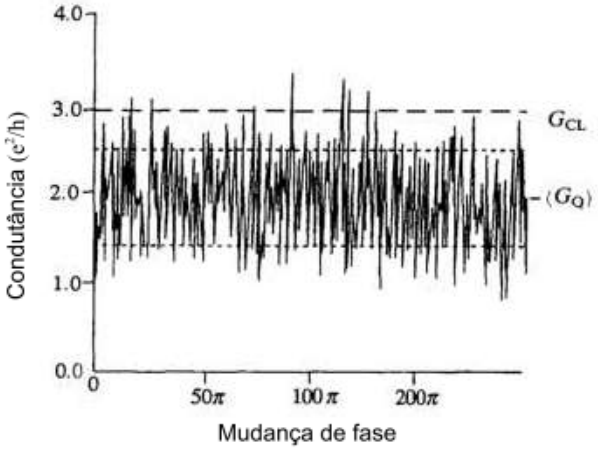


Figura 2.9 Resultado numérico da flutuação da condutância normalizada em e^2/h como função da mudança de fase no modelo teórico de distribuição de impurezas. Percebemos que a média da condutância $\langle G \rangle$ é menor que a condutância clássica G_{CL}, mostrada na figura para comparação. Figura adaptada de [45, 64].

2.2.7 Flutuação Universal da Condutância

As flutuações da condutância, da ordem de e^2/h (observe mais uma vez a forma escada do gráfico 2.7, revelando assim a quantização da condutância), são características universais do transporte quântico no limite de baixas temperaturas. Os cálculos que mostram esse fato foram primeiramente publicados na referência [65]. A interferência quântica leva a significativas mudanças da condutância a baixas temperaturas, mesmo em amostras idênticas, feitas de mesmo material e pelo mesmo processo. Isso se deve ao fato de que, embora as amostras tenham sido feitas da mesma forma, o padrão de impurezas difere, pois não há como controlar essa configuração. Essas flutuações podem também ser observada em uma única amostra variando-se o campo magnético aplicado, uma vez que uma pequena alteração no campo tem um efeito semelhante a mudança de configuração sobre o padrão de interferência [56].

Resultados experimentais que comprovam as flutuações da condutância, para uma amostra específica, em função do campo magnético, podem ser encontrados na referência [66], como podemos ver na Figura 2.10. Observamos nesta figura, que a média, variância e a distribuição da condutância são determinadas através da flutuação da condutância. Porém, é preciso destacar, que em certos limites muitas distribuições de interesse não tem o comportamento gaussiano como o da Figura 2.10(b). Na Figura 2.10(a) podemos ver medidas experimentais que comprovam as flutuações de condutância para um fio de ouro quase-unidimensional em função do campo magnético. A Figura 2.11 mostra a flutuação da condutância (a) em termos do campo magnético e (b) em termos do módulo do vetor de onda de Fermi. Nas referência [56], encontramos que a amplitude das flutuações da condutância, dada pela variância da condutância, é da ordem de

$$var(G) \equiv \left\langle G^2 \right\rangle - \langle G \rangle^2 \sim \left(\frac{e^2}{h} \right)^2 . \tag{2.22}$$

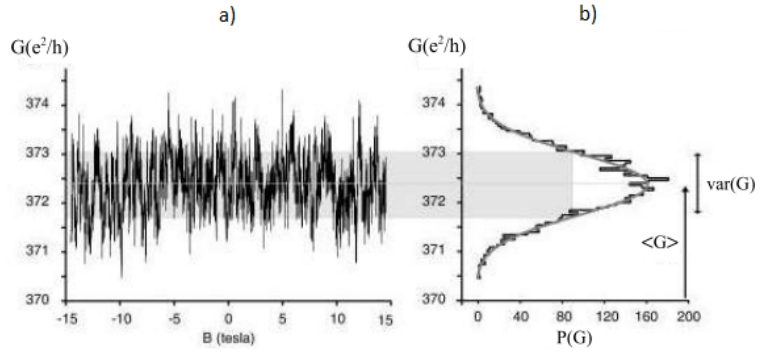


Figura 2.10 À esquerda, temos a condutância em função do campo magnético B para um fio de ouro quase-unidimensional. À direita, vemos a distribuição da condutância $P(G)$ construída a partir da Figura anterior. Percebemos que $P(G)$ é gaussiana em torno da média $\langle G\rangle$ e dominada, essencialmente, pela variância $var(G)$. Figura adaptada de [66].

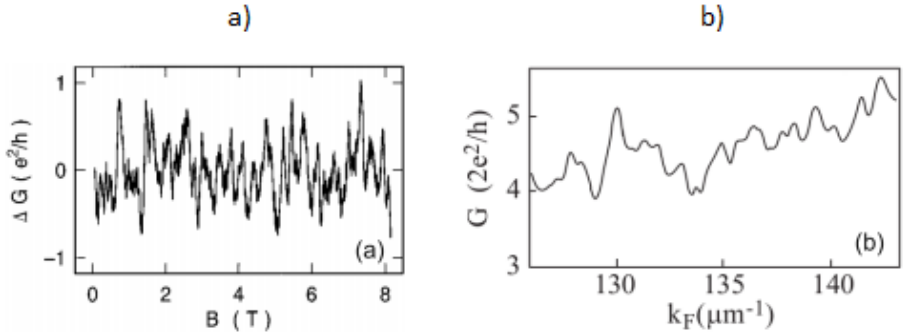


Figura 2.11 (a) Flutuação da condutância como função do campo magnético perpendicular aplicado em um fio de ouro de 310 nm de comprimento e 25 nm de largura, a $T = 10mk$. (b) Condutância G medida em uma cavidade balística caótica como uma função de k_F . A condutância cresce com o aumento de k_F , mas a magnitude da flutuação é constante da ordem de e^2/h. Figuras retiradas respectivamente das referências [56] e [46].

É importante exemplificar teoricamente com o caso de um ponto quântico acoplado idealmente a reservátorios, com N_1 e N_2 sendo os números de canais abertos em cada contato. A média e a variância da condutância são dados por [56]:

$$\langle G\rangle / G_0 = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta}; \tag{2.23}$$

$$var(G/G_0) = \frac{2}{\beta}\frac{N_1 N_2 (N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{(N_1 + N_2 - 2 + 2/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 4/\beta)(N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta)^2}, \tag{2.24}$$

onde β é o índice de simetria da cavidade (o qual iremos abordar nos capítulos seguintes). Agora vamos considerar casos particulares. Considere o regime semiclássico ($N_1, N_2 \gg 1$). Com isso temos:

$$\langle G\rangle / G_0 = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2}; \tag{2.25}$$

$$var(G/G_0) = \frac{2(N_1 N_2)^2}{\beta(N_1 + N_2)^4}. \tag{2.26}$$

Perceba que na equação (2.25), o primeiro termo é a lei de Ohm para a associação em série de dois condutores de condutância N_1 e N_2, em unidades de G_0. O segundo termo é a correção em decorrência da LF, o qual é nulo na ausência de simetria de reversão temporal ($\beta = 2$). Para o sistema simétrico $N_1 = N_2 \equiv N$, temos:

$$\langle G\rangle / G_0 = \frac{N}{2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{1}{4}; \tag{2.27}$$

$$var(G/G_0) = \frac{1}{8\beta}. \tag{2.28}$$

Nesse 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 $N_2 >> N_1$:

$$\langle G\rangle / G_0 = N_1 + \left(N_1 - 1 + \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1}{N_2}; \tag{2.29}$$

$$var(G/G_0) = \frac{2}{\beta} \frac{N_1(N_1 - 1 + 2/\beta)}{N_2^2}. \tag{2.30}$$

Novamente notamos a lei de Ohm presente no primeiro termo da equação (2.29), que se refere à associação de condutores de resistência $1/(N_1 G_0)$. A correção de LF é praticamente desprezível, pois é da ordem de $N_1/N_2 \ll 1$. A equação (2.30) mostra a variância também é praticamente nula comparada à média da condutância. Nessa situação, aumentar N_1 não influencia consideravelmente a estatística da condutância do sistema, pois as flutuações são despreíveis em torno do valor esperado pela lei de Ohm.

2.2.8 Flutuações da Corrente e Potência do Ruído de Disparo

A corrente através de uma nanoestrutura é, em princípio, dependente do tempo sempre que uma voltagem é aplicada, uma vez que consiste de transferências individuais de elétrons. No transporte quântico, existem muitas fontes de ruído sendo a principal delas o ruído térmico, que causa flutuações na ocupação de níveis de energia. A potência do ruído de disparo, por outro lado, está associada a flutuações no transporte quântico de amplitudes de espalhamento e atua mesmo à temperatura nula. A corrente em um dado instante de tempo é, assim, dada por

$$I(t) = \langle I(t)\rangle + \delta I(t), \tag{2.31}$$

onde $\delta I(t)$ é o desvio em relação a média. As flutuações da corrente podem ser caracterizadas pela função de correlação corrente-corrente

$$\langle \delta I(t+t_0)\delta I(t_0)\rangle \,. \tag{2.32}$$

No regime estacionário, a média da corrente não depende do tempo, enquanto a função de correlação depende apenas da diferença temporal t_0. É conveniente analisar as flutuações da corrente no domínio da frequência, em termos da transformada de Fourier da função de correlação

$$P(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} \langle \delta I(t+t_0)\delta I(t_0)\rangle \, dt, \tag{2.33}$$

onde $P(w)$ é denominada como a densidade espectral ou potência do espectro. Sobre as principais fontes de ruído temos:

Ruído Térmico: À temperatura finita, as colisões dos elétrons com as vibrações da rede e impurezas induzem flutuações nas velocidades e posições desses elétrons. A agitação térmica faz surgir uma flutuação da corrente no condutor e está presente em qualquer sistema, independente da natureza de sua corrente [54]. Esse ruído é chamado de ruído Nyquist-Jonnson (caracterizado pelo teorema de Nyquist-Jonnson - um caso particular do teorema flutuação dissipação [67]) ou ruído térmico. A densidade espectral do ruído térmico não depende da frequência (ruído branco), e é dado por [68]:

$$P = 4k_B TG, \tag{2.34}$$

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

Potência do ruído de disparo: Nesse regime, a discretização da carga tem um peso maior nas flutuações de corrente. A equação (2.34) é válida no caso limite em que a diferença de potencial V é nula e a temperatura é finita. No limite oposto, para temperatura nula e V finito, a potência do ruído é completamente determinada pelo ruído de disparo. Ou seja, o ruído térmico é eliminado à temperatura nula, ficando puramente o ruído de disparo. Esse por sua vez é consequência da quantização da carga. Voltaremos a abordar esse assunto com mais detalhes quando introduzirmos os conceitos sobre matriz de espalhamento e fórmula de Landauer-Büttiker.

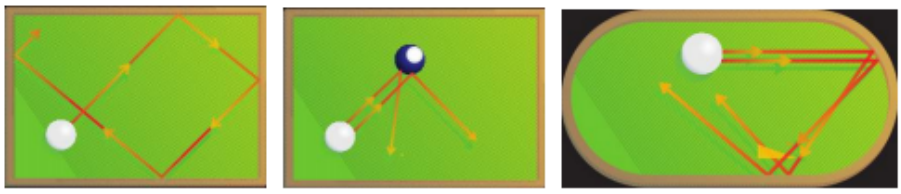
2.3 BILHAR E CAOS

Os primeiros trabalhos sobre sistemas caóticos teve origem há mais de um século com o matemático francês Henti Poincaré [69], nos seus estudos sobre mecânica celeste. Nesta época, a mecânica clássica explicava o movimento dos corpos com espetacular precisão, em particular o movimento das órbitas dos planetas, o que dava um caráter determinista ao universo. Porém, ainda não era bem estabelecido o problema da estabilidade do sistema solar. O trabalho pioneiro de Poincaré, embora não tivesse elucidado a questão da

estabilidade, introduziu os conceitos iniciais da Teoria do Caos, mostrando que pequenas alterações nas condições iniciais de sistemas caóticos levam a grandes mudanças nos resultados esperados, resultando numa dinâmica imprevisível. Mas apesar de ter sido Poincaré o precursor da área, foi apenas a partir da década de 50 que o problema da estabilidade do sistema solar foi melhor compreendido, através dos trabalhos de Kolmogorov, Arnold e Moser. Fundamentalmente o caos é uma propriedade da mecânica clássica, pois, a maioria dos movimentos são altamente sensíveis a pequenas variações no estado inicial do sistema [69] tornando-os imprevisíveis. A sensibilidade em questão, resulta da não linearidade dos sistemas dinâmicos clássicos.

Inicialmente, os sistemas caóticos estudados eram sistemas clássicos, e se caracterizavam matematicamente pelas equações diferenciais não lineares que os descreviam. Uma forma de classificar um sistema como caótico é pelo expoente de Liapunov, que assume valor positivo quando o sistema possui caos e se anula em sistemas regulares. Esta prescrição, porém, não pode ser utilizada na mecânica quântica pois o conceito de trajetória perde o significado. Apenas no limite semiclássico, podemos, eventualmente, fazer uso deste conceito [70]. No entanto, podemos invocar o princípio da correspondência, que afirma que um sistema quântico vai para um sistema clássico no limite em que a constante de Planck vai a zero. Então, uma forma de entender um sistema quântico caótico é vê-lo como um sistema cuja dinâmica clássica correspondente é caótica.

Dentre os sistemas caóticos clássicos mais conhecidos estão os bilhares. Os bilhares são modelos matemáticos para muitas situações físicas onde uma ou mais partículas se movem livremente, sofrendo colisões, em uma região delimitada. Eles são sistemas dinâmicos muito utilizados para o estudo do caos clássico, e também do caos quântico [71, 72, 73]. Portanto são empregados como sistemas modelos para o estudo da dinâmica clássica e quântica. O jogo de bilhar que está mostrada na Figura 2.12 é um exemplo da aparição de caos.



(a) Bilhar retangular. (b) Bilhar de Sinai. (c) Bilhar de Bunimovich.

Figura 2.12 (*a*) O movimento de uma só bola em uma mesa retangular não é caótico. No entanto, (*b*) a adição de uma segunda bola altera fundamentalmente o movimento da primeira, mesmo que ela seja fixa. Em geral, um bilhar qualquer, mesmo com uma forma pouco irregular, será caótico (*c*). Figura retirada da Ref. [69]

2.3.1 Bilhar de Schrödinger

O bilhar de Schrödinger foi abordado nas seções anteriores. Entendemos por bilhar quântico caótico, mostrado na Figura 2.3, um ponto quântico no qual os elétrons tem uma dinâmica caótica (o processo de espalhamento é descrito pela Eq. de Schrödinger). O ponto quântico é um dispositivo eletrônico no qual, entre outras coisas, se pode estu-

dar os obeserváveis físicos como a condutância e o ruído de disparo (esse ultimo veremos com mais detalhes no decorrer do trabalho). Um bilhar quântico é semelhante a um bilhar de sinuca só que com dimensões muito pequenas sendo o mesmo fabricado por elementos condutores delimitados por regiões isolantes e com dimensões espaciais pequenas suficiente para que não percam a coerência de fase no transporte de eletróns através de sua estrutura. O bilhar quântico se comporta como um poço de potencial que confina os elétrons em todas as três dimensões espaciais. Devido à sua pequena dimensão, estas estruturas têm propriedades eletrônicas entre as de semicondutores macroscópicos e aqueles de moléculas discretas em uma região com tamanho da ordem do comprimento de onda de Broglie dos elétrons, alguns nanômetros em um semicondutor. Comportam-se como átomos artificiais, onde o potencial do núcleo é substituido pelo potencial de confinamento. O que resulta numa forte quantização dos níveis de energia.

2.3.2 Bilhar de Dirac

O nome Bilhar de Dirac caótico é devido ao fato de que em certas estruturas com certas simetrias, os quais iremos tratar logo adiante, as funções de onda dos elétrons incidentes são descritas pela equação de Dirac sem massa [6]. Essa estrutura, na qual ocorre transporte de elétrons, são cavidades quânticas caóticas com simetria de sub-rede (SSR), ou simetria quiral. Sendo assim, o bilhar quântico caótico com simetria quiral dá-se o nome de bilhar de Dirac. A SSR, ilustrada na Figura 2.13(a), representa dois grupos idênticos e interconectados, formadas pelas sub-redes de bolas pretas e brancas, de forma que cada sítio de um grupo (de uma sub-rede) está ligada apenas à sítios da outra. Ou seja, a rede é bipartida. Ainda na Figura 2.13, em (a), temos uma rede bipartida hexagonal (rede "favo-de-mel"). Em (b), temos uma rede irregular e em (c) não há bipartição.

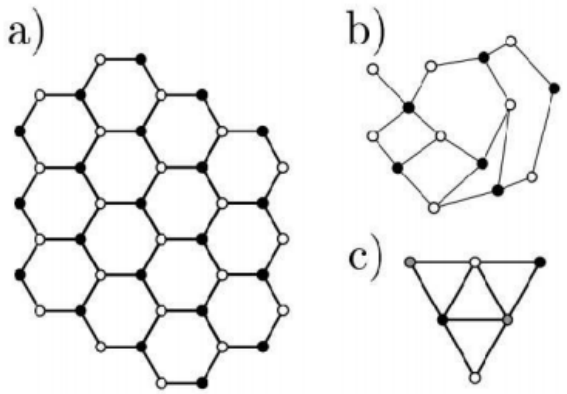


Figura 2.13 Em (a), a rede bipartida é hexagonal, em forma de um favo-de-mel. Em (b) a rede é irregular e em (c) não há bipartição. Sítios de uma sub-rede "A" são representados por bolas pretas, enquanto que sítios da sub-rede "B" são representados por bolas brancas. As bolas cinzas representam os sítios que não pertencem a nenhuma sub-rede. Figura retirada da Ref. [74]

No estudo das propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos, temos algumas

simetrias como a de reversão temporal (SRT), simetria partícula buraco (SPB) e a simetria de sub-rede (SSR) ou quiral [75, 76]. Elas dão origem a dez classes de simetria, que são divididas em três classes de matrizes aleatórias, Wigner-Dyson [77], Quiral [78, 79] e Bogoliubov-de Gennes (BdG) [80]. A distinção entre as classes se dá de acordo com a presença ou ausência de simetrias de reversão temporal e rotação de spin. Iremos ainda detalhar melhor as classes de simetria de Wigner-Dyson e Quiral, jÃ¡ que se trata das classes abordadas em nosso trabalho.

A rede hexagonal, ou favo-de-mel, como mostramos na Figura 2.13(a), é típica de uma rede de grafeno. O grafeno é o nome dado a uma mono-camada plana de átomos de carbono dispostos nesse tipo de rede. O grafeno foi descoberto em 2004 pelos pesquisadores Andre Geim e Konstatin Novoselov [81]. Eles receberam o prêmio Nobel de Física de 2010 por experimentos inovadores com grafeno. Como material, o grafeno é o mais fino já obtido, como também o mais resistente. É quase completamente transparente. As folhas de grafeno são interligadas por meio de forças de Van der Walls, as quais são ligações fracas, que favorecem o deslizamento de um plano sobre o outro mediante a ação de uma força externa [82]. Os portadores de carga do grafeno possuem uma característica singular, eles imitam partículas relativísticas - embora o hamiltoniano microscópico do átomo de carbono não seja relativístico [83]. Com isso, as propriedades eletrônicas do grafeno são descritas pela equação de Dirac da mecânica quântica relativística (hamiltoniano de Dirac sem massa) ao invés da equação de Schrödinger [31].

Também é possível contruir, assim como nas heteroestruturas de $AlGaAs$, cavidades de grafeno. Na figura 2.14, temos a ilustração do bilhar de Dirac. Vários estudos de transporte de elérons nessas estruturas foram e ainda são realizados. Podemos citar estudos do bilhar de Dirac caótico em pontos quânticos de grafeno [7, 8] e o transistor, também baseado em ponto quântico de grafeno [84].

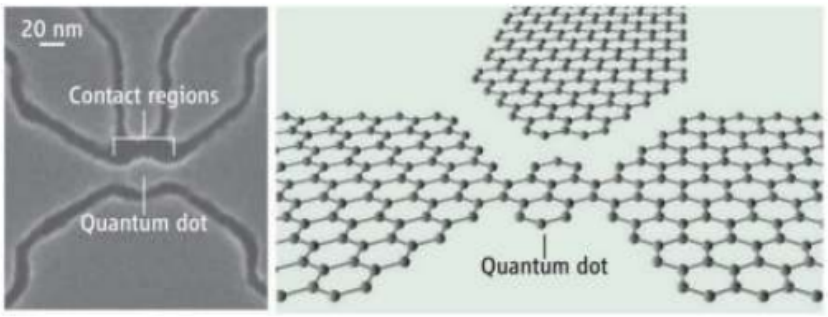


Figura 2.14 Ilustração do Bilhar de Dirac caótico com estrutura rede favo-de-mel similar a estrutura hexagonal bipartida do grafeno. (Esquerda) micrografia eletrônica de um transistor de grafeno. O pequeno ponto quântico (*Quantum dot*) no centro é conectado a regiões de contato através de estritas constrições. (Direita) esquema mostrando um hipotético transistor baseado em um ponto quântico de grafeno. Figura retirada da Ref. [84].

A estrutura do grafeno, é tal como a de um semicondutor de *gap* nulo. Com bandas de energia, a de valência ($E < 0$) e de condução ($E > 0$), se interceptando em dois pontos não equivalentes K e K' comumente chamados de vales ou pontos de Dirac ($\varepsilon = 0$) [85].

A energia de portadores de carga desaparece nesses pontos e dispersa-se linearmente com o momento na sua vizinhança, formando o chamado cone de Dirac [85], como podemos observar na Figura 2.15.

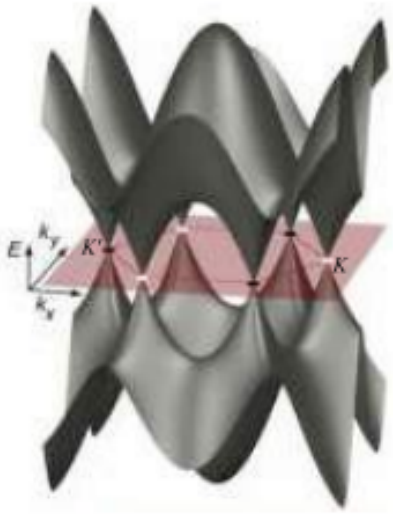


Figura 2.15 Estrutura de banda da mono-camada de carbono. As bandas de valência ($E < 0$) e de condução ($E > 0$) formam os cones. Os cones marcados por pontos brancos (pretos) são conectados por vetores da rede recíproca, então eles são equivalentes. Figura adptada da Ref. [83].

CAPÍTULO 3

EFEITOS DE INTERFERÊNCIA

Iremos abordar neste capítulo, com maiores detalhes em relação ao que foi visto na seção de Fenômenos em Sistemas Mesoscópicos (2.2.6), o fenômeno de Localização e Antilocalização fraca. Começaremos com suas definições e passaremos para modelos existentes que calculam a contribuição da localização para a condutividade na presença de alguns mecanismos de interação. O fenômeno de localização é uma poderosa ferramenta para o estudo dos mecanismos de espalhamento presentes em um sistema.

Como já mencionado, os efeitos de interferência estão diretamente relacionadas com a coerência de fase dos elétrons. Em sistemas desordenados, que apresentam condução metálica, as funções de onda dos elétrons podem sofrer interferência nos defeitos presentes na rede. Múltiplos espalhamentos de ondas coerentes podem ocorrer, e as assinaturas mais comuns da existência dessas interfências quânticas são as correções de localização fraca e as flutuações mesoscópicas. Localização fraca, ou localização de Anderson, foi primeiramente tratada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [86, 87] quando eles desenvolveram a teoria de escala para condutores bidimenionais. Esse fenômeno passou a ser investigado em metais e semicondutores que possuíam certo grau de desordem. Mais especificamente, a localização fraca pode ser observada nas anomalias presentes nas medidas de resistividade em baixas temperaturas [87].

Em 1980, em um trabalho pioneiro, S. Hikami [88] calculou a correção de localização fraca da condutividade de Drude em sistemas desordenados [89]. Foi observado nesse trabalho que a condutividade é ligeiramente suprimida pela correção de localização fraca e amplificada pela antilocalização fraca. Em pontos quânticos mantidos a baixas temperaturas esses efeitos também são de grande importância para observáveis de transporte, tais como a condutância e a potência do ruído de disparo.

Em sistemas metálicos, sem desordem, a resistividade diminui quando a temperatura é reduzida. Em um sistema desordenado, a localização pode acontecer se a temperatura for baixa o suficiente. Nesse caso, a resistividade, ao invés de diminuir, passa a aumentar com a queda da temperatura. O efeito de localização fraca só pode ser observado em temperaturas relativamentes baixas, geralmente quando k_BT (k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura) é da ordem de $\hbar/\tau_i$ (τ_i é um tempo de espalhamento inelástico). Considerando essa faixa de temperatura, vamos dintinguir dois tempos de espalhamento distintos, o tempo de espalhamento elástico (τ_0) e o tempo de espalhamento inelástico (τ_i). Podemos definir, de forma mais direta, τ_0 como o tempo que o elétron leva para mudar de estado de momento k para um estado k', sem perder energia, enquanto que τ_i se refere ao tempo de espalhamento em que há perda de energia. Em altas temperaturas, temos esses tempos praticamente da mesma ordem. Por outro lado, em temperaturas muito baixas, τ_i pode ser algumas ordens de grandeza maior que τ_0, fazendo assim com que o elétron possa ser espalhado várias vezes pelas impurezas sem que o mesmo perca

energia, de modo que a função de onda não altera sua fase, possibilitando a interfência construtiva.

A condutividade de Boltzmann $\sigma_0 = ne^2\tau/m$, onde n é a densidade de elétrons na amostra, τ é o tempo livre médio, e é a carga fundamental do elétron e m sua massa, não leva em conta a interferência entre as funções de onda espalhada pelas impurezas. Isso gera um erro que deve ser corrigido calculando-se a contribuição do efeito de localização sobre a condutividade.

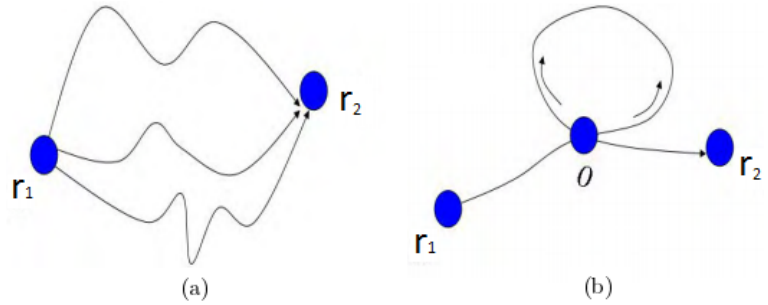


Figura 3.1 Representação esquemática de possíveis trajeórias de um elétron viajando de $\vec{r}_1$ até $\vec{r}_2$ de modos eletrônicos dentro de uma amostra. Em (a) temos trajetórias sem interseções (difuso) entre os pontos. Em (b) Trajetórias que se cruzam, com auto-interseção. Figura adaptada de [90]

A localização fraca corresponde a um aumento de probabilidade de se "encontrar" um elétron em um dado sítio da rede. O aumento de probabilidade ocorre devido à interferência das funções de ondas eletrônicas que se propagam no mesmo caminho mas em sentidos diferentes. Para isso, é necessário que o tempo de espalhamento inelástico seja muito longo comparado com o tempo de espalhamento elástico. Para entender melhor o mecanismo de localização fraca, considere um elétron indo de um sítio localizado no ponto $\vec{r_1}$ para um sítio no ponto $\vec{r_2}$ dentro de uma amostra, conforme ilustrada na Figura (3.1). A mecânica quântica estabelece que a descrição deve ser feita pela adição de amplitudes complexas C_i de espalhamento nas impurezas e não em termos da adição de probabilidades P_i. Uma vez que o movimento é difusivo, o elétron espalha elasticamente várias vezes durante o percurso. A probabilidade de que o elétron atinja o ponto r_2 é calculada somando-se todos os possíveis percursos. Sendo assim, o espalhamento por impurezas impõe que a probabilidade de propagação entre esses dois pontos é:

$$P(r_1 \to r_2) = \left| \sum_i C_i \right|^2 = \sum_i \left|C_i\right|^2 + \sum_{i \neq j} C_i C_j^*, \tag{3.1}$$

onde C_i é a amplitude de propagação ao longo do caminho i. Pela Equação (3.1), a probabilidade total P depende da soma de probabilidades individuais $\left|C_i\right|^2$ (probabbilidade clássica) e da interferência $C_i C_j^*$ entre amplitudes de espalhamento. Na Figura (3.1), as trajetórias têm, em geral, comprimentos e formas muito diferentes entre sí, e com isso a mudança de fase ao longo de cada trajetaória é dada por:

$$\Delta\varphi = \frac{1}{\hbar}\int_{\vec{r_1}}^{\vec{r_2}} \vec{p}.\vec{dr}, \tag{3.2}$$

onde, $\vec{p}$ é o vetor momento do elétron e $\vec{dr}$ é seu deslocamento ao longo de uma trajetória. Assim, cada trajetória contribuirá para uma diferença de fase diferente para as funções de onda, de forma que a coerência se perde e a interfência se anula. Desse modo, o segundo termo da Equação (3.1) tende a zero e obtemos somente o resultado clássico:

$$P(r_1 \to r_2) = \sum_i \left|C_i\right|^2. \tag{3.3}$$

Por outro lado, se r_1 e r_2 forem o mesmo ponto, digamos que seja um ponto O (Fig. 3.1 b), as duas ondas viajam no mesmo caminho, mas em sentidos diferentes, sofrem a mesma diferença de fase e podem interferir construtivamente. Assim, a probabilidade quântica se torna o dobro da probabilidade clássica (sem os termos de interferência):

$$P(O \to O) = \Big|\sum_{i=1}^{2} C_i\Big|^2 = \sum_{i=1}^{2}\left|C_i\right|^2 + \sum_{i\neq j} C_i C_j^* = 2\sum_{i=1}^{2}\left|C_i\right|^2 = 4\left|C\right|^2. \tag{3.4}$$

O aumento de probabilidade de o elétron se encontrar no ponto O significa uma diminuição da probabilidade de que ele chegue ao ponto r_2. Isso significa em uma redução da condutividade e um aumento da resistividade elétrica da amostra. Qualquer interação que possa reduzir a coerência de fase das ondas tende a destruir a interferência e a localização deixa de existir. A aplicação de um campo magnético, espalhamento por fônos ou aparecimento de acoplamento spin-órbira são exemplos de efeitos que podem destruir a interferência.

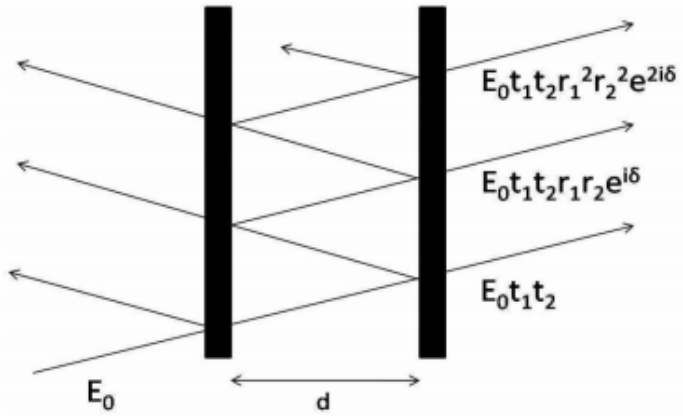


Figura 3.2 Caminho óptico de uma onda ao sofrer inúmeras reflexões entre dois planos parcialmente refletores. Após cada reflexão a onda adquire efetivamente uma fase $e^{i\delta/2}$. A intendidade da onda incidente é $I_0 = |E_0|^2$ e o comprimento de onda no meio é λ [91].

Com o intuito de entender melhor os efeitos da interferência quântica em uma cavidade caótica, iremos recorrer a um exemplo da óptica. Para isso, seguiremos a Ref. [91].

Suponha por exemplo dois planos paralelos e parcialmente refletores, separados por uma certa distância d. Ao incidir uma onda coerente de intensidade $I_0 = \left|E_0\right|^2$ sobre um dos planos, teremos uma fração dessa intensidade sendo transmitida enquanto outra sendo refletida, e múltiplos espalhamentos de ondas coerentes entre os planos irão acontecer até que uma certa fração da intensidade incidente seja transmitida, como mostrada na Figura (3.2). Para cada reflexão entre os planos há efetivamente um ganho de fase $e^{i\delta/2}$ relacionado à diferença entre os caminhos óticos entre a onda transmitida e refletida. Mostra-se que $\delta = (4\pi/\lambda)d\cos\theta$, onde λ é o comprimento de onda no meio de propagação entre os planos, θ é o ângulo de incidência da onda e d é a distância entre os planos. Somando as amplitudes das ondas transmitidas obtemos:

$$\begin{aligned} E_T &= E_0 t_1 t_2 + E_0 t_1 r_2 e^{i\delta/2} r_1 t_2 + E_0 t_1 r_2 e^{i\delta/2} r_1 e^{i\delta/2} r_2 e^{i\delta/2} r_1 e^{i\delta/2} t_2 + \ldots, \\ &= E_0 t_1 t_2 \sum_{n=0}^{\infty} (r_1 r_2 e^{i\delta})^n \\ &= E_0 \frac{t_1 t_2}{1 - r_1 r_2 e^{i\delta}}, \end{aligned} \tag{3.5}$$

onde, r_i e t_i são respectivamente os coeficientes de reflexão e transmissão dos planos parcialmente refletores. Pela Equação (3.5), podemos obter a intensidade das ondas transmitidas $I_T = \left|E_T\right|^2$, dada por:

$$I_T = I_0 \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2}\cos\delta}, \tag{3.6}$$

onde, $T_i = |t_i|^2$ e $R_i = |r_i|^2$ são respectivamente os coeficientes de transmissão e reflexão e por conservação de corrente temos $R_i = 1 - T_i$. Pela Equação (3.6) podemos concluir que a fração de transmissão através dos planos refletores (I_T/I_0) não depende somente dos coeficientes de transmissão ($T_{1,2}$) mas também da fase acumulada após as inúmeras reflexões ocorridas entre os planos. Em uma analogia direta entre sistemas ópticos e mesoscópicos, medir a intensidade trasmitida I_T entre os planos refletores em óptica equivale à medir a corrente que atravessa duas junções de tunelamento com um canal aberto cada. Assim, usaremos a Equação (3.6) para calcular a condutância de uma cavidade com um canal propagante:

$$G = G_0 \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2}\cos\delta}. \tag{3.7}$$

Observe na Figura (3.3) o aparecimento de frajnas de interferência. Isso acontece devido aos múltiplos espalhamentos de onda coerentes entre os planos refletores. O padrão das franjas de interferência pode ser controlado experimentalmente variando a distância d entre os planos. Este resultado é a base para o interferômetro de Fabry-Perot [92]. Em

uma cavidade caótica, os efeitos de interferência entre ondas coerentes injetadas através dos guias acoplados à cavidade, levam à formação de múltiplas ressonâncias superposta. Estas ressonâncias foram analisadas na ref. [93].

Outra forma de analisar o problema é calcular a média sobre a fase acumulada, destacando os efeitos de interferência, e somar as probabilidades em vez das amplitudes como é feito na física clássica. Sendo assim a condutância média [94] é dada por:

$$\langle G\rangle = G_0\frac{T_1T_2}{T_1+T_2-T_1T_2} \simeq G_0\frac{T_1T_2}{T_1+T_2}, \quad T_1, T_2 \ll 1. \tag{3.8}$$

Esta equação é equivalente a somarmos duas resistências em série como manda a lei de *Ohm*. Ou seja, ao desprezarmos os efeitos de interferência, calculando a média sobre a fase acumulada, a lei de *Ohm* é recuperada.

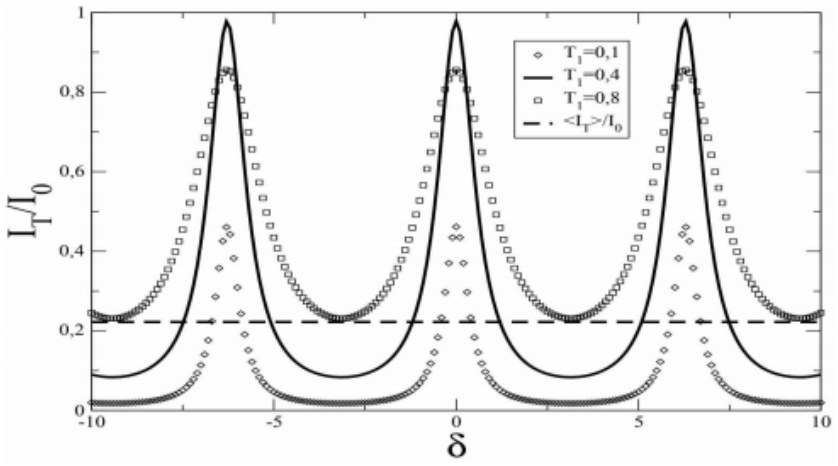


Figura 3.3 Franjas de interferência devido às múltiplas reflexões sofridas pela onda incidente entre os planos refletores. Mantivermos $T_2 = 0,5$ e variamos T_1. A linha tracejada refere-se a média sobre a fase acumulada com $T_{0,4}$ e $T_2 = 0,5$ [91].

Podemos observar assim, que para compreender melhor os efeitos e fenômenos quânticos dos processos de transmissão de cargas não podemos desprezar as informações advindas dos efeitos de interferências. Estas vão aparecer como correções quânticas da lei de *Ohm* após realizarmos a média sobre a fase aleatória adquirida através dos múltiplos espalhamentos elásticos dentro da cavidade. As correções quânticas devido aos efeitos de interferência podem ser destrutivas (localização fraca) ou construtivas (antilocalização fraca).

CAPÍTULO 4

TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIA E FORMALISMO DE ESPALHAMENTO

4.1 TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS

A teoria de matrizes aleatórias (TMA) [95], 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, o que torna ideal para uma descrição via TMA. A TMA surgiu na década de 50 com os trabalhos do físico e matemático Eugene Paul Wigner (1902-1995). Wigner estudou as propriedades estatísticas dos níveis de energia de núcleos pesados bombardeados por nêutrons lentos. Ele descobriu que a estatística das flutuações dos níveis destes átomos pesados, obtidos experimentalmente, coincidia com a estatística das flutuações na densidade de autovalores, obtidos através da diagonalização de matrizes em que os elementos eram determinados aleatoriamente e sujeitos a uma distribuição gaussiana. Os seus trabalhos resultaram no prêmio Nobel de 1963 [96]. Mais tarde, as mesmas técnicas foram aplicadas às estatísticas dos níveis de pequenas partículas metálicas, de modo a descrever a absorção de microondas por metais granulares [56].

Baseado nos trabalhos de Wigner, Dyson classificou em um conjunto de publicações [97, 98, 99, 100, 101] as matrizes aleatórias dentro de três categorias de acordo com as propriedades de simetria do sistema físico, como a simetria de reversão temporal e a rotação de spin. A universalidade nas propriedades de transporte de um ponto quântico, como sabemos, está relacionada à hipótese de existência de caos quântico (ou caos ondulatório) em decorrência da não integrabilidade da geometria da cavidade.

No transporte de cargas através de pontos quânticos caóticos, a dinâmica no interior da cavidade pode ser descrita por uma matriz hamiltoniana (H) aleatória, pertencente ao ensemble gaussiano, o qual possui classes de universalidade que dependem de vínculos e simetrias da cavidade. Embora no interior da cavidade o elétron possua dinâmica balística, ele interage com as paredes do ponto quântico que, a nível microscópico, possui uma geometria bastante irregular. Dessa forma, o elétron sofre um conjunto de espalhamentos irreprodutíveis e incontroláveis, nos quais sua dinâmica é bastante sensível. Por isso, o ponto quântico é considerado um sistema quântico caótico. As simetrias dos pontos quânticos determinam a forma das matrizes de espalhamento que os descrevem.

Devido às simetrias presentes nos processos de transporte mesoscópico, as matrizes de espalhamento aleatórias foram primeiramente classificadas pelos ensembles de Wigner-Dyson (WD) [97, 102], usadas para descrever o transporte de cargas não-interagentes no regime balístico. Essas classes são caracterizadas de acordo com a presença ou quebra de simetrias fundamentais com simetria de reversão temporal (SRT) e simetria de rotação de spin (SRS), simetria de sub-rede (SSR) e simetria particula-buraco (SPB). Em seguida

foram introduzidas mais três classes de ensembles por Shuryak [78] e Verbaarschot [79]. Com estas três classes foi possível observar fenômenos em sistemas que tem rede bipartidas como são os sistemas quirais, e assim, como já havíamos citado, poder analisar o bilhar de Dirac. Esses sistemas preservam a simetria SSR, por isso com a introdução dessas novas classes houve uma expansão da aplicação da TMA, pois nas classes introduzidas anteriormente por WD a SSR não é preservada, logo não era suficiente para estudar sistemas com quiralidade. Por fim foram introduzidas mais quatro classes por Altland e Zirnbauer [80] aplicadas a sistemas em contato com supercondutores. No presente trabalho nos limitaremos as classes de simetria de WD e quiral.

A partir da nomenclatura de Cartan para espaços simétricos [76], Tabela (4.1), apresentamos as principais simetrias que sobrevivem à presença de desordem e caracterizam cada tipo de ensemble. Quando as simetrias são quebradas pela ação de um agente externo tal como campo magnético por exemplo, elas são representadas por (0), quando as simetrias não são quebradas estão representadas por (± 1) dependendo da simetria de spin ($+1$ a partículas com spin inteiro e -1 a spin semi-inteiro). **B** representa o campo magnético, **SC** a supercondutividade do sistema e **SO** a interação spin-órbita. Observe ainda na tabela que nela todos os ensembles da classe quiral apresentam simetria de sub-rede (SSR), que é uma característica intrínseca de sistemas quirais. Em nosso trabalho utilizaremos as classes de Wigner-Dyson e Quiral.

Classe de Simetria	Ensemble	β	SRT	SPB	SSR	Exemplos Físicos
Wigner-Dyson	A (Unitário)	2	0	0	0	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SC}=0$
	AI (Ortogonal)	1	+1	0	0	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SO}=0,\mathbf{SC}=0$
	AII (Simplético)	4	−1	0	0	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SO}\neq 0,\mathbf{SC}=0$
Quiral	AIII (Unitário)	2	0	0	1	$\mathbf{B}\neq 0,\mathbf{SC}=0$
	BDI (Ortogonal)	1	+1	+1	1	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SO}=0,\mathbf{SC}=0$
	CII (Simplético)	4	−1	−1	1	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SO}\neq 0,\mathbf{SC}=0$
Altland-Zimbauer	D	2	0	+1	0	$\mathbf{B}\neq 0,\mathbf{SO}\neq 0,\mathbf{SC}\neq 0$
	C	2	0	−1	0	$\mathbf{B}\neq 0,\mathbf{SO}=0,\mathbf{SC}\neq 0$
	DIII	1	−1	+1	1	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SO}\neq 0,\mathbf{SC}\neq 0$
	CI	4	+1	−1	1	$\mathbf{B}=0,\mathbf{SO}=0,\mathbf{SC}\neq 0$

Tabela 4.1 Tabela de Cartan para espaços simétricos [76]. Mostra a relação entre cada classe de simetria e o tipo de de simetria que o sistema poderá apresentar. As simetrias fundamentais que classificam cada tipo de ensemble são: simetria de reversão temporal (SRT), partícula-buraco (SPB) e sub-rede (SSR). **B** é o campo magnético, **SC** representa a supercondutividade do sistema e **SO** a interação spin-órbita. Quebra de simetria temos o valor 0, se a simetria for preservada ± 1.

4.1.1 TMA para Classe de Simetria de Wigner-Dyson

4.1.1.1 Ensembles Gaussianos: A dinâmica no interior da cavidade pode ser descrita por uma matriz hamiltoniana H $(M \times M)$, hermitiana $(H = H^{\dagger})$, cujos elementos são números aleatórios independentes pertencentes ao Esemble Gaussiano, de modo que a densidade de probabilidade pode ser escrita como:

$$P(H) \propto \exp\Big(- \frac{\beta M}{4\lambda^2} Tr H^2 \Big), \tag{4.1}$$

onde, $\lambda = M\Delta/\pi$ é um parâmetro numérico que está associado com o espaçamento médio (Δ) entre os níveis de energia (autovalores de H) e β é o índice de Dyson, parâmetro de simetria associado ao número de graus de liberdade dos elementos da hamiltoniana $(H_{\mu\nu})$ que podem ser reais, complexas ou quartérnions reais, vínculos matemáticos ligados às simetrias básicas que o sistema apresenta, como mostrada na Tabela (4.2). Resumindo, temos:

Índice de Simetria $\beta = \mathbf{1}$: A matriz H têm elementos reais e drescrevem sistemas que possuem simetria de reversão temporal (SRT) e de rotação de spin (SRS). O ensemble que descreve a matriz de H do sistema corresponde ao ensemble gaussiano ortogonal (EGO);

Índice de Simetria $\beta = \mathbf{2}$: Os elementos da matriz nesse caso são complexos e descrevem sistemas onde existe a quebra de reversão temporal, causada, por exemplo, pela aplicação de um forte campo magnético. O ensemble que descreve a matriz H corresponde ao ensemble gaussiano unitário (EGU);

Índice de Simetria $\beta = \mathbf{4}$: A matriz é formada por elementos quaterniônicos reais e descrevem sistemas com simetria de reversão temporal, na ausência de invariância de rotação de spin. O ensemble correspondente é o ensemble gaussiano simplético (EGS);

β	Ensemble	SRT	Spin	SRS	$\mathcal{H}$
1	EGO	sim	inteiro	irrelevante	real
1	EGO	sim	1/2 inteiro	sim	real
2	EGU	não	irrelevante	irrelevante	complexa
4	EGS	sim	1/2 inteiro	não	quatérnion real

Tabela 4.2 Classes Wigner-Dyson.

As classes de universalidade de Wigner-Dyson (ortogonal, unitária e simplética) podem ser descritas pela forma da matriz hamiltoniana. Usando o fato da matriz H ser hermitiana, temos:

$$\begin{aligned} TrH^2 &= Tr|H|^2 \\ &= \sum_{\mu\nu} |H_{\mu\nu}|^2 \\ &= \sum_{\mu} |H_{\mu\mu}|^2 + \sum_{\mu\neq\nu} |H_{\mu\nu}|^2 \\ &= \sum_{\mu} |H_{\mu\mu}|^2 + 2\sum_{\mu<\nu} |H_{\mu\nu}|^2, \end{aligned} \tag{4.2}$$

ou seja, as entradas do hamiltoninano são estatisticamente independentes. Podemos então escrever a distribuição dos elementos de H, usando a Equação (4.1), como:

$$P(H_{\mu\nu}) \propto \begin{cases} \exp(-a|H_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu = \nu; \\ \exp(-2a|H_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu \neq \nu, \end{cases} \tag{4.3}$$

onde, $a = \beta M/4\lambda^2$. Com isso temos:

$$P(H) \equiv \prod_{\mu\nu} P(H_{\mu\nu}), \tag{4.4}$$

Em geral, cada elemento de H é um quatérnion real:

$$\begin{cases} H_{\mu\nu} = H^0_{\mu\nu} + H^1_{\mu\nu}e_1 + H^2_{\mu\nu}e_2 + H^3_{\mu\nu}e_3, \\ H^k_{\mu\nu} \in \mathbb{R}, \\ H^k_{\mu\nu} = 0, \ k > \beta - 1, \\ H^k_{\mu\mu} = 0, \ k > 0, \\ |H_{\mu\nu}|^2 = \sum_{k=0}^{\beta-1} (H^k_{\mu\nu})^2. \end{cases} \tag{4.5}$$

Sendo $e_n = i\sigma_n$, onde σ_n, com $n = 1, 2$ ou 3, são as matrizes de Pauli e $i = \sqrt{-1}$.
Lembrando o fato que a expressão geral para uma distribuição gaussiana é dada pela expressão:

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\Big[- \frac{(x - \bar{x})^2}{2\sigma^2} \Big], \tag{4.6}$$

onde $\bar{x} = \langle x \rangle$ e $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ representam respectivamente a média e a variância dos elementos de X. Com isso, observando as Equações (4.5) e (4.4), temos que:

$$\begin{aligned} \langle H_{\mu\nu} \rangle &= \left\langle H^0_{\mu\nu} \right\rangle + \left\langle H^1_{\mu\nu} e_1 \right\rangle + \left\langle H^2_{\mu\nu} e_2 \right\rangle + \left\langle H^3_{\mu\nu} e_3 \right\rangle, \\ \langle H_{\mu\nu} \rangle &= 0, \end{aligned} \tag{4.7}$$

então a variância dos elementos de H, que são independentes, pode ser escrita como $\sigma^2 = \langle (H_{\mu\nu})^2 \rangle$, e assim podemos determinar para cada ensemble a partir das distribuições:

$$P(H_{\mu\nu})^2 = P(H_{\mu\nu})P(H_{\mu\nu}) = \begin{cases} \exp(-2a|H_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu = \nu; \\ \\ \exp(-4a|H_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu \neq \nu, \end{cases} \tag{4.8}$$

Assim, temos:

$\boldsymbol{\beta} = 1$ (Ensemble Gaussiano Ortogonal - EGO): $|H_{\mu\nu}|^2 = (H^0_{\mu\nu})^2$:

$$\left\langle |H_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \begin{cases} \frac{1}{2a}, & \text{se } \mu = \nu; \\ \\ \frac{1}{4a}, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \tag{4.9}$$

$\boldsymbol{\beta} = 2$ (Ensemble Gaussiano Unitário - EGU): $|H_{\mu\nu}|^2 = (H^0_{\mu\nu})^2 + (H^1_{\mu\nu})^2$:

$$\left\langle |H_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \begin{cases} \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{2}{2a}, & \text{se } \mu = \nu; \\ \\ \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} = \frac{2}{4a}, & \text{se } \mu \neq \nu, \end{cases} \tag{4.10}$$

$\boldsymbol{\beta} = 4$ (Ensemble Gaussiano Simplético - EGS): $|H_{\mu\nu}|^2 = (H^0_{\mu\nu})^2 + (H^1_{\mu\nu})^2 + (H^2_{\mu\nu})^2 + (H^3_{\mu\nu})^2$:

$$\left\langle |H_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \begin{cases} \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{4}{2a}, & \text{se } \mu = \nu; \\ \\ \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} = \frac{4}{4a}, & \text{se } \mu \neq \nu, \end{cases} \tag{4.11}$$

então, para k de 0 a $\beta - 1$:

$$\left\langle H^k_{\mu\nu} \right\rangle = 0, \tag{4.12}$$

$$\left\langle |H_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \begin{cases} \frac{\beta}{2a} = \left\langle (H^0_{\mu\nu})^2 \right\rangle, & \text{se } \mu = \nu; \\ \\ \frac{\beta}{4a} = \beta \left\langle (H^k_{\mu\nu})^2 \right\rangle, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \tag{4.13}$$

Ou seja, de modo geral temos:

$$\left\langle H^k_{\mu\nu} \right\rangle = 0, \tag{4.14}$$

$$\left\langle (H^k_{\mu\nu})^2 \right\rangle = \begin{cases} \frac{2\lambda^2}{M}, \text{ se } k = 0 \text{ e } \mu = \nu, \\ 0, \text{ se } k > 0 \text{ e } \mu = \nu, \\ \frac{\lambda^2}{\beta M}, \text{ se } \mu \neq \nu. \end{cases} \tag{4.15}$$

4.1.2 TMA para Classe de Simetria Quiral

4.1.2.1 Ensembles Gaussianos: O hamiltoninao de Dirac sem massa, com simetria de sub-rede (SSR), ou quiral, satisfaz a seguinte relação de anti-comutação [76, 103, 104]:

$$H = -\sigma_z H \sigma_z, \tag{4.16}$$

onde,

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_M & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_M \end{bmatrix}. \tag{4.17}$$

onde, $\mathbb{1}_M$ é uma matriz identidade de ordem M. Os $M's$ podem ser interpretados como o número de átomos em cada sub-rede [74], em um total de $2M$ átomos no bilhar de Dirac caótico. Esse é o número total de ressonâncias dentro do bilhar de Dirac, incluindo ambos os graus de liberdade das duas sub-redes. Com isso, o hamiltoninano associado a simetria de sub-rede (SSR) pode se escrito da seguinte forma [78, 79, 105]:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \tau \\ \tau^\dagger & 0 \end{bmatrix}. \tag{4.18}$$

onde τ é uma matriz aleatória quadrada de dimensão $M \times M$. E nesse caso, diferentemente do caso de Wigner-Dyson, temos a matriz H com dimensões $2M \times 2M$. A natureza de τ (simétrica real, complexa hermitiana ou quatérnion real) caracteriza, respectivamente os ensembles ortogonal chiral ($chEO$), unitário chiral ($chEU$) e simplético chiral ($chES$) [105]. A TMA estabelece que as entradas da matriz τ tem distribuição gaussiana dada por [78, 106]:

$$P(H) \propto \exp\Big\{ -\frac{\beta M}{2\lambda^2} Tr(\tau\tau^\dagger) \Big\}, \tag{4.19}$$

onde $\lambda = 2M\Delta/\pi$, e assim podemos reescreve na forma:

$$P(H) \propto \exp\Big\{ -aTr(\tau\tau^\dagger) \Big\}, \tag{4.20}$$

com $a = \beta M/2\lambda^2$, onde,

$$\begin{aligned} Tr(\tau\tau^{\dagger}) &= \sum_{\mu} \tau_{\mu\mu}\tau^{*}_{\mu\mu} + \sum_{\mu\neq\nu} \tau_{\mu\nu}\tau^{*}_{\mu\nu} \\ &= \sum_{\mu} |\tau_{\mu\mu}|^2 + \sum_{\mu\neq\nu} |\tau_{\mu\nu}|^2. \end{aligned} \tag{4.21}$$

Assim, a distribuição dos elementos de τ pode ser escrito como:

$$P(\tau_{\mu\nu}) \propto \exp(-a|\tau_{\mu\nu}|^2). \tag{4.22}$$

Em geral, cada elemento de τ é um quatérnion real da seguinte forma:

$$\begin{cases} \tau_{\mu\nu} = \tau^0_{\mu\nu} + \tau^1_{\mu\nu}e_1 + \tau^2_{\mu\nu}e_2 + \tau^3_{\mu\nu}e_3, \\ \tau^k_{\mu\nu} \in \mathbb{R}, \\ |\tau_{\mu\nu}|^2 = \sum_{k=0}^{\beta-1} (\tau^k_{\mu\nu})^2. \end{cases} \tag{4.23}$$

Com $e_n = i\sigma_n$, onde σ_n, com $n = 1, 2$ ou 3, são as matrizes de Pauli e $i = \sqrt{-1}$.

Pela Equação (4.19), e pela definição $P(\tau) \equiv \prod_{\mu\nu} P(\tau_{\mu\nu})$, temos:

$$\begin{aligned} \langle \tau_{\mu\nu} \rangle &= \left\langle \tau^0_{\mu\nu} \right\rangle + \left\langle \tau^1_{\mu\nu} e_1 \right\rangle + \left\langle \tau^2_{\mu\nu} e_2 \right\rangle + \left\langle \tau^3_{\mu\nu} e_3 \right\rangle, \\ \langle \tau_{\mu\nu} \rangle &= 0, \end{aligned} \tag{4.24}$$

então a variância dos elementos de τ, que são independentes, pode ser escrita como $\sigma^2 = \langle (\tau_{\mu\nu})^2 \rangle$, e assim podemos determinar para cada ensemble a partir das distribuições:

$$P(\tau_{\mu\nu})^2 = P(\tau_{\mu\nu})P(\tau_{\mu\nu}) = \exp(-2a|\tau_{\mu\nu}|^2). \tag{4.25}$$

Assim, temos:

$\boldsymbol{\beta} = 1$ (Ensemble Quiral Gaussiano Ortogonal - chEGO): $|\tau_{\mu\nu}|^2 = (\tau^0_{\mu\nu})^2$:

$$\left\langle |\tau_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \frac{1}{2a}. \tag{4.26}$$

$\boldsymbol{\beta} = 2$ (Ensemble Quiral Gaussiano Unitário - chEGU): $|\tau_{\mu\nu}|^2 = (\tau^0_{\mu\nu})^2 + (\tau^1_{\mu\nu})^2$:

$$\left\langle |\tau_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{2}{2a}. \tag{4.27}$$

$\boldsymbol{\beta} = 4$ (Ensemble Quiral Gaussiana Simplético - chEGS): $|\tau_{\mu\nu}|^2 = (\tau^0_{\mu\nu})^2 + (\tau^1_{\mu\nu})^2 + (\tau^2_{\mu\nu})^2 + (\tau^3_{\mu\nu})^2$:

$$\left\langle |\tau_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{4}{2a}. \tag{4.28}$$

então, para k de 0 a $\beta - 1$:

$$\left\langle \tau^k_{\mu\nu} \right\rangle = 0, \tag{4.29}$$

$$\left\langle |\tau_{\mu\nu}|^2 \right\rangle = \frac{\beta}{2a} = \beta \left\langle (\tau^k_{\mu\nu})^2 \right\rangle. \tag{4.30}$$

Ou seja, de modo geral temos:

$$\left\langle \tau^k_{\mu\nu} \right\rangle = 0, \tag{4.31}$$

$$\left\langle (\tau^k_{\mu\nu})^2 \right\rangle = \frac{\lambda^2}{\beta M}. \tag{4.32}$$

4.2 TEORIA DE ESPALHAMENTO

4.2.1 Matriz de Espalhamento

O transporte de elétrons através de condutores pode ser caracterizado pela matriz de espalhamento S. A matriz S conecta as amplitudes das ondas que entram no condutor com as amplitudes das ondas que saem desse condutor [45, 43]. A teoria de espalhamento leva em consideração o problema proposto por Landauer. Consideramos nesse caso um sistema de elétrons não interagentes, uma cavidade mesoscópica bidimensional conectada a reservatórios de elétrons por L guias ideais em equilíbrio termodinâmico. O l-ésimo guia $(1, ..., L)$ possui largura W_l finita, causando um confinamento transversal que produz quantização em modos propagantes e a presença de canais de propagação. Os elétrons são espalhados na cavidade, considerada estacionária no tempo, com energia de Fermi ($\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$) e satisfazem a equação de Schrödinger, que para campo magnético nulo ($B = 0$) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \tag{4.33}$$

Onde E é a energia da partícula incidente e $V(\vec{r})$ é o potencial de confinamento dos canais propragantes no guia. Para encontrar as soluções dessa equação em cada guia, introduzimos um sistema de coordenadas em cada um deles, de modo que o vetor posição é dado por $\vec{r} = \vec{r_l} = (x_l, y_l)$.

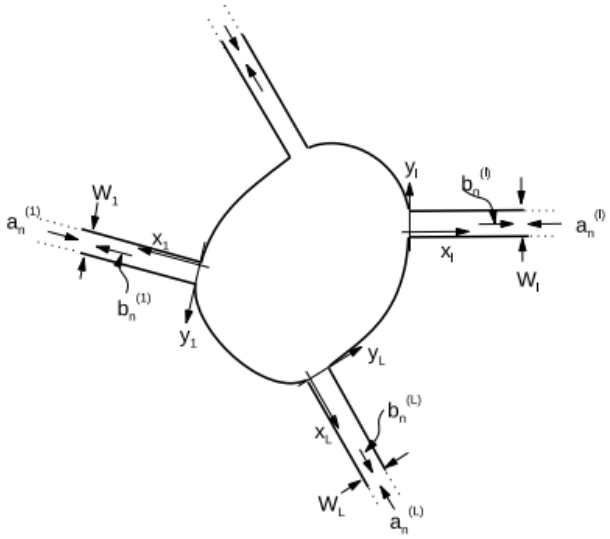


Figura 4.1 Cavidade caótica bidimensional conectada a L guias de onda ideais. As setas dentro dos guias indicam as ondas entrando a_n e saindo b_n da cavidade. Figura retirada da Ref. [107].

Como podemos observar na Figura 4.1, a coordenada x_l representa a direção longitudinal e está orientada para fora da cavidade, enquanto que a coordenada y_l representa a direção transversal de propagação assumindo os valores 0 e W_l nas paredes do guia, de modo que a condição de contorno ideal, devido a impenetrabilidade nos guias e na cavidade, leva ao seguinte vínculo:

$$\Psi(x_l, 0) = \Psi(x_l, W_l) = 0, \tag{4·34}$$

além disso, como os guias são considerados ideais, o potencial real devido as impurezas, $V(\vec{r})$, é nulo, e portando, a equação de Schrödinger é separável, ou seja,

$$\Psi_n(x_l, y_l) = \varphi_n(x_l)\chi_n(y_l), \tag{4·35}$$

onde $\varphi_n(x_l)$ e $\chi_n(x_l)$ são as n funções de onda longitudinais e transversais. Desse modo podemos encontrar as soluções de uma parte tipo ondas planas propagantes

$$\varphi_n(x_l) \propto e^{\pm i k_n^{(l)} x_l}, \tag{4·36}$$

onde definimos $[k_l^{(l)}]^2 = 2mE_{x_l}/\hbar^2$ e os sinais $(+)$ e $(-)$ representam respectivamente as ondas saindo e entrando na cavidade, e uma parte tipo onda estacionária

$$\chi_n(y_l) = \sqrt{\frac{2}{W_l}} \sin(K_n^{(l)} y_l), \tag{4·37}$$

onde, $K_n^{(l)} = n\pi/W_l$ $(n = 1, 2, ...)$ é o número de onda transversal. Nessa direção temos a energia:

$$E_{y,n}^{(l)} = \frac{\hbar^2}{2m}[K_n(l)]^2, \tag{4·38}$$

e as soluções transversais formam um conjunto ortogonal completo, isto é,

$$\langle \chi_m | \chi_n \rangle \equiv \int_0^{Wl} \chi_m^*(y_l)\chi_n(y_l)dy_l = \delta_{mn}, \tag{4.39}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \chi_n^*(y)\chi_n(y') = \delta(y-y'). \tag{4.40}$$

Cada possibilidade definida por n é chamada de modos ou canais. O número de onda longitudinal e transversal se relaciona por:

$$[k_n^{(l)}]^2 + [k_n^{(l)}]^2 = k_F^2, \tag{4.41}$$

e a energia de Fermi do sistema é a soma das energias longitudinais ($E_x^{(l)}$) e transversais ($E_{y,n}^{(l)}$):

$$\epsilon_F = E_x^{(l)} + E_{y,n}^{(l)}. \tag{4.42}$$

Levando em consideração a energia de Fermi, apenas n canais são permitidos se $E_{y,n}^{(l)} < \epsilon_F$, ou seja, $E_x > 0$ e $k_n^{(l)}$ é real, desse modo, $\exp^{\pm i k_n^{(l)} x_l}$ é uma exponencial complexa, e o modo de propagação é chamado de canal aberto. Se $N_l < \frac{k_F W}{\pi} < N_l + 1$, então existem precisamente N_l canais abertos no l-ésimo guia. Por outro lado, se $E_{y,n}^{(l)} > \epsilon_F$, então $E_x < 0$ e $k_n^{(l)}$ é puramente imaginário e $e^{\pm i k_n^{(l)} x_l}$ é uma exponencial real dando origem a ondas de decaimento exponencial ao longo do guia. Esses modos são chamados de modos evanescentes ou canais fechados.

Para $x \longrightarrow \infty$, apenas canais abertos contribuem para a função de onda. A forma mais geral das soluções normalizadas da equação de Schrödinger no guia l deve ser escrita como uma combinação linear

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_l} \left[a_n^{(l)} \frac{e^{-i k_n^{(l)} x_l}}{(\hbar k_n^{(l)}/m)^{1/2}} + b_n^{(l)} \frac{e^{i k_n^{(l)} x_l}}{(\hbar k_n^{(l)}/m)^{1/2}} \right] \sqrt{\frac{2}{W_l}} \sin(K_n^{(l)} y_l), \tag{4.43}$$

onde m é a massa efetiva do elétron. Essas soluções normalizadas asseguram a condição de fluxo unitário. Os coeficientes $a_n^{(l)}$ e $b_n^{(l)}$ representam, respectivamente, as amplitudes de ondas entrando e saindo do canal aberto n no guia l. Assim podemos definir o vetor N_l-dimensional, que contém as N_l amplitudes das ondas incidentes na cavidade, através do guia l da seguinte maneira:

$$\mathbf{a}^{(l)} = \begin{bmatrix} a_1^{(l)} \\ \vdots \\ a_{N_l}^{(l)} \end{bmatrix}, \tag{4.44}$$

combinando todos os l ($l = 1, \cdots, L$) vetores, encontramos o vetor associado às ondas que entram na cavidade, e de forma similar as ondas de saída, a partir de todos os canais abertos em todos os guias

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a^{(1)} \\ \vdots \\ a^{(L)} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b^{(1)} \\ \vdots \\ b^{(L)} \end{bmatrix}. \tag{4.45}$$

A matriz de espalhamento conecta as amplitudes das ondas que saem na cavidade com as que entram, sendo definida pela equação:

$$\mathbf{b} = S\mathbf{a}. \tag{4.46}$$

A matriz S pode ser representada na forma de blocos, como mostrada na equação (4.47), onde os elementos da diagonal principal são blocos r_{ll} $(N_l \times N_l)$, que contém amplitudes de reflexão dos N_l canais do l-ésimo guia nele mesmo, e os outros elementos são blocos t_{lm}, matrizes $N_l \times N_m$ que contém amplitudes de transmissão dos N_m canais do guia m para os N_l canais do guia l. A matriz S é uma matriz quadrada de dimensão N_T, $N_T = \sum_{l=1}^{L} N_l$.

$$S = \begin{bmatrix} r_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1L} \\ t_{21} & r_{22} & \cdots & t_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{L1} & t_{L2} & \cdots & r_{LL} \end{bmatrix}, \tag{4.47}$$

No caso particular de elétrons num sistema de dois terminais, como mostrado na Figura (4.2), as equações (4.45) e (4.47) se tornam, respectivamente,

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b^{(1)} \\ b^{(2)} \end{bmatrix}, \tag{4.48}$$

$$S = \begin{bmatrix} r_{11} & t_{12} \\ t_{21} & r_{22} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} r & t \\ t' & r' \end{bmatrix}, \tag{4.49}$$

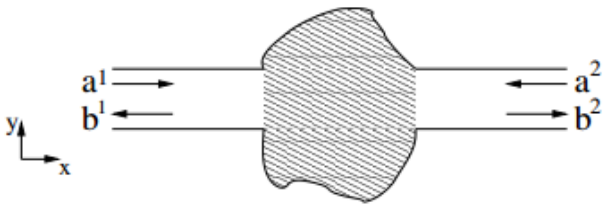


Figura 4.2 Cavidade $2D$ acoplado a dois guias semi-infinito. Figura retirada da Ref. [106].

onde r, r' são as matrizes de reflexão e t, t' são matrizes de transmissão. Podemos relacionar a condutância de Landauer com os blocos de transmissão, coeficientes de transmissão $\mathrm{T} = Tr(tt^{\dagger})$, da matriz de espalhamento [108, 109] através da equação (4.50). Essa equação é conhecida como fórmula de Landauer-Büttiker.

$$G = \frac{2e^2}{h} T_{12} = \frac{2e^2}{h} Tr(tt^\dagger). \tag{4.50}$$

4.2.2 Fórmula de Landauer-Büttiker

O formalismo de Landauer-Büttiker [61, 110] trata o transporte de elétrons em condutores mesoscópicos como um problema de espalhamento, relacionando propriedades de observáveis de transporte como a condutância com a matriz S do sistema. Dessa forma, corrente elétrica passa a ser entendida como o resultado da injeção de cargas no contato e da probbabilidade das mesmas atravessarem a amostra. Landauer, como havíamos comentado, introduziu o conceito de reservatórios de elétrons que atuam como fontes e drenos perfeitos de portadores de carga e energia conectados a um dispositivo central por dois terminais contendo um único canal cada um. Esse problema foi generalizado para o caso de muitos canais [109]. Ao contrário das teorias clássicas de transporte em sistemas macroscópicos, o formalismo de Landauer-Büttiker leva em conta aspectos do processo de medição e tem sido amplamente usado na interpretação de experimentos em física mesoscópica [45, 47, 111].

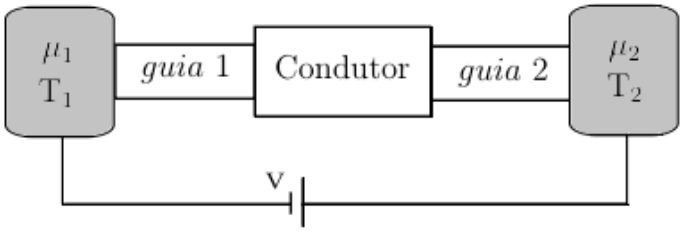


Figura 4.3 Condutor conectado a dois reservatório de elétrons por meio de guias ideais. Figura adaptada da Ref. [106].

A Figura 4.3 mostra uma geometria de dois terminais. Os reservatórios são considerados suficientemente grandes para estarem em equilíbrio termodinâmico. Desta forma, eles podem ser caracterizados por temperaturas T_i e potenciais químicos μ_i bem definidos, com $i = 1, 2$. Portanto, os elétrons nos reservátorios obedecem à função de distribuição de Fermi-Dirac

$$f_i(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu_i)/k_B T_i}}. \tag{4.51}$$

Seguindo as referências [68, 112], pode-se mostrar que o valor esperado do operador corrente é dado por

$$\langle I \rangle = \frac{2e}{h} \int_0^\infty dE[f_1(E) - f_2(E)] Tr[t(E)t(E)^\dagger], \tag{4.52}$$

onde f_i são as distribuições de Fermi-Dirac dos reservatórios e t é a matriz de transmissão. Aplicando-se uma diferença de potencial V entre os reservatórios, tal que $\mu_1 - \mu_2 = eV$,

similar ao que foi visto em quantização da condutância e na fórmula de Landauer nas sessões anteriores, temos que a condutância $G = \lim_{V\to\infty} \langle I \rangle / V$ é dada por:

$$G = \frac{2e}{h} \int_0^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) Tr[t(E)t(E)^\dagger]. \tag{4.53}$$

Em particular, para T = 0, apenas elétrons no nível de Fermi contribuem para a condutância, e que a equação (4.53) se reduz a já citada fórmula:

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathrm{T}r(tt^\dagger). \tag{4.54}$$

Além disso, podemos reescrever a equação (4.54) da seguinte forma [39]:

$$G = \frac{2e^2}{h} Tr(C_1 S C_2 S^\dagger). \tag{4.55}$$

As matrizes $C_{1,2}$ são matrizes de projeção sobre os respectivos terminais, e são definidas como:

$$C_1 = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{N_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_{N_2} \end{bmatrix}, \tag{4.56}$$

onde $\mathbb{1}_i$ $(N_i \times N_i)$ é a matriz identidade e N_i é o número de canais abertos no i-ésimo terminal. As matrizes de projeção asseguram que $C_1 C_2 = 0$ e $C_1 + C_2 = \mathbb{1}_{N_T}$.

Esse formalismo também permite o estudo de flutuações temporais na corrente causada pela discreteza da carga dos portadores. Essas flutuações como sabemos são denominadas ruído de disparo. Usando o formalismo de Landauer-Büttiker pode-se mostrar que a componente de frequëncia nula da densidade espectral, denominada potência de ruído de disparo [68], é dada por:

$$P = \frac{2e^2}{h} \int dE[f_1(1-f_2) + f_2(1-f_1)]Tr(tt^\dagger rr^\dagger) + [f_1(1-f_1) + f_2(1-f_2)]Tr(tt^\dagger tt^\dagger). \tag{4.57}$$

Em temperatura nula e no regime de resposta linear, a equação (4.57) torna-se

$$\frac{P}{P_0} = Tr[tt^\dagger(1-tt^\dagger)], \quad P_0 = \frac{4e^2 V}{h}. \tag{4.58}$$

Com isso, podemos observar a importância da construção da matriz S para se obter a condutância do sistema. A ideia é construir a matriz de espalhamento S, fazendo o uso da TMA, e se utilizar da fórmula de Mahaux-Weidenmüller, que iremos abordar nas sessões seguintes, para obter propriedades físicas de transporte. A ultilização da TMA para a geração da matriz de espalhamento também será explicitado com mais detalhes nas sessões seguintes.

4.2.3 Fórmula de Mahaux-Weidenmüller

Em nosso trabalho, estudaremos o problema de espalhamento quântico seguindo a fórmula de Mahaux-Weidenmüller para o caso de uma cavidade caótica acoplada a dois terminais. O Modelo Hamiltoniano Mahaux-Weidenmüller ($MHMW$) fornece uma abordagem hamiltoniana e descreve o espalhamento de canais de propagação eletrônicos por um ponto quântico com um número muito grande de ressonâncias. Os canais de espalhamento não têm "reação direta", o que implicará em certas condições de ortogonalidade sobre o acoplamento entre os canais e os modos ressonantes. Consideraremos o limite universal de uma distribuição aleatória de estados ressonantes. No limite universal, escolheremos, sem perda de generalidade, um ensemble gaussiano para a distribuição.

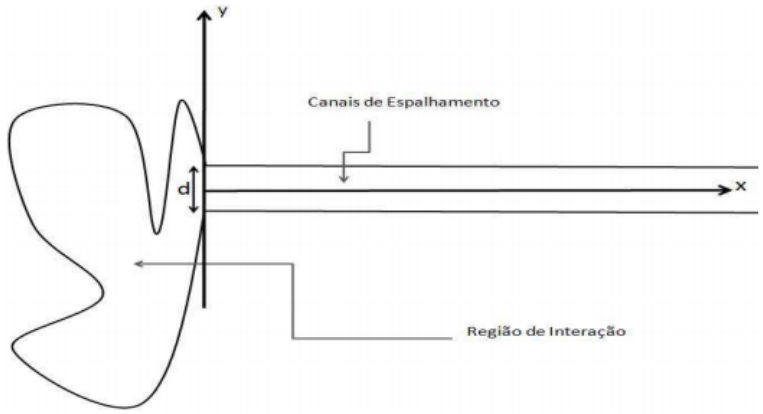


Figura 4.4 Espalhamento de modos propagantes em guia semi-infinito causado na região de interação. Figura retirado da Ref. [62]

Em um fenômeno de espalhamento geral, é natural supor que o evento de espalhamento é sempre confinado dentro de uma parte compacta do espaço disponível que é chamada de "região de confinamento". Fora dessa região de confinamento, o espalhamento está ausente e os subprodutos dessa interação apresentam um movimento livre caracterizado por um conjunto de números quânticos que descrevem o estado quântico interno de cada subproduto. Estes números quânticos especificam os estados em que as partículas podem ser encontradas muito antes ou muito depois do espalhamento. Considere em particular o modelo da Figura 4.4, o qual consiste de modos propagantes ao longo de um guia semi-infinito com largura d. Na direção transversal, devido à barreira física estabelecida pelas fronteiras dos guias, os modos propagantes são quantizados. Assumindo que o guia carregue M canais abertos e independentes, cada um com uma energia E específica. Na região assintótica existirá, portanto, um conjunto de estados de espalhamento denotados por:

$$|n, E\rangle\,; \quad n = 1, 2, ..., M, \tag{4·59}$$

normalizando segundo a condição $\langle n, E_1|m, E_2\rangle = \delta_{nm}\delta(E_1 - E_2)$

Na região compacta de interação, por outro lado, assume-se a existência de um conjunto discreto de N_c estados ortogonais $|\mu\rangle$; $\mu = 1, 2, ..., N_c$. Na ausência de acoplamento

entre os diferentes conjuntos de estados, um hamiltoniano pode ser imediatamente escrito na forma [43, 62]:

$$H_0 = \sum_{\mu\nu} |\mu\rangle \, (H_{ri})_{\mu\nu} \, \langle\nu| + \sum_n \int dE \, |n, E\rangle \, E \, \langle n, E| \, . \tag{4.60}$$

O primeiro termo da Equação (4.60) descreve a representação em uma base arbitrária do hamiltoniano H_{ri} da região de interação, a qual contém $N_c \gg 1$ auto-estados. O segundo termo do hamiltoniano contém os estados da região de canais abertos. Para descrever o acoplamento entre os canais de entrada com os auto-estados do hamiltoniano H, se acrescenta ao hamiltoniano da Equação (4.60) o termo de acoplamento:

$$\nu = \sum_{\mu,n} \left(|\mu\rangle \int dE \; W_{\mu n} \, \langle n, E| + h.c. \right). \tag{4.61}$$

Agora, como o Hamiltoniano escrito como sendo $H = H_0 + \nu$, o conjunto de estados pertence a um espaço de Hilbert de dimensão infinita. Esse conjunto pode ser visto como um espaço de estados, dotado de um certo produto interno $\langle\cdot,\cdot\rangle$, carregando, de acordo com o teorema da representação de Riesz, um único operador contínuo H tal que $H : H \to H$ com a seguinte propriedade:

$$\left\langle H\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)} \right\rangle = \left\langle \Phi^{(1)}, H^\dagger \Phi^{(2)} \right\rangle, \quad \forall \Phi^{(1)}, \Phi^{(2)} \in H. \tag{4.62}$$

O operador $H^\dagger$ é chamado de operador adjunto e é uma generalização do cunjugado complexo. Vamos admitir que o hamiltoninano com interação seja hermitiano ($H = H^\dagger$) e obter os estados $\Phi^{(1)}$ e $\Phi^{(2)}$ e as correspondentes restrições sobre tais estados diante da hermiticidade. Se o hamiltoninano H é fixado, é possível obter a matriz de espalhamento S correspondente [113, 114, 115]. Observamos na subseção (4.2.1), que a solução da Equação (4.33) é do tipo $\Psi_n(x_l, y_l) = \varphi_n(x_l)\chi_n(y_l)$, com parte tipo ondas planas propagantes ($\varphi_n(x_l)$) e uma parte tipo onda estacionária ($\chi_n(y_l)$) no canal aberto n no guia l.Uma maneira bastante apropriada de denotar todas as soluções é escrever um "vetor solução"cuja entrada n é a solução de rótulo n para a equação de Schrödinger no guia. Assim, a solução pode ser escrita como:

$$\mathbf{\Psi} = (\Psi_1(x, y), \Psi_2(x, y), \cdots, \Psi_M(x, y))^T. \tag{4.63}$$

Note que existem M canais abertos, isto é, dado que o sistema tem energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e que o vetor de onda $k_n = \left[k^2 - (\frac{n\pi}{d})^2\right]$ deve ser real para uma onda propagante; então, M deve ser menor ou igual ao maior inteiro anterior a kd/π. Os outros canais são fechados (evanescentes) e não contribuem para o transporte quântico. Observe que, seguindo a Figura (4.4), a largura do guia é dado por d.

Vamos determinar a matriz de espalhamento S para um caso particular. Considere que a região de interação está desacoplada dos guias. Com isso, teremos a ausência de fluxo de probabilidade através da interface em $x = 0$. E assim, teremos a seguinte condição de contorno:

$$\left.\frac{\partial \varphi_n}{\partial x}\right|_{x=0} = 0. \tag{4.64}$$

Diretamente da Equação (4.36) temos:

$$\varphi_n(x) = a_n e^{+ik_n x} + b_n e^{-ik_n x}, \tag{4.65}$$

onde os sinais de (+) e (-) representam respectivamente as ondas saindo e entrando na cavidade caótica (região de interação) com suas respectivas amplitudes. Assim, aplicando a condição de contorno, Equação (4.64), obtemos:

$$\left.\frac{\partial \varphi_n(x)}{\partial x}\right|_{x=0} = -ik_n a_n + ik_n b_n = 0. \tag{4.66}$$

Isso equivale a escrever a relação entre os vetores amplitudes dos canais de "entrada", $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_M)^T$, e dos canais de "saída", $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_M)^T$, como:

$$b_n = \delta_{nm} a_m. \tag{4.67}$$

Com isso, uma vez fixada a condição de contorno de não-interação, concluímos que a matriz de espalhamento S é a matriz identidade.

Para que haja interação, devemos impor condições de contorno mais gerais que ampliem o espaço de Hilbert dos estados do sistema. Se considerarmos os N_c estados ortogonais da região de interação e os agruparmos como um vetor $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_{N_c})^T$, ele pode ser obtido diretamente da matriz aleatória H_{ri} da cavidade. Os auto-estados do hamiltoniano, que descreve a interação dos estados ressonantes da cavidade com os canais propagantes no guia, podem ser escritos como:

$$\mathbf{\Phi} = (\mathbf{u}, \mathbf{\Psi})^T, \tag{4.68}$$

e pertecem ao espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(\Re^+, C^M) \oplus C^N$, dotado do produto escalar:

$$\langle \mathbf{\Phi_1} | \mathbf{\Phi_2} \rangle = \mathbf{u_1}^\dagger \mathbf{u_2} + \langle \mathbf{\Psi_1} | \mathbf{\Psi_2} \rangle ; \quad \langle \mathbf{\Psi_1} | \mathbf{\Psi_2} \rangle = \int_{-d/2}^{+d/2} dy \int_0^\infty dx \mathbf{\Psi_1}^\dagger \mathbf{\Psi_2}, \tag{4.69}$$

onde consideramos que a propagação ocorre no semi-eixo x positivo. Vamos definir o operador hamiltoninano atuando nesse espaço de Hilbert como:

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} \hat{H}_{ri} & \hat{W}^{(1)} \\ \hat{W}^{(2)} & \hat{H}_c \end{bmatrix}. \tag{4.70}$$

então,

$$\hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} \hat{H}_{ri}\mathbf{u} & \hat{W}^{(1)}\mathbf{\Psi} \\ \hat{W}^{(2)}\mathbf{u} & \hat{H}_c\mathbf{\Psi} \end{bmatrix}. \tag{4.71}$$

O operador $\hat{H}_{ri}$ atua na região de interação e é representado pela matriz hamiltoniana $N_c \times N_c$, cujos auto-estados formam as ressonâncias do sistema aberto. Os operadores $W^{(1)}$ e $W^{(2)}$ descrevem o acoplamento dos canais propagantes com as ressonâncias. E o operador diagonal $\hat{H}_c = (-\hbar^2/2m)\text{diag}(\partial_x^2+\partial_y^2, \partial_x^2+\partial_y^2, \cdots, \partial_x^2+\partial_y^2)$ representa o operador energia cinética do guia. Admitindo que o acoplamento é local ao longo do guia de onda, podemos escolher, por simplicidade, que $\hat{W}^{(2)} = 0$ e $\hat{W}^{(1)}$, mantendo a hermiticidade, de modo que:

$$\hat{W}^{(1)}\Psi = \int_{-d/2}^{+d/2} dy W(y)\Psi(0,y) = \hat{w}\varphi(0), \tag{4.72}$$

onde $\varphi(0) = (\varphi_1(0), \cdots, \varphi_M(0))$ e $\hat{w}$ tem entradas $w_{\mu n} = \int_{-d/2}^{+d/2} W_{\mu n}\chi_n(y)dy$, com $\mu = 1, 2, \cdots, N_c$ e $n = 1, \cdots, M$. Dessa forma, podemos escrever como o operador hamiltoninano atua nos estados do espaço de Hilbert estendido

$$\hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} \hat{H}_{ri}\mathbf{u} + \hat{w}\varphi(0) \\ \hat{H}_c\mathbf{\Psi} \end{bmatrix}. \tag{4.73}$$

O operador definido acima não é, em geral, auto-adjunto, uma vez que:

$$\left\langle \hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi_1} | \mathbf{\Phi_2} \right\rangle = \mathbf{u_1}^\dagger H_{ri}^\dagger \mathbf{u_2} + \left\langle \hat{H}_c\mathbf{\Psi_1} | \mathbf{\Psi_2} \right\rangle + \varphi_1^\dagger(0)\hat{w}\mathbf{u_2} \tag{4.74}$$

e

$$\left\langle \mathbf{\Phi_1} | \hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi_2} \right\rangle = \mathbf{u_1}^\dagger H_{ri}\mathbf{u_2} + \left\langle \mathbf{\Psi_1} | \hat{H}_c\mathbf{\Psi_2} \right\rangle + \mathbf{u_1}^\dagger\hat{w}\varphi_2(0). \tag{4.75}$$

Subtraindo a Equação (4.74) da Equação (4.75):

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi_1} | \mathbf{\Phi_2} \right\rangle - \left\langle \mathbf{\Phi_1} | \hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi_2} \right\rangle = \mathbf{u_1}^\dagger H_{ri}^\dagger \mathbf{u_2} + \left\langle \hat{H}_c\mathbf{\Psi_1} | \mathbf{\Psi_2} \right\rangle + \varphi_1^\dagger(0)\hat{w}\mathbf{u_2} \\ - \mathbf{u_1}^\dagger H_{ri}\mathbf{u_2} - \left\langle \mathbf{\Psi_1} | \hat{H}_c\mathbf{\Psi_2} \right\rangle - \mathbf{u_1}^\dagger\hat{w}\varphi_2(0). \end{aligned} \tag{4.76}$$

Como H_{ri} é hermitiano ($H_{ri} = H_{ri}^\dagger$), o termo $\mathbf{u_1}^\dagger H_{ri}^\dagger \mathbf{u_2}$ é cancelado. Da definição de $\hat{H}_c$ e do produto escalar $\langle \mathbf{\Psi_1} | \mathbf{\Psi_2} \rangle$, pode-se encontrar depois que integrar por partes em x que:

$$\left\langle \hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi_1}|\mathbf{\Phi_2}\right\rangle - \left\langle \mathbf{\Phi_1}|\hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi_2}\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{\partial\varphi_1^\dagger}{\partial x}\right)\varphi_2 - \varphi_1^\dagger\left(\frac{\partial\varphi_2}{\partial x}\right)\right\}\Big|_{x=0} + \varphi_1^\dagger\hat{w}^\dagger\mathbf{u_2} - \mathbf{u_1}^\dagger\hat{w}\varphi_2(0). \tag{4.77}$$

Observando a Equação (4.77), podemos concluir que o operador $\hat{\mathbf{H}}$ não é auto-adjunto. Para impor essa condição é preciso de vínculos gerais em $x = 0$ [114]. A escolha mais simpres é:

$$\hat{w}^\dagger\mathbf{u} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\Big|_{x=0}. \tag{4.78}$$

Uma vez garantida a hermiticidade do hamiltoniano, iremos considerar a equação de Schrödinger para o sistema acoplado, $H\mathbf{\Phi} = E\mathbf{\Phi}$. Ou seja,

$$\hat{\mathbf{H}}\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix}\hat{H}_{ri}\mathbf{u} + \hat{w}\varphi(0)\\ \hat{H}_c\mathbf{\Psi}\end{bmatrix} = E\begin{bmatrix}\mathbf{u}\\ \mathbf{\Psi}\end{bmatrix}. \tag{4.79}$$

O primeiro termo da Equação (4.79) estabelece que $H_{ri}\mathbf{u} + \hat{w}\varphi(o) = E\mathbf{u}$, apresentando assim uma conservação de energia em $x = 0$. Dessa forma, podemos escrever uma segunda relação entre os canais propagantes e as ressonâncias,

$$\mathbf{u} = (E - H_{ri})^{-1}\hat{w}\varphi(0). \tag{4.80}$$

Substituindo a Equação (4.80) em (4.78), temos:

$$\hat{w}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{w}\varphi(0) = \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\Big|_{x=0}. \tag{4.81}$$

Usando a parte longitudinal da função de onda no guia (φ), temos:

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\Big|_{x=0} = -i\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\mathbf{k}(\mathbf{a} - \mathbf{b}), \tag{4.82}$$

onde $\mathbf{k} \equiv \mathrm{diag}(k_1, k_2, \cdots, k_M)$ e os vetores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ tem como as entradas as amplitudes das auto-funções de H.

Usando a Equação (4.82) em (4.81), obtemos:

$$\hat{w}^\dagger(E - H_{ri})^{-1}\hat{w}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2}\mathbf{k}^{-1/2}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = -i\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2}\mathbf{k}^{1/2}(\mathbf{a} - \mathbf{b}). \tag{4.83}$$

A Equação anterior pode ser escrita de maneira a "conectar"as amplitudes de espalhamento na forma $\mathbf{b} = S\mathbf{a}$, onde S é a matriz de espalhamento dada por:

$$S = (\mathbb{1} - i\mathbf{F})(\mathbb{1} + i\mathbf{F})^{-1}; \quad \mathbf{F} = \pi W^{\dagger}(E - H_{ri})^{-1}W, \tag{4.84}$$

onde $W = \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2}}\hat{w}\mathbf{k}^{-1/2}$, e $\mathbb{1}$ é a matriz identidade de ordem M. Podemos reescrever S da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
S &= (\mathbb{1} - iF)(\mathbb{1} + iF)^{-1} = \mathbb{1} - 2iF(\mathbb{1} + iF)^{-1} \\
&= \mathbb{1} - 2i\Big[\pi W^{\dagger}(E - H_{ri})^{-1}W\Big]\sum_{l=0}^{\infty}\Big[i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri})^{-1}W\Big]^{l} \\
&= \mathbb{1} - 2\sum_{l=0}^{\infty}\Big[i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri})^{-1}\Big]^{l+1} \\
&= \mathbb{1} - 2i\pi W^{\dagger}\left\{\sum_{l=0}^{\infty}\Big[i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri})^{-1}W\Big]^{l}\right\}(E - H_{ri})^{-1}W \\
&= \mathbb{1} - 2i\pi W^{\dagger}\Big[\mathbb{1} + i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri})^{-1}W\Big]^{-1}(E - H_{ri})^{-1}W \\
&= \mathbb{1} - 2i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri} + i\pi WW^{\dagger})^{-1}W.
\end{aligned} \tag{4.85}$$

Essa é a fórmula de Mahaux-Weidenmüller para a matriz de espalhamento. É a matriz referente ao transporte de elétrons com energia E, H_{ri} é o hamiltoninano da cavidade caótica (região de interação) e W é uma matriz deterministica, não aleatória, que modela o acoplamento dos estados de ressonância da cavidade com os modos de propagação dos guias.

Devido a impossibilidade de se resolver a equação de Schrödinger para um sistema como o que está sendo tratado, parte do presente trabalho é a implementação numérica da matriz de espalhamento para o caso de dois terminais (guias), afim de se obter as propriedades de transporte e assim poder comparar com os resultados exatos obtidos na literatura. Nos capítulos seguintes descutiremos essa abordagem da matriz de espalhamento para o Bilhar de Schrödinger e Bilhar de Dirac. Antes de iniciarmos essa discussão, é importante saber como a matriz de espalhamento se comporta para o caso de múltiplos terminais - visto que umas das pespectivas futuras do trabalho seja a inclusão de mais terminais acoplado. Além disso, a matriz S possui vínculos, simetrias, que ajudam a descrever o sistema.

Sobre a generalização da fórmula de Mahaux-Weidenmüller, $S = \mathbb{1} - 2i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri} + i\pi WW^{\dagger})^{-1}W$, para incorporar vários terminais, iremos seguir todos os argumentos desta seção. Iremos indexar as amplitudes em cada terminal pelo índice $i = 1, \cdots, M$,

sobrescrito. Assim, os vetores de "entradas"e "saídas"podem ser escritos como:

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= (a_1^{(1)}, a_2^{(1)}, \cdots, a_{N_1}^{(1)}, \cdots, a_1^{M}, a_2^{(M)}, \cdots, a_{N_M}^{(M)}),\\ &\text{e}\\ \mathbf{b} &= (b_1^{(1)}, b_2^{(1)}, \cdots, b_{N_1}^{(1)}, \cdots, b_1^{M}, b_2^{(M)}, \cdots, b_{N_M}^{(M)}).\end{aligned} \tag{4.86}$$

Nesse caso, temos a introdução direta da matriz $\mathbf{k}$, generalizada para M terminais:

$$\begin{aligned}\mathbf{k} &= \text{diag}(k_1^{(1)}, k_2^{(1)}, \cdots, k_{N_1}^{(1)}, \cdots, k_1^{M}, k_2^{(M)}, \cdots, k_{N_M}^{(M)}),\\ \varphi(x) &= \Big(\frac{m}{2\pi\hbar^2\mathbf{k}}\Big)^{1/2}[e^{-i\mathbf{k}x}\mathbf{a} + e^{i\mathbf{k}x}\mathbf{b}],\end{aligned} \tag{4.87}$$

onde φ é um vetor cujas entradas são as funções de onda de cada modo propagante. Usando a Equação (4.87) e as mesmas condições de contorno já usadas, obtemos a mesma estrutura da fómula de Mahaux-Weidenmüller, com a matriz de acoplamento W escrita na forma:

$$W = \hat{w}\Big(\frac{2m}{\pi\hbar^2\mathbf{k}}\Big)^{1/2}, \tag{4.88}$$

onde $\hat{w} = (\hat{w}_1, \hat{w}_2, \cdots, \hat{w}_M)$ é o termo de acoplamento de todos os terminais. A matriz S correspondente pode ser decomposta, como na Equação (4.47), em blocos de reflexão e transmissão:

$$S = \begin{bmatrix} r_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1M} \\ t_{21} & r_{22} & \cdots & t_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{M1} & t_{M2} & \cdots & r_{MM} \end{bmatrix}. \tag{4.89}$$

A matriz S tem simetrias que ajudam a descrever o sistema e a principal dela está relacionada com a conservação de corrente, no que implica que $SS^\dagger = \mathbb{1}$, ou seja, na unitariedade de S. Seguindo a referência [116], podemos escrever a densidade de corrente no guia l como:

$$j_l \equiv \frac{\hbar}{m} Im \int_0^{W_l} dy \Big[\Psi_l^\dagger(\vec{r}_l)\frac{\partial}{\partial x}\Psi_l(\vec{r}_l)\Big]_{x_l=0}. \tag{4.90}$$

Substituindo as Equações (4.43) e (4.40) na Equação (4.90), temos:

$$j_l = \sum_{n=1}^{N_l}(|b_n^{(l)}|^2 - |a_n^{(l)}|^2). \tag{4.91}$$

Pela lei da conservação da carga, temos aqui uma uma conservação de corrente ($\sum_{l=1}^{L} j_l$=0), temos [45]:

$$\sum_{l=1}^{L}\sum_{n=1}^{N_l}|a_n^{(l)}|^2=\sum_{l=1}^{L}\sum_{n=1}^{N_l}|b_n^{(l)}|^2, \tag{4.92}$$

utilizando a forma vetorial e o fato que $\mathbf{b}=S\mathbf{a}$, obtemos:

$$\begin{aligned}&\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}=\mathbf{b}^\dagger\mathbf{b}\\&(\mathbf{a})^\dagger(\mathbf{a})=(S\mathbf{a})^\dagger(S\mathbf{a})=(\mathbf{a})^\dagger[S]^\dagger[S](\mathbf{a}),\end{aligned} \tag{4.93}$$

então,

$$S^\dagger S=\mathbb{1}=SS^\dagger, \tag{4.94}$$

que é a simetria fundamental da matriz S. É o único vínculo imposto a matriz S na ausência de qualquer outra simetria. Para o sistema que preserva a simetria de reversão tempral $S_{rev}=S$, temos:

$$S_{rev}=(S^*)^{-1}\ \text{ ou }\ SS^*=\mathbb{1}, \tag{4.95}$$

onde S_{rev} é a matriz de espalhamento revertida no tempo e S^* a conjugada. Usando a unitariedade da matriz S, temos:

$$S=S^T, \tag{4.96}$$

ou seja, a simetria de reversão temporal implica que a matriz S é simétrica. Em situações onde o spin das partículas não pode ser ignorado, como no caso de forte interação spin-órbita ou a presença de impurezas magnéticas, nesse caso os graus de liberdade de spin podem ser acoplados convenientemente no formalismo de quatérnions [39].

CAPÍTULO 5

ABORDAGEM MAHAUX-WEIDENMÜLLER

Chamaremos aqui de Modelo Hamiltoniano Mahaux-Weidenmüller ($MHMW$) a descrição hamiltoniana da matriz de espalhamento usando a fórmula de Mahaux-Weidenmüller, dada por:

$$S(E) = \mathbb{1} - 2i\pi W^{\dagger}(E - H_{ri} + i\pi W W^{\dagger})^{-1} W. \tag{5.1}$$

O sistema fundamental para o estudo do transporte na física mesoscópica é o ponto quântico. O caso da cavidade caótica acoplada a dois guias (ponto quântico) pode ser esquematizado pela Figura (5.1). Em suas extremidades 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 por esta barreira [117].

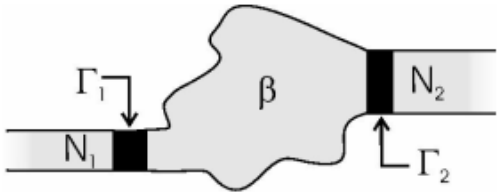


Figura 5.1 Visão esquemática de um ponto quântico. Cada guia é caracterizado pelo número de canais de espalhamento abertos N_1 e N_2, associados respectivamente aos guias um e dois. Γ_1 e Γ_2 são as transparências das barreiras. As simetria físicas da dinâmica dos elétrons na cavidade caótica estão rotuladas pela simetria β do sistema. Figura retirada da Ref. [118].

Neste capítulo, mostraremos como construir algoritmos para simular redes de pontos quânticos acoplados a dois guias condutores com número arbitrários de canais de espalhamentos abertos e contatos de barreiras quaisquer. Em nossos resultados, fixamos o número de guias acoplados como sendo dois, e por simplicidade que todos os canais possuem a mesma probabilidade de tunelamento $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$. Nos próximos capítulos, faremos a comparação do $MHMW$ com os resultados consolidados via método diagramático. A matriz S deve ser gerada inúmeras vezes, de modo a se obter um ensemble de matrizes suficientemente grande para analisar estatisticamente o sistema.

5.1 BILHAR DE SCHRÖDINGER

Partindo da Equação (5.1), temos aqui: **H** é o hamiltoniano $M \times M$ da cavidade caótica, pertencente ao ensamble gaussiano, **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 $\mathbf{S}(\mathbf{E})$ é a matriz de espalhamento $N_T \times N_T$ referente ao transporte dos elétrons com energia E.

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

$$W = \big(W_1, W_2\big), \tag{5.2}$$

a partir da forma geral $W = \big(W_1, W_2, \cdots, W_L\big)$, onde as matrizes W_l $(M \times N_l)$ estão associadas aos l-ésimos guias (No nosso caso, $l = 1$ ou 2 é o índice dos guias). Para desprezar processos diretos, já que na transmissão direta não há formação de um estado ressonante na cavidade, precisamos impor a seguinte condição de ortogonalidade [119, 120, 121]:

$$W_p^{\dagger} W_q = \mathbf{w_p} \frac{M\Delta}{\pi^2} \delta_{p,q}, \tag{5.3}$$

onde Δ é o espaçamento médio de níveis da cavidade e $\mathbf{w_p}$ é uma matriz diagonal dada por:

$$\mathbf{w_p} = \mathrm{diag}(w_{p,1}, w_{p,2}, \cdots, w_{p,N_p}), \tag{5.4}$$

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

$$\Gamma_{p,j} \equiv \mathbb{1} - |\left\langle S_{jj}^{pp} \right\rangle|^2, \tag{5.5}$$

onde $\langle S \rangle = (\mathbb{1} - i\pi W^{\dagger} W/\lambda)(\mathbb{1} + i\pi W^{\dagger} W/\lambda)^{-1}$ é a média da matriz de espalhamento. Então:

$$\Gamma_{p,j} \equiv \mathbb{1} - \left| \frac{\mathbb{1} - i w_{p,j}}{\mathbb{1} + i w_{p,j}} \right|^2 = \frac{4 w_{p,j}}{1 + 2 w_{p,j} + w_{p,j}^2}. \tag{5.6}$$

Definindo $w_{p,j} = \exp(-\alpha_{p,j})$, temos:

$$\begin{aligned} &\alpha_{p,j} \equiv -\ln(w_{p,j}), \\ &\quad \text{e} \\ &\Gamma_{p,j} = \frac{4\exp(-\alpha_{p,j})}{1 + 2\exp(-\alpha_{p,j}) + \exp(-2\alpha_{p,j})} = \mathrm{sech}^2(\alpha_{p,j}/2). \end{aligned} \tag{5.7}$$

Já que queremos simular uma cavidade caótica, ou ponto quântico caótico, apenas características locais universais no espectro serão considerados. Sendo assim, vamos desprezar a dependencia da matriz de espalhamento com a energia fazendo $E = 0$ e impor a universalidade dos observáveis construindo ensembles gaussianos de modo que $M \to \infty$ ou $M \gg N_T$.

Considerando que todos os canais possuam a mesma probabilidade de tunelamento $\Gamma_p = \Gamma_{p,j}$ e usando as vantagens das relações de ortogonalidade da base discreta de Fourier,

$$\frac{2}{N+1}\sum_{n=1}^{N}\sin\left(\frac{n\pi m}{N+1}\right)\sin\left(\frac{n\pi m'}{N+1}\right) = \delta_{mm'}, \tag{5.8}$$

podemos parametrizar as matrizes de acoplamento da seguine forma:

$$W_1 = b_1\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(M+1)}}\begin{pmatrix} \sin(\frac{\pi}{M+1}) & \sin(\frac{2\pi}{M+1}) & \cdots & \sin(\frac{N_1\pi}{M+1}) \\ \sin(\frac{2\pi}{M+1}) & \sin(\frac{4\pi}{M+1}) & \cdots & \sin(\frac{2N_1\pi}{M+1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sin(\frac{M\pi}{M+1}) & \sin(\frac{2M\pi}{M+1}) & \cdots & \sin(\frac{N_1M\pi}{M+1}) \end{pmatrix}$$

e (5.9)

$$W_2 = b_2\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(M+1)}}\begin{pmatrix} \sin(\frac{\pi(N_1+1)}{M+1}) & \sin(\frac{\pi(N_1+2)}{M+1}) & \cdots & \sin(\frac{N_T\pi}{M+1}) \\ \sin(\frac{2\pi(N_1+1)}{M+1}) & \sin(\frac{2\pi(N_1+2)}{M+1}) & \cdots & \sin(\frac{2N_T\pi}{M+1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sin(\frac{M\pi(N_1+1)}{M+1}) & \sin(\frac{M\pi(N_1+2)}{M+1}) & \cdots & \sin(\frac{N_TM\pi}{M+1}) \end{pmatrix},$$

onde, $b_1 = \frac{\sqrt{\Gamma_1}}{1+\sqrt{1-\Gamma_1}}$ e $b_2 = \frac{\sqrt{\Gamma_2}}{1+\sqrt{1-\Gamma_2}}$

Os blocos de reflexão e transmissão da matriz de espalhamento S são dados por:

$$\begin{cases} r_{N_1\times N_1} = \mathbb{1} - 2\pi i W_1^\dagger\big[-H + i\pi(W_1W_1^\dagger + W_2W_2^\dagger)\big]^{-1}W_1, \\ r'_{N_2\times N_2} = \mathbb{1} - 2\pi i W_2^\dagger\big[-H + i\pi(W_1W_1^\dagger + W_2W_2^\dagger)\big]^{-1}W_2, \\ t'_{N_2\times N_1} = -2\pi i W_2^\dagger\big[-H + i\pi(W_1W_1^\dagger + W_2W_2^\dagger)\big]^{-1}W_1, \\ t_{N_1\times N_2} = -2\pi i W_1^\dagger\big[-H + i\pi(W_1W_1^\dagger + W_2W_2^\dagger)\big]^{-1}W_2, \end{cases} \tag{5.10}$$

Com as matrizes da Equação (5.9) e com a TMA abordada anteriormente para a composição dos elementos da matriz hamiltoniana H da cavidade caótica, podemos fazer o uso da Equação (5.1) para obter a matriz de espalhamento do sistema, e assim poder extrair os autovalores de transmissão que caracterizam o ponto quântico.

5.1.1 Geração Numérica

Iremos nessa seção explicar como se deu o precesso de geração numérica que modela o bilhar de Schrödinger usando o modelo hamiltoninano. Ou seja, nosso objetivo a

princípio é determinar a matriz de espalhamento **S** usando as simetrias inerentes ao sistema em questão, usando a equação (5.1). Pois como sabemos, podemos extrair todas as informações do sistema conhecendo a matriz de espalhamento. Observando a equação para **S**, percebemos que temos que gerar duas matrizes, **H** e **W**.

O hamiltoninano **H** ($M \times M$), da região de interação, onde descreve a dinâmica no interior da cavidade, tem elementos que são descritos por números aleatórios independentes, que por sua vez pertecem ao Ensembles Gaussiano. Esses números, como sabemos, possuiem média e variância bem específica, respectivamente dada pelas equações (4.14) e (4.15). Como elas dependem da simetria β, construimos três hamiltonianos diferentes, relativos aos três ensembles. Ou seja, no fim das contas, contruimos três matrizes de espalhamento, cada uma associada a um ensamble. Pois bem, esses hamiltonianos são:

(**i**) Para o EGO: $H = H^0$:

Temos uma matriz real e simétrica. Sendo assim, geramos números aleatórios de ordem $M \times M$, e impomos a relação das equações (4.14) e (4.15), onde a média é nula com variância $2\lambda^2/M$ na diagonal ($\mu = \nu$) e λ^2/M fora da diagonal (parte triangular superior e inferior) da matriz real simétrica. Ou seja, construímos a parte superior de forma que a parte infeior seja simétrica a ela, com seus elementos fora da diagonal sendo $a_{ij} = a_{ji}$.

(**ii**) Para o EGU: $H = H^0 + iH^1$:

Temos uma matriz com parte real e simétrica (H^0) e com parte imaginária e antissimétrica (com H^1 antissimétrica de H). A parte simétrica é similar ao que foi feito anteriormente, nesse caso teremos a média que continua sendo nula com variância $2\lambda^2/M$ na diagonal ($\mu = \nu$) e $\lambda^2/2M$ fora da diagonal (parte triangular superior e inferior e inferior) da matriz real simétrica. A parte antissimétrica H^1, nesse caso temos para $k > 0$, logo, pela equação (4.15), temos a variância com elementos reais com sua diagonal nula e com $\lambda^2/2M$ fora da diagonal (parte triangular superior e inferior), nesse caso com a diagonal inferior oposta à superior (já que é antissimétrica), com seus elementos nesse caso sendo $a_{ij} = -a_{ji}$ fora da diagonal.

(**iii**) Para o EGS:

Sabemos, que os elementos de **H** podem ser escritos em termos de uma representação quaterniônica na base de Pauli, ou seja,

$$H = H^0 \otimes \mathbb{1} + i \sum_{k=1}^{3} H^k \otimes \sigma_k, \tag{5.11}$$

onde $i = \sqrt{-1}$, H^k com $k = 1, 2$ ou 3 é uma matriz aleatória real, $\mathbb{1}$ e σ_k são respectivamente a matriz unitária e as matrizes de Pauli dadas por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; ; \; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; \text{ e } \; \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.12}$$

Note que o conjugado hermitiano de H da Equação (5.11) pode ser escrita como: $H^\dagger = (H^0)^T \otimes \mathbb{1} - i \sum_{k=1}^{3} (H^k)^T \otimes \sigma_k$, e que portanto a parte real de H deve ser simétrica, e as partes imaginárias antissimétricas. Os procedimento a partir daí é similar ao feito anteriormente. A média é sempre nula, a parte simétrica (H^0), com $k = 0$, temos a variância dada por: na diagonal temos $2\lambda^2/M$ e fora da diagonal (parte triangular inferior e superior) $\lambda^2/4M$ (já que temos $\beta = 4$). Para H^k, com $k = 1, 2$ e 3 temos média nula, e variância dada por: na diagonal temos elementos zeros (já que $k > 0$) e fora da diagonal $\lambda^2/4M$.

Com isso, geramos as matrizes H's, relativos aos tês ensembles de Wigner-Dyson. Para garantir a universalidade dos observáveis, construímos o ensemble gaussiano, de modo que $M > N_T$. Entramos no programa com $M = 200$, e com isso geramos matrizes aleatórias de dimensão 200×200. Com essas matrizes impusemos as condições para média e variância dos seus elementos (que por sua vez dependem da simetria β). Isso levou o hamiltoniano a terem dimensões: 200×200 para EGO e EGU, e 400×400 para o EGS.

Para a geração numérica do acoplamento $\mathbf{W}$, usamos a Equação (5.9). Onde pudemos analisar situações com e sem barreira de potencial. E com isso recuperar resultados já conhecidos na literatura, bem como expandimos esses resultados para situações onde só com a geração numérica é possível analisar. De posse das matizes H's e W, construímos nossas matrizes de espalhamento, já que em nossa construção geramos três matrizes H, uma para cada ensemble.

De posse das matrizes S, uma para cada ensemble, fomos capazes de determinar a condutância do sistema, usando a Equação $G = \frac{2e}{h} \mathrm{T}r(tt^\dagger)$ (Eq. 4.54), que por sua vez pode ser escrita pela matriz de espalhamento: $G = \frac{2e^2}{h} Tr(C_1 S C_2 S^\dagger)$ (Eq. 4.55). Como vimos na seção 4.2.2, C_1 e C_2 são matrizes de projeção sobre os respectivos guias (terminais), e são definidas por:

$$C_1 = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{N_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad C_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_{N_2} \end{bmatrix}, \tag{5.13}$$

onde $\mathbb{1}_i$ ($N_i \times N_i$) é a matriz identidade e N_i é o número de canais abertos no i-ésimo terminal. Usando a Equação $P = P_0 Tr[tt^\dagger(1 - tt^\dagger)]$, $P_0 = \frac{4e^2 V}{h}$ (Eq. 4.58), podemos determinar também a potência do ruído de disparo usando a matriz de espalhamento e os projetores. Usando a definição de variância, somos capazes de determinar seus respectivos valores. A matriz S foi gerada inúmeras vezes, de modo a se obter um ensemble de matrizes suficientemente grande para analisar estatisticamente o sistema. E assim poder extrair médias tanto da condutância quanto para o ruído.

5.2 BILHAR DE DIRAC

Seguiremos a mesma proposta vista para o bilhar de Schrödinger. Note que nesse caso, o hamiltoniano **H** do sistema é escrito em forma de blocos fora da diagonal, como mostrada na Equação (4.18). Onde seus elementos são descritos pela matriz aleatória τ $(M \times M)$. Com média e variância bem específica. Dessa forma, o hamiltoniano terá dimensão $2M \times 2M$. A matriz de espalhamento **S** irá ter dimensão $\bar{N}_T \times \bar{N}_T$, onde $\bar{N}_T = \bar{N}_1 + \bar{N}_2$ já que estamos trabalhando com dois guias. Em nossa notação, $\bar{N}_l = 2N_l$, representando o número de canais abertos no l-ésimo guia. Dessa forma, definimos cada sub-rede com N_l canais abertos, e como o sistema é acoplado por duas sub-redes, temos assim $2N_l$ canais abertos no l-ésimo guia. Assim, e devido a simetria de sub-rede do sistema, o menor número possível de canais abertos em cada terminal (guia), é igual a dois.

A matriz **W** continua representando o acoplamento dos estados ressonantes com os modos propagantes. Ou seja, todas as combinações ou interações das ressonâncias do bilhar de Dicar caótico acopladas aos canais abertos dos L terminais, satisfazem a condição de ortogonalidade dada pela Equação (5.3). Podemos separar em duas partes, Equação (5.2), assim como foi feito para o bilhar de Schrödinger. Além disso, diferentemente do caso anterior, devido a uma condição especial imposta a matriz S, devido a simetria de sub-rede, teremos uma relação imposta a matriz W dada por:

$$\sigma_z W \Sigma_z = W, \tag{5.14}$$

onde Σ_z (generalização $2N_T$-dimensional da matriz de Pauli) é

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{N_T} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{N_T} \end{pmatrix}_{2N_T \times 2N_T}. \tag{5.15}$$

Iremos considerar mais uma vez, para a matriz S, $E = 0$ (o sistema no ponto de Dirac). É um ponto especial devido as duas sub-redes interconectadas e onde se pode observar propriedades de transporte bastante interessantes. Temos mais uma vez que garantir a universalidade dos observáveis, e para isso iremos fazer $M \gg N_T$. Garantindo assim que o número de ressonânias dentro do bilhar seja grande. Iremos mostrar agora que a SSR implica na condição especial imposta a matriz S que nos leva a Equação (5.14). Vejamos:

Sabemos que a SSR nos leva na Equação (4.16), $H = -\sigma_z H \sigma_z$, onde σ_z é dado pela Equação (4.17). Satisfazendo as relações: $\sigma_z = \sigma_z^\dagger = \sigma_z^{-1}$; $\sigma_z^2 = \mathbb{1}_{2M \times 2M}$. A matriz de espalhamento $S(E)$ $(2N_T \times 2N_T)$, Equação (5.1), pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S(E) &= \mathbb{1} + 2i\pi W^\dagger (H - E - i\pi W W^\dagger)^{-1} W \\ &= \mathbb{1} + 2i\pi W^\dagger (-\sigma_z H \sigma_z - E - i\pi W W^\dagger)^{-1} W \\ &= \mathbb{1} - 2i\pi W^\dagger \sigma_z (H + E + i\pi \sigma_z W W^\dagger \sigma_z)^{-1} \sigma_z W. \end{aligned} \tag{5.16}$$

Por conveniência, iremos introduzir uma matriz identidade de dimensão $2N_T \times 2N_T$ através da matriz Σ_z ($\Sigma_z = \Sigma_z^\dagger = \Sigma_z^{-1}$; $\Sigma_z^2 = \mathbb{1}_{2N_T \times 2N_T}$), portanto,

$$\begin{aligned} S(E) &= \mathbb{1} - 2i\pi\Sigma_z\Sigma_z W^\dagger \sigma_z (H + E + i\pi\sigma_z W \Sigma_z \Sigma_z W^\dagger \sigma_z)^{-1} \sigma_z W \Sigma_z \Sigma_z \\ &= \Sigma_z \Big[\mathbb{1} - 2i\pi\Sigma_z W^\dagger \sigma_z (H + E + i\pi\sigma_z W \Sigma_z \Sigma_z W^\dagger \sigma_z)^{-1} \sigma_z W \Sigma_z \Big] \Sigma_z. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Tomando o limite da independência estatística da matriz S, $M \to \infty$, e considerando a forma dos elementos da matriz W, temos:

$$(W_p)_{m,n} = b\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(M+1)}} \sin\left[\frac{m\Big(\sum_{i=0}^{p-1} N_i + n\Big)\pi}{M+1}\right], \tag{5.18}$$

onde $m = 1, 2, \cdots, 2M$ e $n = 1, 2, \cdots, 2N_p$. Observe que diretamente da matriz S temos: $S^\dagger(-E) = \mathbb{1} - 2i\pi W^\dagger (H + E + i\pi W W^\dagger)^{-1} W$, e comparando com a Equação (5.17) concluimos que:

$$\sigma_z W \Sigma_z = W. \tag{5.19}$$

Portando, a SSR e a relação de anti-comutação imposta a H nos leva a matriz de espalhamento ter a seguinte simetria:

$$S(E) = \Sigma_z S^\dagger(-E)\Sigma_z \;\text{ ou } S(0) = \Sigma_z S^\dagger(0)\Sigma_z \;\text{ para E} = 0. \tag{5.20}$$

Perceba que a simetria quiral proporciona vínculos específicos para a matriz de espalhamento, além de termos outra relação imposta a matriz W (Equação 5.14).

5.2.1 Geração Numérica

O procedimento utilizado foi similar ao feito para o bilhar de Schrödinger. O hamiltoninano do sistema para o caso do Bilhar de Dirac, como sabemos, é descrito na forma de blocos fora da diagonal dada pela Equação (4.18). H nesse caso tem dimensões $2M \times 2M$, já que τ, nossa matriz aleatória, tem dimensões $M \times M$. Os elementos de τ possuem média e variância dadas respectivamente pelas equaccões (4.31) e (4.32). Ou seja, geramos matrizes aleatórias, e impusemos que a média seja nula com variância dada por $\lambda^2/\beta M$. Assim, para cada ensemble, temos sua variância específica. E com isso geramos nossas três matrizes hamiltonianas, uma para cada ensemble. Sendo assim temos:

(**i**) Para o chEGO ($\beta = 1$): $\tau = \tau^0$:

Os elementos de H nesse caso devem ser reais. Com isso, geramos uma matriz aleatória ($\tau_{M\times M}$) com média nula e variância λ^2/M. Em seguida constuímos nossa matriz H em blocos com zeros na diagonal ($0_{M\times M}$) e fora da digonal com τ e $\tau^\dagger$, como mostrada na equação (4.18).

(**i**) Para o chEGU ($\beta = 2$): $\tau = \tau^0 + i\tau^1$:

Os elementos de H nesse caso são complexos. Não importando o valor de k da equação (4.32), geramos matrizes aleatórias ($\tau_{M\times M}$) com média nula e variância nesse caso $\lambda^2/2M$, e assim construímos nossa matriz hamiltoninana. Observe que nesse caso geramos duas matrizes aleatórias, correspondentes a τ^0 e τ^1.

(**i**) Para o chEGS ($\beta = 4$): $\tau = \tau^0 \otimes \mathbb{1} + i\sum_{k=1}^{3} \tau^k \otimes \sigma_k$:

A matriz H possui elementos quaterniônicos. Onde $i = \sqrt{-1}$, τ^k com $k = 1, 2$ ou 3 é uma matriz aleatória real, $\mathbb{1}$ e σ_k são respectivamente a matriz unitária e as matrizes de Pauli. Geramos matrizes aleatórias, com média nula e variância sempre $\lambda^2/4M$.

Com isso, geramos as três matrizes H, relativo aos três ensembles quirais. Usamos em nosso programa $M = 200$, e com isso geramos inicialmente matrizes aleatórias de dimensão 200×200. Com isso nossas matrizes hamiltonianas ficaram com dimensões: 400×400 para chEGO e chEGU, e 800×800 para o chEGS devido a degenerescência do spin.

Para a geração numérica do acoplamento $\mathbf{W}$, $W = \big(W_1 W_2\big)$, usamos a Equação (5.18). Sendo assim, a matriz determinística W passa a possuir dimensões: $2M \times \bar{N}_T$ para chEGO e chEGU, e $4M \times 2\bar{N}_T$ para o chEGS devido a degenerescência. Um fato importante desse sistema, diferentemente do caso do bilhar de Schrödinger, é a condição especial imposta a matriz W (Eq. 5.14): $\sigma_z W \Sigma_z = W$.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS

6.1 RESULTADOS ANALÍTICOS

Iremos nessa seção explicitar algumas equações exatas conhecidas na literatura sobre os Bilhares de Schrödinger e Dirac caóticos acoplados a dois terminais. Essas informações serão úteis como forma de comparar e verificar a eficiência do método numérico. Para contatos ideais muitos dos reultado já são bem conhecidos e discutidos. Entendemos por contados ideais quando o acoplamento entre a cavidade e o guia é ideal, ou seja, sem barreira de potencial. Já para contatos não ideais, com barreira de potencial, muito pouco ou nada se conhece. É importante ressaltar que o caso sem barreira de potencial se refere a $\Gamma = 1$ e à medida que diminuímos o valor de Γ, já que $\Gamma \in [0, 1]$, isso compreende a valores de barreira cada vez maiores. Ou seja, a barreira de potencial cresce com a diminuição de Γ.

Separamos os resultados conhecidos na literatura em duas situações: com e sem barreira de potencial para ambos os bilhares - se tratando dos casos ideais e não-ideais. Para o Bilhar de Schrödinger Sem Barreira de Potencial, temos equações exatas como média e variância da condutância assim como a média e variância da potência do ruído de disparo, além de alguns resultados para o caso com barreira de potencial (regime semiclássico $N \gg 1$). Para o Bilhar de Dirac sem barreira de potencial, equações como média e variância da condutância e média da potência do ruído de disparo também foram explicitadas. Essa última equação em especial, Eq. (6.12), foi obtida recentemente via método diagramático e confirmada pelo nosso modelo - artigo publicado no Physical Review B [38]. Não é conhecido o resultado exato para a variância da potência do ruído de disparo sem barreira de potencial, e não temos resultados conhecidos, como já mencionado, para o caso do Bilhar de Dirac caótico com barreira de potencial - e nesse caso obtemos resultados novos puramente numéricos.

Para falarmos dos termos de localização e anti-localização fraca, sabemos que a condutância e o ruído de disparo são dados em termos dos blocos das matrizes de transmissão, como mostrado nas equações abaixo.

$$G = G_0 \mathbf{Tr}(tt^\dagger), \tag{6.1}$$

$$P = P_0 \mathbf{Tr}\left[tt^\dagger(1 - tt^\dagger)\right], \tag{6.2}$$

onde, $G_0 = 2e^2/h$ e $P_0 = 4e^2V/h$.

Os termos de localização fraca (médias) $G^{Wl}_{\beta=1}$ e $P^{Wl}_{\beta=1}$, e os termos de anti-localização (médias) $G^{Wl}_{\beta=4}$ e $P^{Wl}_{\beta=4}$ são dadas por:

$$\begin{cases} G_\beta^{Wl} = \langle G\rangle_\beta - \langle G\rangle_{\beta=2} \\ \\ P_\beta^{Wl} = \langle P\rangle_\beta - \langle P\rangle_{\beta=2} \end{cases} \tag{6.3}$$

Podemos assim, a partir das equações exatas já conhecidas, determinar as equações para esses termos de localização e anti-localização fraca, e assim comparar com os resultados numéricos. Obtemos, como veremos em Resultados Numéricos, esses termos de localização em função da barreira de potencial Γ. Note que ao subtrair os termos $\langle G\rangle_{\beta=2}$ e $\langle P\rangle_{\beta=2}$, no qual contém apenas o termo clássico, obtemos puramente os termos de correção de interferência quântica. Esse fato foi visto com maiores detalhes na Subsessão 2.2.6 e no Capítulo 3, além de ser discutido um pouco mais no decorrer dos resultados.

6.1.1 Sem Barreira de Potencial

6.1.1.1 Bilhar de Schrödinger

A média e a variância da condutância são dadas, respectivamentes, pelas Equações (6.4) e (6.5) [43, 39]. Onde os β's ($\beta = 1, 2, 4$) estão relacionados com a simetria do sistema.

$$\langle G\rangle = G_0 \frac{N_1 N_2}{N_T - 1 + 2/\beta}, \tag{6.4}$$

$$\frac{var[G]}{G_0^2} = \frac{2N_1N_2(N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{\beta(N_T - 1 + 4/\beta)(N_T - 2 + 2/\beta)(N_T - 1 + 2/\beta)^2}. \tag{6.5}$$

A média da potência do ruído de disparo é dada pela Equação (6.6), já suas variâncias são dadas pelas Equações (6.7 $\rightarrow$ 6.9) [122].

$$\frac{\langle P\rangle}{P_0} = \frac{N_1N_2(N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{(N_T - 2 + 2/\beta)(N_T - 1 + 2/\beta)(N_T - 1 + 4/\beta)}. \tag{6.6}$$

$$\begin{aligned} var[P]_{\beta=1} = \Big\{ & [2N_1N_2(N_1{+}1)(N_2{+}1)(36N_1{+}36N_2{+}24N_1^2{+}24N_2^2{-}99N_1N_2^2{-}99N_1^2N_2{+} \\ & -8N_1^3N_2{-}8N_1N_2^3{+}4N_1^4N_2{+}4N_1N_2^4{+}74N_1^3N_2^2{+}74N_1^2N_2^3{+}64N_1^3N_2^3{+}20N_1^2N_2^4{+} \\ & +20N_1^4N_2^2{-}6N_1^5N_2{-}6N_1N_2^5{+}9N_1^4N_2^3{+}9N_1^3N_2^4{-}N_1^2N_2^5{-}N_1^5N_2^2{-}N_1^6N_2{-}N_1N_2^6{+} \\ & -26N_1^2N_2^2{-}22N_1N_2{-}41N_1^3{-}41N_2^3{-}30N_1^4{-}30N_2^4{+}4N_1^5{+}4N_2^5{+}6N_1^6{+}6N_2^6{+} \\ & +N_1^7{+}N_2^7)]/[(N_T{-}2)(N_T{-}1)(N_T)^2(N_T{+}1)^2(N_T{+}2)(N_T{+}3)^2(N_T{+}5)(N_T{+}7)] \Big\}. \end{aligned} \tag{6.7}$$

$$
\begin{aligned}
var[P]_{\beta=2} =& \Big\{ [N_1^2N_2^2(-6+9N_1^2+9N_2^2-26N_1^2N_2^2+8N_1^3N_2^3+6N_1N_2+4N_1^3N_2+ \\
&+4N_1N_2^3-4N_1^4-4N_2^4+N_1^6+N_2^6-2N_1N_2^5-2N_1^5N_2+N_1^2N_2^4+ \\
&+N_1^4N_2^2)]/[N_T^2(N_T+1)^2(N_T-1)^2(N_T+2)(N_T-2)(N_T+3)(N_T-3)] \Big\}.
\end{aligned} \tag{6.8}
$$

$$
\begin{aligned}
var[P]_{\beta=4} =& \Big\{ [N_1N_2(2N_1-1)(2N_2-1)(9N_1+9N_2-12N_1^2-12N_2^2+60N_1^4+60N_2^4-41N_1^3+ \\
&-41N_2^3+16N_1^5+16N_2^5-48N_1^6-48N_2^6+16N_1^7+16N_2^7-512N_1^3N_2^3+52N_1^2N_2^2+ \\
&+11N_1N_2-99N_1N_2^2-99N_1^2N_2+16N_1^3N_2+16N_1N_2^3+16N_1^4N_2+16N_1N_2^4+ \\
&+296N_1^3N_2^2-160N_1^4N_2^2-160N_1^2N_2^4-16N_1^5N_2^2-16N_1^2N_2^5+144N_1^4N_2^3+ \\
&+144N_1^3N_2^4+296N_1^2N_2^3+48N_1^5N_2+48N_1N_2^5-16N_1^6N_2-16N_1N_2^6)]/ \\
&[N_T^2(N_T+1)(2N_T+1)(2N_T-1)^2(N_T-1)(2N_T-3)^2(2N_T-5)(N_T-7)] \Big\}.
\end{aligned} \tag{6.9}
$$

6.1.1.2 Bilhar de Dirac

Para o bilhar de Dirac a média e a variância da condutância são dadas, respectivamentes, pelas Equações (6.10) e (6.11) [40]. Na Equação (6.12), temos média da potência do ruído de disparo.

$$
\langle G \rangle = G_0 \frac{4\beta N_1 N_2 N_T}{(\beta N_T + 1)(2N_T - 1)}, \tag{6.10}
$$

$$
\frac{var[G]}{G_0^2} = \begin{cases}
\frac{16N_1N_2N_T(3+2N_T^3+4N_1N_2N_T^2-4N_T-4N_1N_2-5N_1^2-5N_2^2)}{(2N_T-3)(2N_T-1)^2(N_T+3)(N_T+1)^2(2N_T+1)}, & \beta = 1 \\
\frac{8N_1N_2(3+16N_1N_2N_T^2-6N_T^2-6N_1^2-6N_2^2)}{(2N_T-3)(2N_T+3)(2N_T+1)^2(2N_T-1)^2}, & \beta = 2 \\
\frac{32N_1N_2N_T(3-16N_1N_2+8N_T-20N_1^2-20N_2^2-16N_T^3+64N_1N_2N_T^2)}{(4N_T+3)(4N_T+1)^2(2N_T-3)(2N_T-1)^2(4N_T-1)}, & \beta = 4
\end{cases} \tag{6.11}
$$

$$
\frac{\langle p \rangle}{P_0} = \begin{cases}
\frac{4N_1N_2N_T(4N_1^2N_2+2N_1^2+4N_1N_2^2+4N_1N_2-3N_1+2N_2^2-3N_2-3)}{(2N_T-3)(2N_T-1)(N_1+N_2+3)(N_T+1)(2N_T+1)}, & \beta = 1 \\
\frac{16N_1N_2N_T(2N_1N_2-1)}{((2N_T+3)(2N_T-3)(2N_T+1)(2N_T-1))}, & \beta = 2 \\
\frac{16N_1N_2N_T(32N_1^2N_2-8N_1^2+32N_1N_2^2-16N_1N_2-6N_1-8N_2^2-6N_2+3)}{(4N_T+3)(4N_T+1)(2N_T-3)(2N_T-1)(4N_T-1)}, & \beta = 4
\end{cases} \tag{6.12}
$$

6.1.2 Com Barreira de Potencial

6.1.2.1 Bilhar de Schrödinger

Para o caso do bilhar de Schrödinger com barreira de potencial, os resultados analíticos referêntes a média da condutância e do ruído de disparo são conhecidos apenas no regime semiclássico ($N \gg 1$), dadas respetivamentes pelas Equações (6.13) [39] e (6.14) [123]. A variância da condutância é dada pela Equação (6.15) [39]. Para essas equações $N_1 = N_2 = N$ e $\Gamma \in [0, 1]$ é a barreira de tunelamento.

$$\frac{\langle G \rangle}{G_0} = \frac{N\Gamma}{2} + \frac{\Gamma}{4}\left(1 - \frac{2}{\beta}\right), \tag{6.13}$$

$$\frac{\langle P \rangle}{P_0} = \frac{N\Gamma}{8}\left(2 - \Gamma\right), \tag{6.14}$$

$$\frac{var[G]}{G_0^2} = \frac{1}{8\beta}\left[1 + (1 - \Gamma)^2\right]. \tag{6.15}$$

6.1.2.2 Bilhar de Dirac

Os resultados analíticos referentes ao Bilhar de Dirac caótico com barreira de potencial, como média e variância da condutância bem como para a potência do ruído de disparo, não são conhecidos na literatura, fazendo-se necessário um estudo numérico mais detalhado sobre o tema - é nesse sentido que nosso trabalho contribui. As técnicas analíticas geralmente envolvem expansão no limite semiclássico (um grande número de canais abertos $N \gg 1$). No entanto, à medida que aumentamos o número de canais, a quiralidade do grafeno é perdida, levando à equivalência entre os bilhares de Dirac e os de Schrödinger [124], e assim os interessantes fenômenos do bilhar de Dirac no limite quântico extremo são perdidos. Nesse sentido, destacamos a importância do nosso estudo no limite quântico extremo, pois além de mostrar novos resultados, ampliando o entendimento dos fenômenos físicos de tais sistemas, conseguimos relaciona-los com o paradoxo de Klein - que veremos com mais detalhes na próxima seção.

6.2 RESULTADOS NÚMERICOS

Iremos mostrar alguns resultados numéricos, como média e variância da condutância e da potência do ruído de disparo, além dos respectivos termos de localização e anti-localização fraca de ambos os bilhares. Iniciaremos mostrando os resultados numéricos para o caso Sem Barreira de Potencial, sempre que possível, em comparação com os resultados analíticos.

Primeiramente, temos o caso Sem Barreira de Potencial (Contatos Ideais). Mostraremos aqui a confiabilidade dos resultados numéricos, em comparação com os resultados exatos, e posteriormente aplicá-lo ao estudo de sistemas Com Barreira de Potencial (Contatos Não Ideais) - esse último caso, veremos na subseção (6.2.2). Mostraremos também as

distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo, como função da barreira de potencial, haja vista a não existência de muitos resultados exatos.

6.2.1 Sem Barreira de Potencial

6.2.1.1 Bilharde Schrödinger

Iremos mostrar a eficiência de nosso método numérico comparando com os resultados obtidos pelo método analítico via Equações (6.4) $\rightarrow$ (6.9). Na Figura (6.1), (a) e (b) representam, respectivamente, a média e variância da condutância para contatos simétricos ($N_1 = N_2 = N$) em função do número de canais abertos para os três ensembles de Wigner-Dyson. Por sua vez, (c) e (d) representam, respectivamente, a média e variância da condutância para contatos assimétricos ($N_1 \neq N_2$), com $N_1 = 2$ e variando N_2, também para os três ensembles. Os símbolos são os resultados numéricos e as linhas são resultados exatos, dada pelas Equações (6.4) e (6.5). As linhas cheias, na verdade, representam resultados discretos. Na realidade, todos os resultados são discretos, colocados como linhas cheias apenas para melhor visualização.

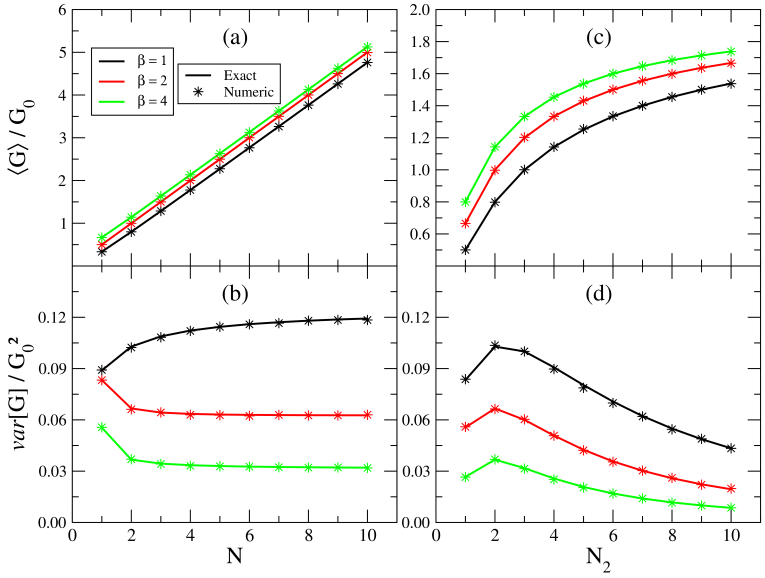


Figura 6.1 Média e variância da condutância para o bilhar de Schrödinger caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as linhas são resultados analíticos das Eq's. (6.4) e (6.5)

Ainda sobre a Figura (6.1), notamos que a média da condutância aumenta com o número de canais N. Esse fato é bem intuitivo, já que podemos interpretar a condutância como uma medida do coeficiente de transmissão. Ou seja, quanto maior o número de canais, maior o número de transmissões dos elétrons. Podemos analisar também pela fórmula de Landauer, onde a condutância é diretamente proporcional ao número de canais. E assim, temos um crescimento linear da média da condutância com o número de

canais. Percebemos também que a variância da condutância tende a uma constante, com o aumento do número de canais. Isso indica que as flutuações em torno das médias da condutância permanecem constantes nesse limite.

A Figura (6.2) representa a média e variância da potência do ruído de disparo em função do número de canais abertos para os três ensembles. Comparamos, mais uma vez, nossos resultados numéricos com as equações exatas, dada pelas Equações (6.6 → (6.9)). Notamos também um crescimento linear, nesse caso da média da potência do ruído de disparo, com o aumento do número de canais. E sua variância também tendendo a uma constante com o aumento de N. Note, que os resultados numéricos obtidos até aqui para as médias da condutância e da potência do ruído de disparo com suas respectivas variâncias, para as classes de Wigner-Dyson, estão totalmente de acordo com os resultados exatos encontrados na literatura. A seguir, iremos continuar nossa análise comparativa para o caso do bilhar de Dirac caótico.

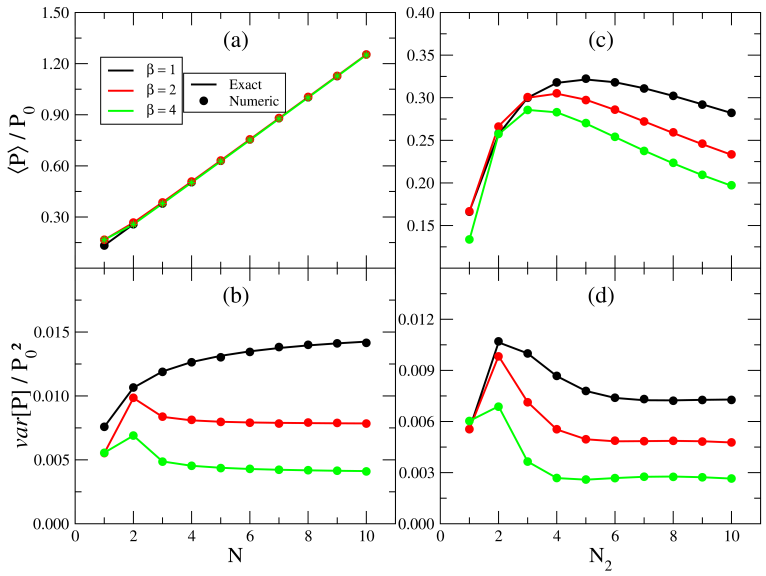


Figura 6.2 Média e variância da potência do ruído de disparo para o bilhar de Schrödinger caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as linhas são resultados analíticos das Eq's. (6.6 → 6.9)

6.2.1.2 Bilhar de Dirac

As Figuras (6.3) e (6.4) mostram, respectivamente, a média da condutância e média da potência do ruído de disparo dos ensembles quirais, com suas respectivas variâncias, para os casos simétricos, (a) e (b), e para os casos assimétricos, (c) e (d).

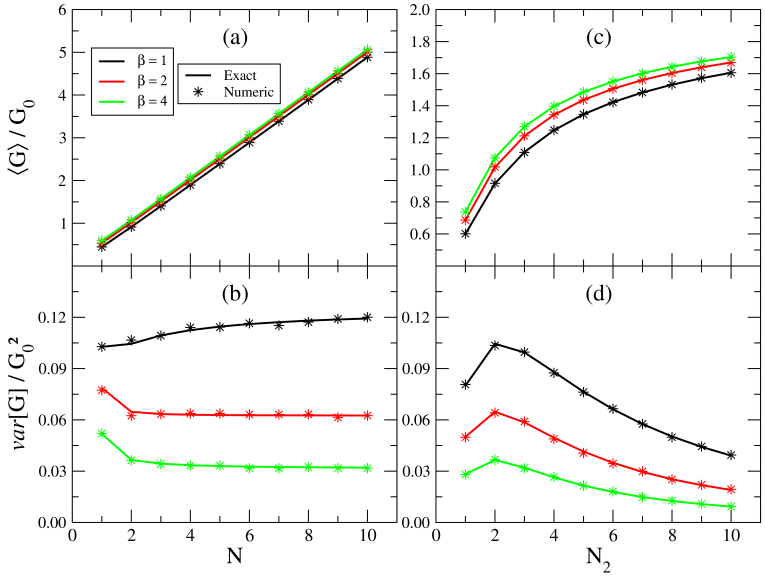


Figura 6.3 Média e variância da condutância para o bilhar de Dirac caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as linhas são resultados analíticos das Eq's. (6.10) e (6.11).

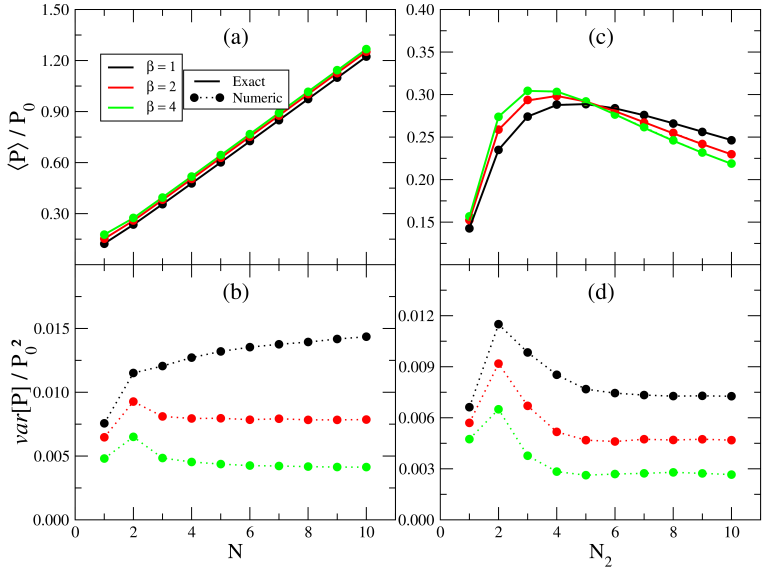


Figura 6.4 Média e variância da potência do ruído de disparo para o bilhar de Dirac caótico. Com (a) e (b) terminais simétricos ($N_1 = N_2 = N$), e (c) e (d) assimétricos com $N_1 = 2$. Os símbolos são resultados de cálculo numéricos enquanto que as lindas são resultados analíticos da Eq. (6.12).

Esses resultados são bem semelhantes ao dos resultados do bilhar de Schrödinger. As médias da condutância e da potência do ruído de disparo crescem linearmente com

o aumento do número de canais para os casos simétricos. Sobre esses resultados, é importante destacarmos a respeito da variância da potência do ruído de disparo do bilhar de Dirac (Fig. 6.4, situações b e d). Devido a ausência de resultados exatos nesse caso, só temos resultados numéricos gerados pelo nosso algoritmo.

Vistos esses gráficos, podemos dizer que o método numérico se comporta perfeitamente com os resultados exatos para o caso Sem Barreira de Potencial.

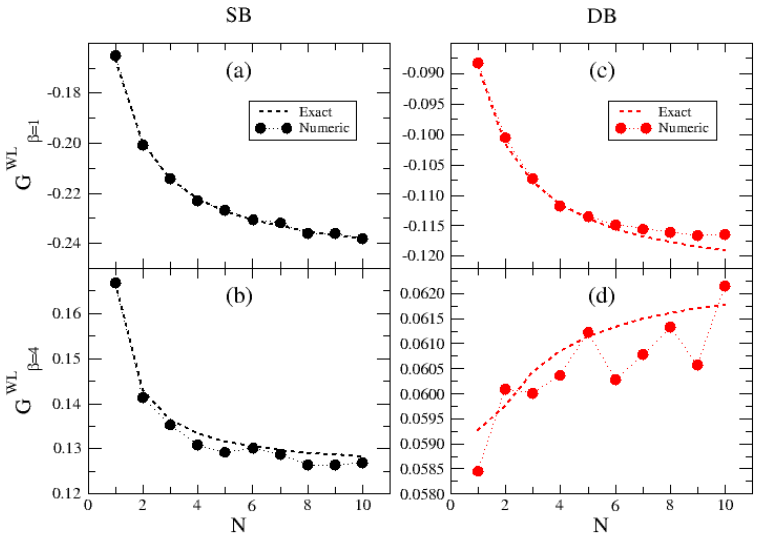


Figura 6.5 Gráfico comparando os resultados da simulação numérica e do resultado exato do termo de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=4}$) fraca da condutância para os Bilhares de Schrödinger (a e b) e de Dirac (c e d) em função do número de canais N. Resultado numérico obtido com 10^6 realizações da matriz S.

Antes de iniciarmos a análise do comportamento dos fenômenos de transporte com relação aos resultados numéricos obtidos via nosso modelo com a presença da barreira de potencial, iremos discutir o gráfico da Figura (6.5). Nele consta o comportamento dos termos de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=4}$) fraca de ambos os bilhares em relação a condutância em função do número de canais ($N = N_1 = N_2$). Com (a) e (b) se referindo ao Bilhar de Schrödinger, e (c) e (d) ao Bilhar de Dirac. Nossa estatística foi feita com 10^6 realizações da matriz S, de forma a tentar garantir a melhor convergência dos resultados. Note que para os termos de localização fraca (a e c) o comportamento dos resultados numéricos são satisfatórios, com exceção para N grande do bilhar de Dirac caótico, onde podemos ver uma pequena discrepância entre os resultados. Já para os termos de anti-localização (b e d) é que notamos uma discrepância maior em relação aos resultados exatos, com uma flutuação mais perceptível para o bilhar de Dirac caótico. Observe ainda em (d) que os resultados do termo de anti-localização variam na quarta casa decimal, gerando assim para pequenas variações grandes flutuações. Essa fato pode estar relacionado à precisão do método numérico.

Observe ainda na Figura (6.5), que os termos de localização fraca de ambos os bilhares têm o mesmo comportamento. Ambos decaem com o aumento do número de canais. Ou seja, temos na verdade um aumento do termo clássico com o aumento do número de canais. Diferentemente do comportamento dos sistemas no que se refere aos termos de anti-localização fraca. Onde se percebe que no caso do bilhar de Dirac caótico (d) temos na verdade um crescimento das médias desses termos com o aumento do número de canais.

Para tornar mais fácil o entendimento no que se refere as correções de interferência, iremos reescrever a Equação (6.4) (média da condutância do bilhar de Schrödinger) em potências de N_T no limite semiclássico, N_1,$N_2 \gg 1$, como vimos em Flutuação Universal da Condutância, da seguinte forma:

$$\langle G\rangle / G_0 = \left[\frac{N_1N_2}{N_1+N_2} + \left(1-\frac{2}{\beta}\right)\frac{N_1N_2}{(N_1+N_2)^2} + \left(1-\frac{2}{\beta}\right)^2\frac{N_1N_2}{(N_1+N_2)^3} + \cdots\right]. \quad (6.16)$$

O termo dominante da equação acima (o primeiro termo), como já sabemos, é relativo a condutância clássica (lei de Ohm) para a associação em série de dois condutores de condutância N_1 e N_2. O segundo termo é a correção em decorrência da localização fraca para $\beta = 1$ e anti-localização para $\beta = 4$. Observe que o segundo termo é nulo na ausência de simetria de reversão temporal ($\beta = 2$). Com isso, relacionamos a média da condutância para $\beta = 2$ como sendo a parte clássica, ou seja, com as correções de interferência quântica nula. Em outras palavras, quando obtemos $G^{WL}_{\beta=1}$ ou $G^{WL}_{\beta=4}$, na verdade estamos subtraindo a parte clássica para obter exclusivamente as correções de interferência quântica associada. Dito isso, percebemos na Figura (6.5), para o bilhar de Schrödinger, que a correção de interferência quântica está cada vez menor com o aumento de N. Como tinha que ser já que o termo dominante é o termo clássico. É importante frisar novamente, que ambos os fenômenos de localização e anti-localização fraca são universais, dependendo apenas da simetria de reversão temporal, de modo que um campo magnético externo é suficiente para quebrar a simetria de reversão temporal e assim destruir a interferência (rever novamente a Figura 2.9).

Já para o bilhar de Dirac caótico, (c) e (d) da Figura (6.5), percebemos que o termo de localização fraca tem o mesmo comportamento do bilhar de Schrödinger. Ele decresce com o aumento do número de canais. E notamos que o mesmo não acontece para o termo de anti-localização. Nesse caso ao invés de diminuir com o aumento de N, ele passa a crescer. Podemos analisar da mesma forma feita anteriormente. Iremos expandir a Equação (6.10) em potências de N_T (limite semiclássico):

$$\langle G\rangle / G_0 = \left[2\frac{N_1N_2}{N_1+N_2} + \left(1-\frac{2}{\beta}\right)\frac{N_1N_2}{(N_1+N_2)^2} + \frac{1}{2}\left(1-\frac{2}{\beta}+\frac{4}{\beta^2}\right)^2\frac{N_1N_2}{(N_1+N_2)^3} + \cdots\right]. \quad (6.17)$$

O primeiro termo da equação acima é a lei de Ohm e o segundo termo é conhecido como localização fraca para $\beta = 1$ e anti-localização fraca para $\beta = 4$. Observe que nesse caso,

o segundo termo da expansão é nula para $\beta = 2$, mas o terceiro termo não, representando uma contribuição não nula para as correções de interferência. Com isso, e observando esse fato também pelo gráfico, podemos dizer que os resultados dos bilhares não podem ser iguais. Para o termo de anti-localização, diferentemente do bilhar de Schrödinger, temos um aumento da correção de interferência quântica com o aumento de N.

6.2.2 Com Barreira de Potencial

6.2.2.1 Bilhar de Schrödinger

Pretendemos recuperar os resultados da média da condutância (Eq. 6.13) e sua variância (Eq. 6.15), e da média da potência do ruído de disparo (Eq. 6.14) para bilhar de Schrödinger. Posteriormente, iniciaremos a análise dos resultados numéricos para o bilhar de Dirac caótico na presença de barreira de potencial Γ como parte importante a se destacar do presente trabalho. Pois, como já havíamos comentado, os resultados nesse caso se dão exclusivamente por técnica numérica - retratando assim resultados inéditos referentes ao bilhar.

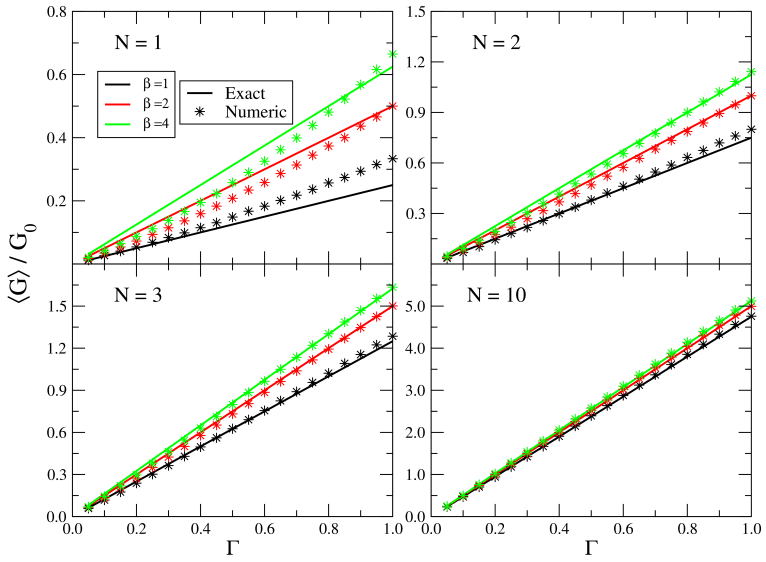


Figura 6.6 Média da condutância em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Schrödinger, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos, e as linhas são resultados analíticos, válidos no limite $N \gg 1$, equação (6.13).

Na figura (6.6) temos a média da condutância em função da barreira de potencial Γ, para contatos simétricos variando para os casos $N = 1, 2, 3$ e 10. Nosso intuito, além de poder conhecer e analisar o comportamento da condutância no regime quântico extremo e regime semiclássico, é poder comparar os resultados numéricos com o exato. Fizemos o uso da equação (6.13) para tal finalidade, e podemos observar que para o caso $N = 10$, temos uma convergência/concordância entre os resultados exatos e numéricos. O que já era de se esperar, uma vez que a equação analítica foi dada no regime semiclássico ($N \gg 1$). O mesmo não acontece no regime quântico extremo ($N = 1$), observe que

os resultados analíticos e numéricos diferem totalmente. Podemos perceber ainda, que para todos as situações, a condutância cresce quase de forma linear com o crescimento de Γ (com exceção do caso $N = 1$, onde podemos ver claramente certa curvatura com o aumento de Γ), ou seja, a condutância aumenta à medida que a barreira diminui. Esse resultado já é esperado intuitivamente, uma vez que se espera maior passagens dos elétrons (maior transmissividade) à medida que se diminui a barreira de potencial. Note também um maior espaçamento entre as simetrias no caso $N = 1$ e uma maior aproximação para $N = 10$. Mostraremos esse mesmo resultado para o bilhar de Dirac, média da condutância do regime quântico extremo para o regime semiclássico, onde será possível observar através da comparação dos dois resultados a equivalência dos dois bilhares no regime de muitos canais.

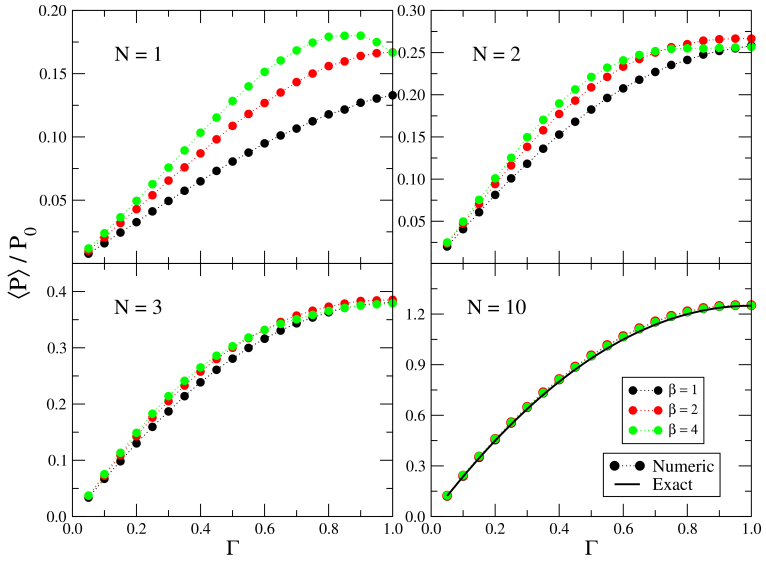


Figura 6.7 Média da potência do ruído de disparo em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Schrödinger, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos, e as linhas são resultados analíticos, válidos no limite $N \gg 1$, equação (6.14).

Na figura (6.7), mostramos a média da potência do ruído de disparo, e de forma similar ao da figura anterior, comparamos nosso resultado numérico ao da equação analítica, dada pela equação (6.14). Como a equação analítica nesse caso só varia em função de Γ (e não em relação a simetria β), só fizemos o uso dela para um valor de N grande (nesse caso para $N = 10$), onde a equação é válida. Podemos perceber mais uma vez sua total concordância em relação aos dados numéricos. Percebemos também um aumento da média da potência de ruído de disparo com o aumento de Γ. Isto é, há um crescimento da média do ruído com a diminuição da barreira de potencial, e que no regime semiclássico não temos uma distinção entre as curvas das simetrias. Diferentemente no regime quântico extremo, onde podemos ver um espaçamento maior entre as curvas. A análise pode ser feita também da seguinte maneira: temos uma diminuição da média da potência do ruído de disparo com o aumento da barreira de potencial. Também de forma

comparativa, entre os resultados com relação a média da potência do ruído de disparo, será possível observar a equivalência entre os bilhares no regime de muitos canais.

Para analisarmos a variância da condutância e da potência do ruído de disparo temos a figura (6.8). Em ambos os casos, as variâncias são dadas em função de Γ, onde são colocadas as situações no regime quântico extremo ($N = 1$) e o regime semiclássico ($N = 10$). Observe que para a varância da condutância (lado esquerdo do gráfico), usamos a equação analítica (6.15) em $N = 10$. Já para a variância da potência do ruído de disparo, temos resultados puramente numéricos. É possível notar, para ambos os casos com $N = 10$, o comportamento assintótico dos β's com o aumento dos valores de Γ. Temos um comportamento mais claro no regime semiclássico, indicando que os valores tendem a permanecerem constantes em relação aos valores em torno das suas médias. O mesmo não acontece no regime quântico extremo.

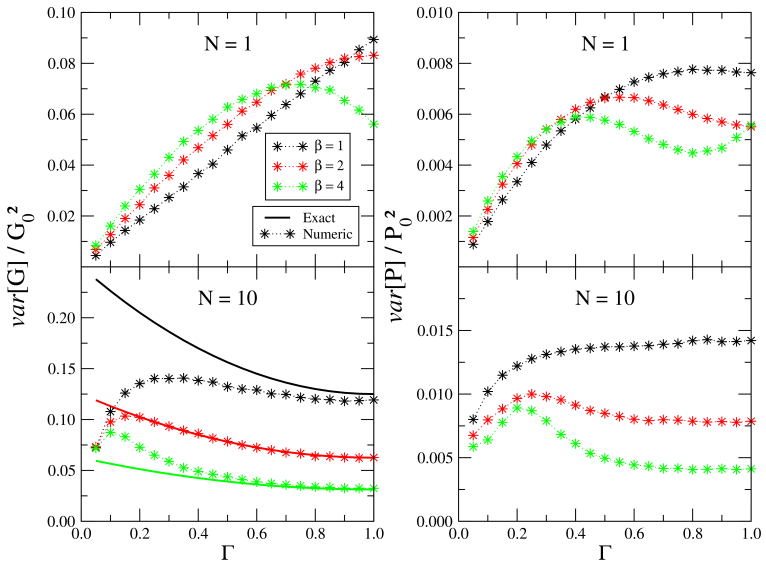


Figura 6.8 Gráfico da variância da condutância (lado esquerdo da figura) e da variância da potência do ruído de disparo (lado direito) em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Schrödinger, com terminais simétricos $N = 1$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos, e as linhas é o resultado analítico via equação (6.15).

Nas Figuras (6.9) e (6.10), temos respectivamente as distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo no regime quântico extremo ($N_1 = N_2 = 1$) para o bilhar de Schrödinger caótico dos ensembles de Wigner-Dyson. Cada coluna do gráfico está relacionada com um valor de barreira Γ, com $\Gamma = 0.25, 0.5, 0.75$ e 1.0. Com isso, podemos analisar o comportamento das distribuições saindo de uma situação de barreira "alta" ($\Gamma = 0.25$) indo até o caso sem barreira de potencial ($\Gamma = 1$). Ainda sobre a Figura (6.9), podemos destacar que o caso sem barreira de potencial ($\Gamma = 1$) já é bem conhecida e difundida na literatura, onde nossos resultados nesse caso estão em total acordo com os resultados já conhecidos [40]. Embora não esteja mostrado na figura, é bem estabelecido que com o aumento do número de canais as distribuições, para $\beta = 1,\ 2,$ e 4, tendem a um comportamento mais universal, ou seja, rapidamente o comportamento das distribuições

tendem a uma gaussiana [107, 125]. Já a distribuição da potência do ruído de disparo, Figura (6.10), temos um comportamento bem similar para as simetrias β's.

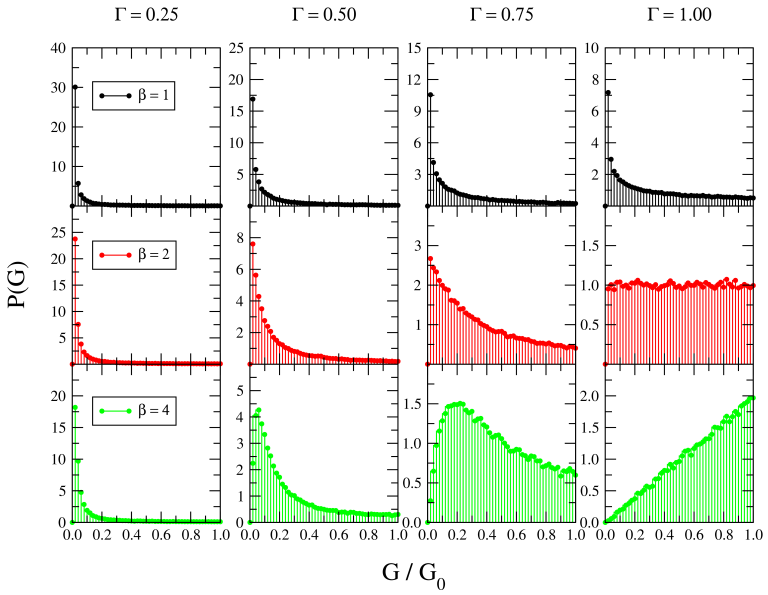


Figura 6.9 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar de Schrödinger simétrico dos ensembles de Wigner-Dyson, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $G_0 = 2e^2/h$ com 10^4 realizações da matriz S.

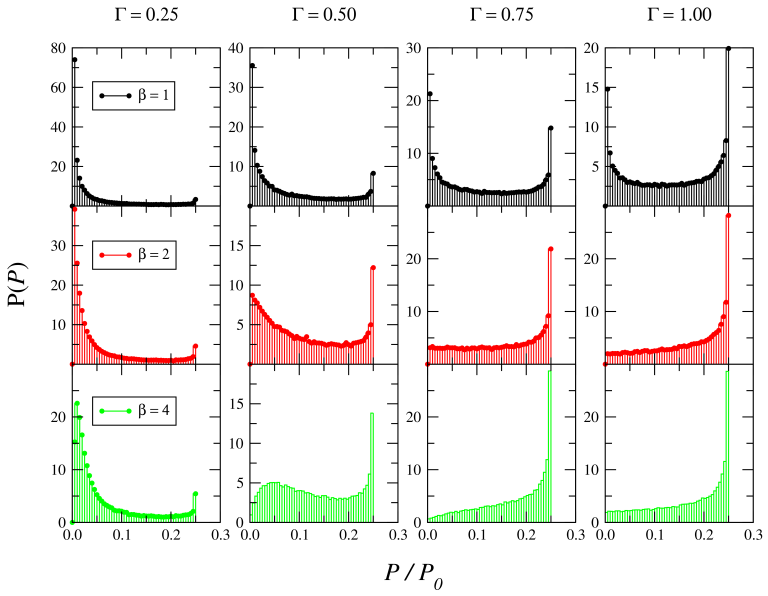


Figura 6.10 Distribuição da potência do ruído de disparo $P(P)$ para o bilhar de Schrödinger simétrico dos ensembles de Wigner-Dyson, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $P_0 = 4e^2V/h$ com 10^4 realizações da matriz S.

6.2.2.2 Bilhar de Dirac

Resultados novos como média da condutância (Figura 6.11), da potência do ruído de disparo (Figura 6.12), com suas respectivas variâncias (Figura 6.13), em função da barreira de potencial Γ para alguns valores de N, além dos respectivos histogramas normalizados (Figura 6.14 e Figura 6.15).

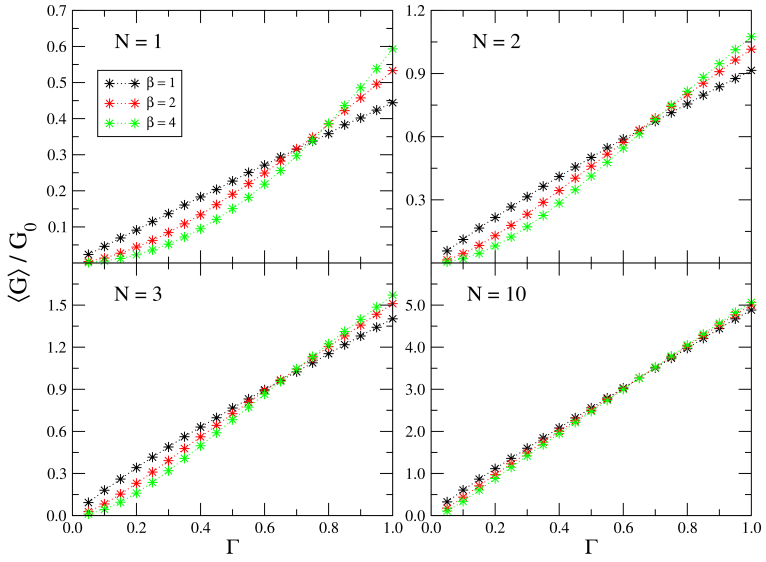


Figura 6.11 Média da condutância em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Dirac, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos.

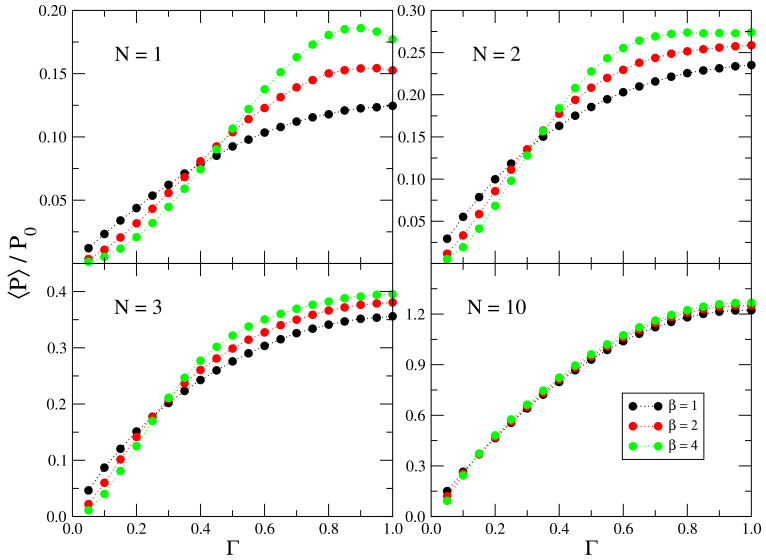


Figura 6.12 Média da potência do ruído de disparo em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Dirac, com terminais simétricos $N = 1, 2, 3$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos.

Observando a Figura (6.11), podemos notar claramente que no regime quântico extremo temos uma concavidade mais bem acentuada, diferentemente do caso $N = 10$ em que temos praticamente um crescimento linear. Além disso, diferentemente do que acontece no bilhar de Schrödinger, notamos uma inversão nas simetrias β's para algum valor de Γ. Note que essa inversão se dá para todos os casos ($N = 1, 2, 3$ e 10), com maior clareza no caso $N = 1$. Essa inversão afeta diretamente os termos de localização e anti-localização fraca, pois como os valores se invertem, teremos, para algum valor de Γ (que depende do valor de N), que esses termos irão passar obrigatoriamente pelo valor zero. Iremos relacionar essa "transição", típicos do bilhar de Dirac, com a supressão/amplificação dos termos de interferência quântica, com a variação da barreira, com o paradoxo de Klein. Veremos melhor esse fato ao analisarmos a Figura (6.18) referente aos termos de localização e anti-localização fraca.

Já na Figura (6.12), onde mostramos a média da potência do ruído de disparo, percebemos uma maior aproximação entre as curvas relativos as simetrias à medida que aumentamos o valor de N, onde praticamente elas se sobrepõem em $N = 10$, mas, ainda assim, é possível notar a diferença entre elas, além de notar também a inversão dos β's. Essas interseções/inversões são recorrentes nos resultados do bilhar de Dirac caótico na presença de barreira de potencial. Ora os valores com índice de simetria $\beta = 2$ são maiores em relação aos índices de simetrias $\beta = 1$ e 4, e ora são menores (para algum valor de Γ). Veremos isso com mais detalhes ao analisarmos as correções de interferência quântica, Figura (6.19). Com os resultados das médias da condutância e da potência do ruído de disparo do bilhar de Dirac, como já mencionado aos analisarmos os resultados relativos ao bilhar de Schrödinger, é possível notar facilmente a equivalência entre os bilhares a medida que aumentamos o número de canais aberto - em decorrência da quebra de simetria quiral no regime de muitos canais.

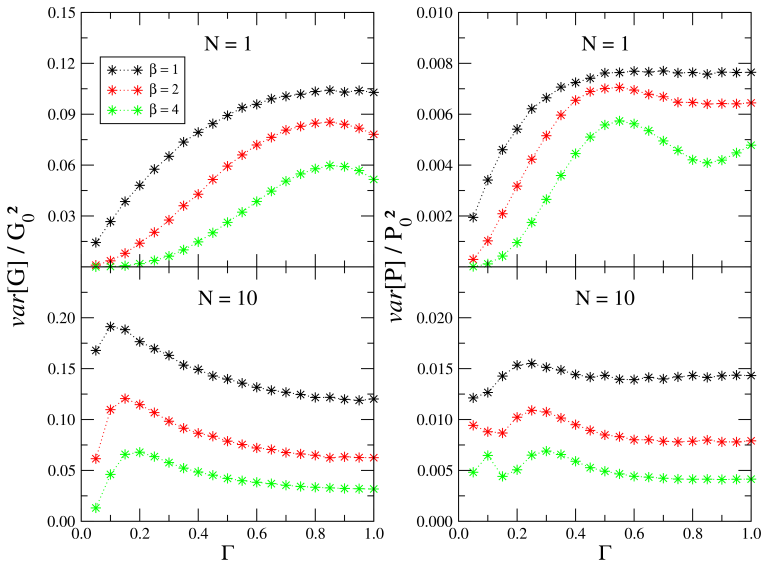


Figura 6.13 Gráfico da variância da condutância (lado esquerdo da figura) e da variância da potência do ruído de disparo (lado direito) em função da barreira de potencial Γ para o bilhar de Dirac, com terminais simétricos $N = 1$ e 10. Os símbolos são resultados de cálculos numéricos.

Na Figura (6.13), temos a variância da condutância (lado esquerdo da figura) e da potência do ruído de disparo (lado direito), para dois valores de N, em função de Γ. É possível notar, para ambas as variâncias, que para um valor grande de N, os resultados numéricos tendem, com o aumento de Γ, a serem assintóticos. Nas Figuras (6.14) e (6.15), temos respectivamente as distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo no regime quântico extremo ($N_1 = N_2 = 1$) para o bilhar de Dirac caótico simétrico dos ensembles quirais. Variamos os valores da barreira de potencial em $\Gamma = 0.25, 0.5, 0.75$ e por último $\Gamma = 1$, onde estamos nos referindo ao caso sem barreira. Podemos notar que para valores pequenos de Γ o comportamento das distribuições de ambos os bilhares aparentam serem semelhantes, se concentrando mais ao zero. Já para valores de $\Gamma > 0.25$ as distribuições são completamente diferentes. Com essas duas distribuições, podemos analisar mais detalhadamente suas médias e variância em cada ponto de barreira Γ, resultados novos que agregam no estudo e entendimento do bilhar além de serem mais uma contribuição presente nesse trabalho.

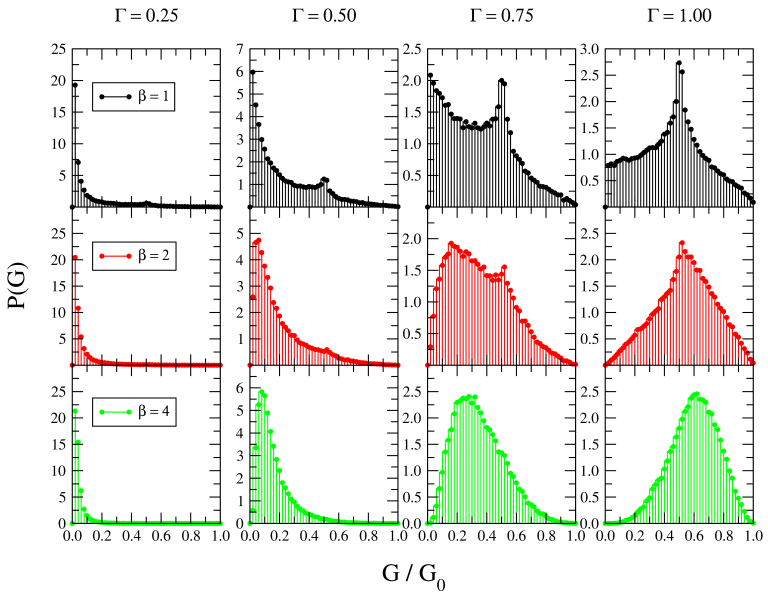


Figura 6.14 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar de Dirac simétrico dos ensembles quirais, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $G_0 = 4e^2/h$ com 10^4 realizações da matriz S.

Ainda sobre a Figura (6.14), é possível notar que nossa abordagem do problema fez com que nossa situação de $N = 1$ corresponde ao caso $N = 2$ (sem barreira de potencial) estudado no artigo [125]. E que também nesse caso, é de conhecimento que com o aumento do número de canais a distribuição tende para uma gaussiana mais rapidamente do que o observado para o bilhar de Schrödinger.

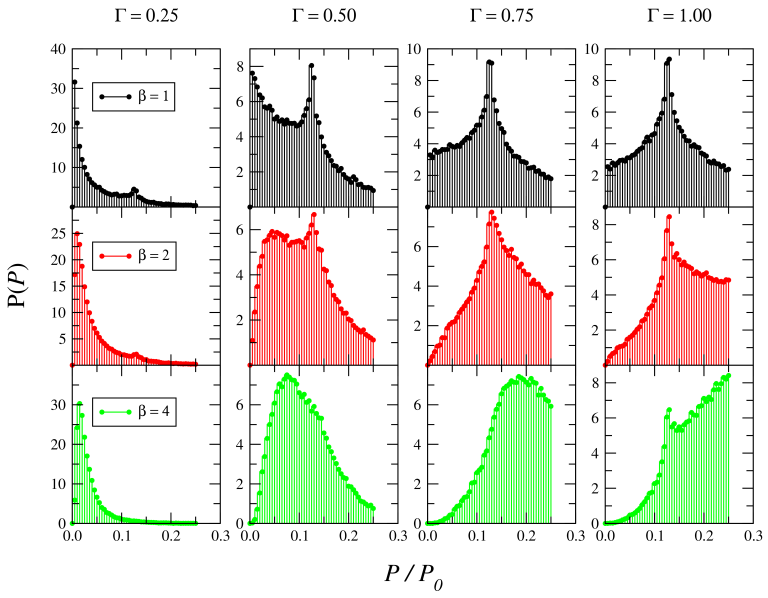


Figura 6.15 Distribuição da potência do ruído de disparo $P(P)$ para o bilhar deDirac simétrico dos ensembles quirais, para vários valores de barreira de potencial Γ, no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$ em unidades de $P_0 = 8e^2V/h$ com 10^4 realizações da matriz S.

6.2.2.3 Comparação entre os Bilhares

Nessa seção iremos comparar alguns resultados numéricos entre os bilhares de Schrödinger e de Dirac caóticos na presença da barreira de potencial Γ. Mostramos um comparativo da média da condutância e da potência do ruído de disparo, (Figuras 6.16 e 6.17), variando sempre o número de canais dos guias (contatos simétricos $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3). A parte superior dos gráficos se refere sempre ao Bilhar de Schrödinger (a, b e c) e a parte inferior se refere ao Bilhar de Dirac (e, f e g). Feito esse comparativo, relacionamos nossos resultados do bilhar de Dirac caótico na presença de barreira de potencial com o paradoxo de Klein. Seremos capazes de observar tais efeitos devido a sua simetria quiral, e para tal iremos analisar as Figuras (6.18) e (6.19).

É possível notar nas Figuras (6.16) e (6.17) que as curvas referentes as simetrias β's do bilhar de Dirac caótico se interceptam e se invertem. Diferentemente do que ocorre no Bilhar de Schrödinger, essas interseções entre as curvas estão presentes em todos os resultados relativos ao bilhar de Dirac na presença da barreira de potencial. Observe ainda que em ambas as figuras, no regime quântico extremo ($N = 1$) para o caso sem barreira $\Gamma = 1$, onde os espaçamentos entre curvas são mais perceptíveis, a média relativa a $\beta = 2$ do Bilhar de Dirac caótico começa menor que ao do $\beta = 4$ e maior em relação ao do $\beta = 1$, e a medida que aumentamos o valor da barreira de potencial (diminuindo os valores de Γ) a média relativa a $\beta = 2$ já passa a ser maior que ao do $\beta = 4$ e menor em relação ao do $\beta = 1$. Esse fato faz com que o termo de correção de interferência quântica sofra uma "transição", ou seja, existe um determinado valor de Γ, no qual depende do número de canais N, que teremos um aumento do valor de interferência quântica com o

aumento da barreira. O mesmo não acontece para o bilhar de Schrödinger. Isso indica um tipo muito peculiar do paradoxo de Klein exibido exclusivamente no bilhar de Dirac. Essa inversão nos valores relativos a média será observada com mais detalhes nas figuras de localização e anti-localização fraca da condutância e da potência do ruído de disparo, mostrada respectivamente nas figuras (6.18) e (6.19), onde é possível observar com mais detalhes a relação com o paradoxo.

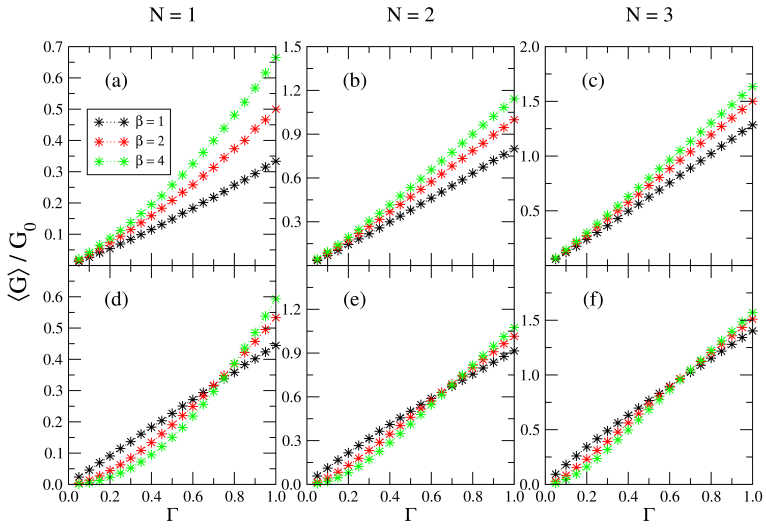


Figura 6.16 Resultados numéricos da Média da Condutância do Bilhar de Schrödinger, (a), (b) e (c), e do Bilhar de Dirac, (d), (e) e (f), em função da barreira de potencial Γ para o regime $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3

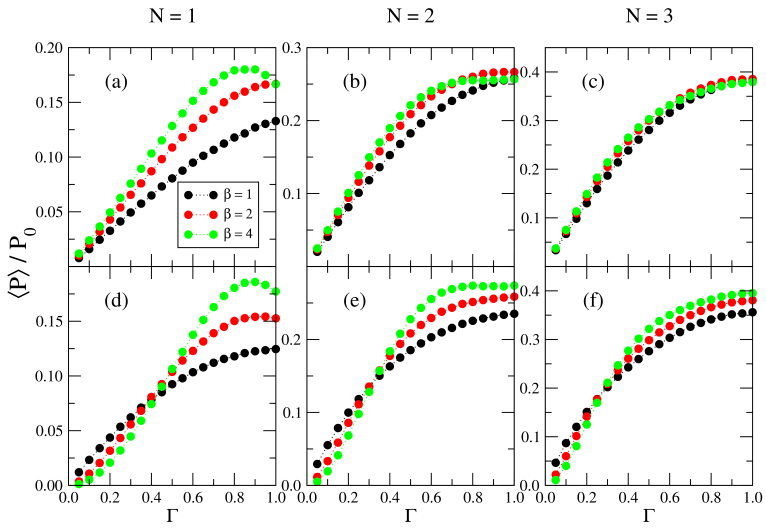


Figura 6.17 Resultados numéricos da Média da Potência do ruído de disparo do Bilhar de Schrödinger, (a), (b) e (c), e do Bilhar de Dirac, (d), (e) e (f), em função da barreira de potencial Γ para o regime $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3

As figuras (6.18) e (6.19) mostram os termos de localização (a e c) e anti-localização fraca (b e d) respectivamente da condutância e da potência do ruído de disparo em função da barreira de potencial Γ. Representamos o bilhar de Schrödinger caótico com os símbolos azuis e o bilhar de Dirac caótico com os símbolos em rosa.

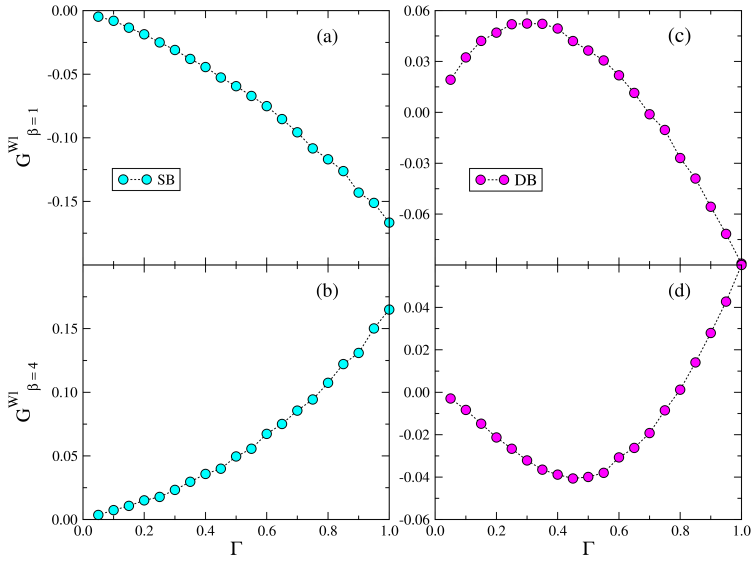


Figura 6.18 Gráfico da simulação numérica do termo de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) fraca da condutância para os Bilhares de Schrödinger (a e b) e de Dirac (c e d) em função da barreira de potencial Γ no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$.

Devido as interseções entre as curvas que aparecem nos gráficos das médias da condutância e da potência do ruído de disparo para o bilhar de Dirac caótico, temos o aparecimento de certas "transições"nos termos de localização e anti-localização fraca. Falando especificamente da Figura (6.18), mais precisamente dos termos de localização fraca ($G^{WL}_{\beta=1}$), percebemos que para bilhar de Schrödinger o termo de localização fraca cresce com o aumento da barreira de potencial, ou seja, com a diminuição de Γ. Isto é, a correção de interferência quântica cresce com o aumento da barreira. Resultado já esperado e até intuitivo. A interferência quântica se sobressaindo sobre a clássica à medida que se aumenta a barreira de potencial. O interessante aconte no billhar de Dirac, onde é possível perceber claramente que a correção de interferência quântica começa crescendo com o aumento da barreira de potencial, mas para um determinado valor de Γ em vez de continuar crescendo, como é de se esperar e como acontece no bilhar de Schrödinger, o termo de interferência quântica diminui. Esse fato curioso relacionamos ao paradoxo de Klein em estruturas com simetrias de sub-rede, ou simetria quiral. No qual, o que se esperaria era um aumento dos termos de interferência quântica à medida que se aumenta a barreira de potencial, mas percebemos que nesses tipos de sistemas, para um determinado valor de barreira, a correção do termo de interferência quântica passou a ser suprimida com o aumento da barreira. Resultado não intuitivo no qual relacionamos diretamente com o paradoxo. Para os termos de anti-localização fraca ($G^{WL}_{\beta=4}$) percebemos

quase que uma inversão em relação aos termos de localização fraca, ou seja, com o aumento da barreira (diminuição de Γ) temos uma amplificação dos termos de interferência quântica. O paradoxo de Klein, refere-se à amplificação da probabilidade de tunelamento em sistemas relativísticos se a barreira de potencial for aumentada. Portanto, o paradoxo de Klein pode ser medido pela inversão da anti-localização quântica causada pela quebra de simetria de reversão temporal.

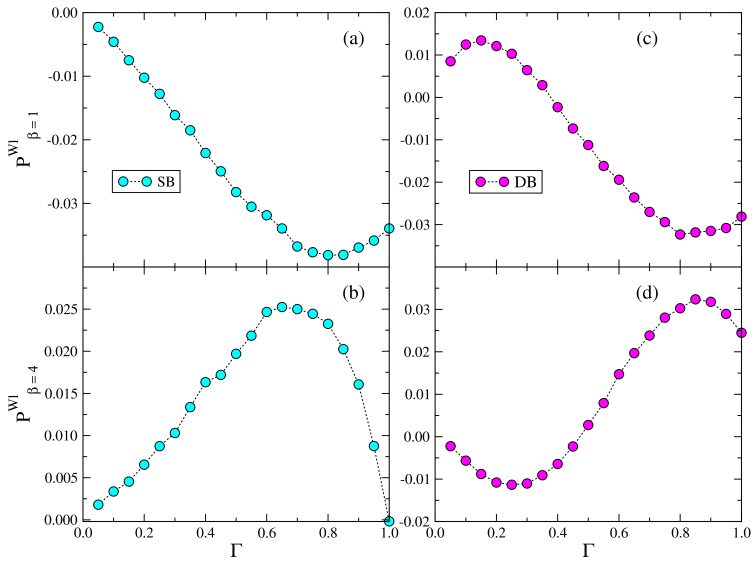


Figura 6.19 Gráfico da simulação numérica do termo de localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) e anti-localização ($G^{WL}_{\beta=1}$) fraca da potência do ruído de disparo para os Bilhares de Schrödinger (a e b) e de Dirac (c e d) em função da barreira de potencial Γ no regime quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$.

Na Figura (6.19), o termo de localização fraca da potência do ruído de disparo ($P^{WL}_{\beta=1}$) para o bilhar de Schrödinger decresce com a diminuição da barreira, chegando a um ponto de mínimo e logo em seguida tendo um leve crescimento. Já para o bilhar de Dirac, além da transição característica percebida presente nesse sistema, temos um leve crescimento do termo de localização fraca com a diminuição da barreira, e em seguida um decaimento seguido da transição (passando pelo valor zero) até um ponto de mínimo onde passa a crescer levemente. Para os termos de anti-localização fraca ($P^{WL}_{\beta=4}$), percebemos uma inversão em relação ao caso anterior, com sua transição característica presente no bilhar de Dirac. Os mesmos efeitos de supressão e amplificação também são observados.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES

Fizemos uma análise detalhada e comparativa entre os Bilhares de Schrödinger e Dirac caóticos conectados a dois terminais com respeito às propriedades físicas de transporte como condutância e potência do ruído de disparo com suas respectivas distribuições de autovalores, além dos termos de interferência quântica. Essa análise foi feita tanto para contatos ideais como para não ideais.

Primeiramente foram comparados os resultados gerados pelo modelo computacional com os resultados analíticos encontrados na literatura a fim de verificar a confiabilidade do modelo. Essa confiança foi fundamental para poder estudar o comportamento dos fenômenos de transporte na presença de barreira de tunelamento. Esse estudo, além de mostrar comportamentos totalmente anômalos da condutância, da potência do ruído de disparo e nas suas respectivas distribuições, foi possível identificarmos o paradoxo de Klein que pode ser medido e controlado em experimentos envolvendo pontos quânticos de grafeno. Tais estudos revelaram interessantes e surpreendentes novos resultados referentes à fenomenologia do bilhar de Dirac no regime não ideal, que nos garantiram uma publicação no Annals of Physics [9] intitulada como Klein paradox in chaotic Dirac billiards. O paradoxo de Klein relaciona a amplificação da probabilidade de tunelamento em sistemas relativísticos com o aumento da barreira de potencial. Em nossos resultados, foi possível observar tais efeitos no regime quântico extremo pela supressão/amplificação das correções de interferências quântica causada pela quebra de simetria de reversão temporal. Nesse tipo de regime em particular, devido ao baixo número de canais, as interferências das funções de onda são mais atuantes, o que proporciona uma maior relevância nas correções. Já no regime semiclássico, onde temos uma quebra da quiralidade, os bilhares se equivalem. Além disso, destacamos o papel importante do comportamento da potência do ruído de disparo que transporta informações diretas sobre o processo de tunelamento associado à discretização da corrente eletrônica.

O processo de implementação do modelo, e consequentemente sua geração, passou por vários percalços e fases. Foi um longo período até chegar de fato na obtenção dos resultados. Destacamos a construção da matriz de acoplamento W do bilhar de Dirac. Essa matriz, devido a simetria de sub-rede, possui um vinculo especial, não presente no bilhar de Schrödinger - foi preciso uma análise e entendimento maior em sua construção. Sobre a obtenção dos resultados, podemos destacar o tempo de processamento computacional. A fórmula de Mahaux-Weidenmüller se utiliza da inversão de matriz. Em nosso problema, precisamos inverter matrizes da ordem da matriz hamiltoniana, matrizes da ordem de 200×200, 400×400 e 800×800 - dependendo do bilhar e da simetria β. Para uma análise estatística do problema foram gerados um número muito grande de amostras, de forma a garantir a universalidade dos observáveis, variando da ordem de 10^4 a 10^6 das realizações da matriz de espalhamento. Isso tudo acarretou em muito tempo de

processamento. Obviamente, tendo em vista os resultados obtidos, todos os esforços e tempo foram recompensados.

Um dos desdobramentos imediatos do nosso estudo seria estender nosso comparativo para mais guias conectados a cavidade. Na literatura já existem alguns resultados analíticos para o caso de três guias, contatos ideais. Uma análise mais detalhada sobre a precisão do método numérico é importante, além de um estudo do mesmo problema de espalhamento eletrônico por outros métodos numéricos.

Com o avanço das pesquisas e estudos, até então recentes, com relação ao transporte de elétrons em estruturas como a do grafeno, é importante dar sempre continuidade aos trabalhos nesse sentido. Esperamos que nossos resultados sirvam para uma melhor compreensão dos fenômenos que envolvem espalhamentos quânticos ressonante no regime mesoscópicos em sistemas relativísticos e não-relativísticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Jürgen Wurm, Michael Wimmer, and Klaus Richter. **Symmetries and the conductance of graphene nanoribbons with long-range disorder**. *Phys. Rev. B*, 85:245418, Jun 2012.

[2] Jürgen Wurm, Adam Rycerz, İnan ç Adagideli, Michael Wimmer, Klaus Richter, and Harold U. Baranger. **Symmetry Classes in Graphene Quantum Dots: Universal Spectral Statistics, Weak Localization, and Conductance Fluctuations**. *Phys. Rev. Lett.*, 102:056806, Feb 2009.

[3] Andrzej Jarosz, Pedro Vidal, and Eugene Kanzieper. **Random matrix theory of quantum transport in chaotic cavities with nonideal leads**. *Phys. Rev. B*, 91:180203, May 2015.

[4] Oskar Klein. **Quantentheorie und fünfdimensionale Relativitätstheorie**. *Zeitschrift für Physik*, 37(12):895–906, Dec 1926.

[5] P. A. M. Dirac. **The quantum theory of the electron**. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 117(778):610–624, 1928.

[6] M. V. Berry and R. J. Mondragon. **Neutrino Billiards: Time-Reversal Symmetry-Breaking Without Magnetic Fields**. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 412(1842):53–74, 1987.

[7] Florian Libisch, Christoph Stampfer, and Joachim Burgdörfer. **Graphene quantum dots: Beyond a Dirac billiard**. *Phys. Rev. B*, 79:115423, Mar 2009.

[8] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. **Chaotic Dirac Billiard in Graphene Quantum Dots**. *Science*, 320(5874):356–358, 2008.

[9] A.F.M. Rodrigues da Silva, M.S.M. Barros, A.J. Nascimento, A.L.R. Barbosa, and J.G.G.S. Ramos. **Klein paradox in chaotic Dirac billiards**. *Annals of Physics*, 405:256 – 273, 2019.

[10] O Klein. **Die Reflexion von Elektronen an einem Potential sprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac.** *Zeitschrift für Physik*, 53(3-4):157–165, 1928.

[11] A. Calogeracos and N. Dombey. **History and physics of the Klein paradox**. *Contemporary Physics*, 40(5):313–321, 1999.

[12] F. Hund. **Materieerzeugung im anschaulichen und im gequantelten Wellenbild der Materie**. *Zeitschrift für Physik*, 117(1):1–17, Jan 1941.

[13] Alex Hansen and Finn Ravndal. **Klein's Paradox and Its Resolution**. *Physica Scripta*, 23(6):1036, 1981.

[14] W. Greiner. **Quantum Electrodynamics of Strong Fields.** *Springer, 3rd edition*, 1985.

[15] Barry R. Holstein. **Klein's paradox**. *American Journal of Physics*, 66(6):507–512, 1998.

[16] A. Calogeracos and N. Dombey. **Klein Tunnelling and the Klein Paradox**. *International Journal of Modern Physics A*, 14(04):631–643, 1999.

[17] Ru-Keng Su, G G Siu, and Xiu Chou. **Barrier penetration and Klein paradox**. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 26(4):1001, 1993.

[18] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. **Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene**. *Nature Physics*, 2:620–625, September 2006.

[19] Rui Yang, Liang Huang, Ying-Cheng Lai, and Celso Grebogi. **Abnormal electron paths induced by Klein tunneling in graphene quantum point contacts**. *Phys. Rev. B*, 84:035426, Jul 2011.

[20] Xuan Ni, Liang Huang, Ying-Cheng Lai, and Louis M. Pecora. **Effect of chaos on relativistic quantum tunneling**. *EPL (Europhysics Letters)*, 98(5):50007, jun 2012.

[21] Chunxu Bai and Xiangdong Zhang. **Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice**. *Phys. Rev. B*, 76:075430, Aug 2007.

[22] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov. **Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics**. *Solid State Communications*, 143:3–13, July 2007.

[23] Changgu Lee, Xiaoding Wei, Jeffrey W. Kysar, and James Hone. **Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene**. *Science*, 321(5887):385–388, 2008.

[24] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim. **Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene**. *Science*, 320(5881):1308–1308, 2008.

[25] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak, and A. K. Geim. **Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer**. *Phys. Rev. Lett.*, 100:016602, Jan 2008.

[26] Alexander A. Balandin, Suchismita Ghosh, Wenzhong Bao, Irene Calizo, Desalegne Teweldebrhan, Feng Miao, and Chun Ning Lau. **Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene**. *Nano Letters*, 8(3):902–907, 2008. PMID: 18284217.

[27] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. **Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene**. *Nature*, 438:201–204, November 2005.

[28] Xu Du, Ivan Skachko, Fabian Duerr, Adina Luican, and Eva Y Andrei. **Fractional quantum Hall effect and insulating phase of Dirac electrons in graphene**. *Nature*, 462:192–195, 2009.

[29] K. I. Bolotin, F. Ghahari, M. D. Shulman, H. L. Stormer, and P. Kim. **Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene**. *Nature*, 462:196–199, November 2009.

[30] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim. **Strong Suppression of Weak Localization in Graphene**. *Phys. Rev. Lett.*, 97:016801, Jul 2006.

[31] A K. N. Geim and K.S. Novoselov. **The Rise of Graphene**. *Nature materials*, 6:183–91, 04 2007.

[32] A. F. Young and P. Kim. **Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions**. *Nature Physics*, 5:222–226, March 2009.

[33] E. Rossi, J. H. Bardarson, M. S. Fuhrer, and S. Das Sarma. **Universal Conductance Fluctuations in Dirac Materials in the Presence of Long-range Disorder**. *Phys. Rev. Lett.*, 109:096801, Aug 2012.

[34] A. K. Geim. **Graphene: Status and Prospects**. *Science*, 324:1530, June 2009.

[35] Peter Blake, Paul D. Brimicombe, Rahul R. Nair, Tim J. Booth, Da Jiang, Fred Schedin, Leonid A. Ponomarenko, Sergey V. Morozov, Helen F. Gleeson, Ernie W. Hill, Andre K. Geim, and Kostya S. Novoselov. **Graphene-Based Liquid Crystal Device**. *Nano Letters*, 8(6):1704–1708, 2008. PMID: 18444691.

[36] Xuan Wang, Linjie Zhi, and Klaus Müllen. **Transparent, Conductive Graphene Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells**. *Nano Letters*, 8(1):323–327, 2008. PMID: 18069877.

[37] Y.-M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H.-Y. Chiu, A. Grill, and Ph. Avouris. **100-GHz Transistors from Wafer-Scale Epitaxial Graphene**. *Science*, 327(5966):662–662, 2010.

[38] M. S. M. Barros, I. R. A. C. Lucena, A. F. M. R. Silva, A. L. R. Barbosa, and J. G. G. S. Ramos. **Shot noise on chaotic chiral devices**. *Phys. Rev. B*, 99:195131, May 2019.

[39] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker. **Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems**. *Journal of Mathematical Physics*, 37(10):4904–4934, 1996.

[40] M. S. M. Barros, A. J. Nascimento Júnior, A. F. Macedo-Junior, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa. **Open chaotic Dirac billiards: Weak (anti)localization, conductance fluctuations, and decoherence**. *Phys. Rev. B*, 88:245133, Dec 2013.

[41] M. S. M. Barros. **Método Diagramático Aplicado ao Bilhar de Dirac Caótico**. *Dissertação de Mestrado, UFRPE, 2014.*

[42] M. S. M. Barros. **Teoria do Ruído e Fenômenos de Interferência Quântica em Nanoestruturas Quirais**. *Tese de Doutorado, UFPB, 2018.*

[43] P. A. Mello and N. Kumar. **Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations.** *Oxford University Press*, 2004.

[44] C. M. Soukoulis and E. N. Economou. **Electronic Localization in Disordered Systems**. *Waves in Random Media*, 9(2):255–269, 1999.

[45] S. Datta. **Electronic Transport in Mesoscopic Systems.** *Cambridge University Press*, 1995.

[46] Y. Alhassid. **The Statistical theory of quantum dots**. *Rev. Mod. Phys.*, 72:895–968, 2000.

[47] D. K. Ferry and S. M. Goodnick. **Transport in Nanostructures.** *Cambridge University Press*, 1997.

[48] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. **Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas**. *Phys. Rev. Lett.*, 60:848–850, Feb 1988.

[49] D. Wharam et al. **One-Dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance**. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, (21):209–214, 1988.

[50] Gerd Bergmann. **Weak Localization in Thin Films a time-of-flight experiment with conduction electrons.** *Physics Reports*, 107(1):1 – 58, 1984.

[51] Patrick A. Lee and T. V. Ramakrishnan. **Disordered electronic systems**. *Rev. Mod. Phys.*, 57:287–337, Apr 1985.

[52] P. A. Lee, A. Douglas Stone, and H. Fukuyama. **Universal conductance fluctuations in metals: Effects of finite temperature, interactions, and magnetic field**. *Phys. Rev. B*, 35:1039–1070, Jan 1987.

[53] Tsuneya Ando, Alan B. Fowler, and Frank Stern. **Electronic properties of two-dimensional systems**. *Rev. Mod. Phys.*, 54:437–672, Apr 1982.

[54] Y. Nazarov and Y. Blanter. **Quantum Transport: introduction to nanoscience.** *Cambridge University Press*, 2009.

[55] Carlos A. S. Filho. **Cavidades balísticas caóticas e funções simétricas: resultados exatos para a estatística de contagem de carga.** *Dissertação de Mestrado, UFRPE*, 2013.

[56] C. W. J. Beenakker. **Random-matrix theory of quantum transport**. *Rev. Mod. Phys.*, 69:731–808, Jul 1997.

[57] M. I. Sena-Junior. **Transporte Eletrônico em Redes de Pontos Quânticos**. *Tese de Doutorado, UFPE, 2014.*

[58] S. Oberholzer, E. V. Sukhorukov, C. Strunk, and C. Schönenberger. **Shot noise of series quantum point contacts intercalating chaotic cavities**. *Phys. Rev. B*, 66:233304, Dec 2002.

[59] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. **Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas**. *Phys. Rev. Lett.*, 60:848–850, Feb 1988.

[60] R. Landauer. **Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction**. *IBM Journal of Research and Development*, 1(3):223–231, July 1957.

[61] Rolf Landauer. **Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices**. *Philosophical Magazine*, 21(172):863–867, 1970.

[62] J. G. S. Ramos. **Modelo sigma não-linear supersimétrico: aplicações em nanoestruturas caóticas.** *Tese - Doutorado, UFPE*, 2010.

[63] G. Bergmann. **Weak anti-localization - An experimental proof for the destructive interference of rotated spin 12**. *Solid State Communications*, 42(11):815 – 817, 1982.

[64] M. Cahay, M. McLennan, and S. Datta. **Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach**. *Phys. Rev. B*, 37:10125–10136, Jun 1988.

[65] P. A. Lee and A. Douglas Stone. **Universal Conductance Fluctuations in Metals**. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1622–1625, Oct 1985.

[66] Pritiraj Mohanty and Richard A. Webb. **Anomalous Conductance Distribution in Quasi-One-Dimensional Gold Wires: Possible Violation of the One-Parameter Scaling Hypothesis**. *Phys. Rev. Lett.*, 88:146601, Mar 2002.

[67] F. Reif. **Fundamentals of statistical and thermal physics.** *McGraw-Hill Kogakusha, Tokyo :, international student ed.*, edition, (1965).

[68] Ya. M. Blanter and M. Büttiker. **Shot noise in mesoscopic conductors**. *Physics Reports*, 336(1):1 – 166, 2000.

[69] A. M. O. Almeida and R. O. Vallejos. **Caos e mecânica quântica**. *Revista do CBPF, disponivel em http://portal.cbpf.br/.*

[70] H. J. Stockmann. **Quantum chaos: An introduction**. *Cambridge University Press, (1999).*

[71] G. D. Birkhoff. **Dynamical systems.** *A.M.S. Colloquium Publications, New York, 1927.*

[72] A. Saa e R. de Sá Teles. **Bilhares: Aspectos Físicos e Matemáticos.** *https://impa.br/wp-content/uploads/2017/04/29CBM_03.pdf.*

[73] R. Markarian. **Bilhares. A Hipótese Ergódica de Boltzmann.** *Matemática Universitária, 29:45 - 74, 2000.*

[74] A.R. Akhmerov. **Dirac and Majorana Edge States in Graphene and Topological Superconductors**. *Casimir PhD series. 2011.*

[75] Sven Gnutzmann and Burkhard Seif. **Universal spectral statistics in Wigner-Dyson, chiral, and Andreev star graphs. I. Construction and numerical results**. *Phys. Rev. E*, 69:056219, May 2004.

[76] Philippe Jacquod, Robert S. Whitney, Jonathan Meair, and Markus Büttiker. **Onsager relations in coupled electric, thermoelectric, and spin transport: The tenfold way**. *Phys. Rev. B*, 86:155118, Oct 2012.

[77] M. L. Mehta. **Random matrices**. *Academic Press*, 1991.

[78] E.V. Shuryak and J.J.M. Verbaarschot. **Random matrix theory and spectral sum rules for the Dirac operator in QCD**. *Nuclear Physics A*, 560(1):306 – 320, 1993.

[79] Jacobus Verbaarschot. **Spectrum of the QCD Dirac operator and chiral random matrix theory**. *Phys. Rev. Lett.*, 72:2531–2533, Apr 1994.

[80] Alexander Altland and Martin R. Zirnbauer. **Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures**. *Phys. Rev. B*, 55:1142–1161, Jan 1997.

[81] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. **Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films**. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.

[82] H. van Houten and C. W. J. Beenakker. **Quantum Point Contacts**. *ArXiv e-prints*, pages cond–mat/0512609, December 2005.

[83] C. W. J. Beenakker. **Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene**. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1337–1354, Oct 2008.

[84] R. M. Westervelt. **Graphene Nanoelectronics**. *Science*, 320(5874):324–325, 2008.

[85] Oleksii Shevtsov, Pierre Carmier, Cyril Petitjean, Christoph Groth, David Carpentier, and Xavier Waintal. **Graphene-Based Heterojunction between Two Topological Insulators**. *Phys. Rev. X*, 2:031004, Jul 2012.

[86] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. **Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions**. *Phys. Rev. Lett.*, 42:673–676, Mar 1979.

[87] Gerd Bergmann. **Weak localization in thin films: a time-of-flight experiment with conduction electrons**. *Physics Reports*, 107(1):1 – 58, 1984.

[88] Shinobu Hikami, Anatoly I. Larkin, and Yosuke Nagaoka. **Spin-Orbit Interaction and Magnetoresistance in the Two Dimensional Random System**. *Progress of Theoretical Physics*, 63(2):707–710, 1980.

[89] Michael P. Marder. **Condensed Matter Physics**. *Wiley-Intersciense, USA, 2000.*

[90] K. Efetov. **Supersymmetry in Disorder and Chaos**. *Cambridge University Press, Cambridge, 1997.*

[91] A. L. R. Barbosa. **Estatística de Contagem de Cargas e Efeitos de Interfência em Sistemas Mesoscópicos**. *Tese de Doutorado, UFPE, 2009.*

[92] G. Hernandez. **Fabry-Pérot Interferometes**. *ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1986.*

[93] A. M. S. Macêdo and Andre M. C. Souza. **Formation of Fabry-Perot resonances in double-barrier chaotic billiards**. *Phys. Rev. E*, 71:066218, Jun 2005.

[94] Y. V. Nazarov. **Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology**. *ed. por M. Rieth e W. Schommers (American Scientific, Valencia, CA), 2006.*

[95] Thomas Guhr, Axel Müller-Groeling, and Hans A. Weidenmüller. **Random-matrix theories in quantum physics: common concepts**. *Physics Reports*, 299(4):189 – 425, 1998.

[96] Eugene Paul Wigner. **The Nobel Prize in Physics 1963**. *Disponível em: https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1963/wigner/facts/.*

[97] Freeman J. Dyson. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I**. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):140–156, 1962.

[98] Freeman J. Dyson. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. II**. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):157–165, 1962.

[99] Freeman J. Dyson. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. III**. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):166–175, 1962.

[100] Freeman J. Dyson and Madan Lal Mehta. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. IV**. *Journal of Mathematical Physics*, 4(5):701–712, 1963.

[101] Madan Lal Mehta and Freeman J. Dyson. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. V**. *Journal of Mathematical Physics*, 4(5):713–719, 1963.

[102] Eugene P. Wigner. **Characteristic Vectors of Bordered Matrices With Infinite Dimensions**. *Annals of Mathematics*, 62(3):548–564, 1955.

[103] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin. **Electron transport in disordered graphene**. *Phys. Rev. B*, 74:235443, Dec 2006.

[104] S N Evangelou and D E Katsanos. **Spectral statistics in chiral-orthogonal disordered systems**. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(12):3237, 2003.

[105] PRAGYA SHUKLA. **Generalized Random Matrix Theory: A Mathematical Probe for Complexity**. *International Journal of Modern Physics B*, 26(16):1230008, 2012.

[106] A. F. Macedo-Junior. **Transporte em Nanoestruturas: Métodos de Movimento Browniano e Teoria de Circuitos**. *Tese de Doutorado, UFPE, 2006.*

[107] Pier A. Mello and Harold U. Baranger. **Interference Phenomena in Electronic Transport Through Chaotic Cavities: An Information-Theoretic Approach**. *Waves in Random Media*, 9:105–146, April 1999.

[108] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher. **New method for a scaling theory of localization**. *Phys. Rev. B*, 22:3519–3526, Oct 1980.

[109] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas. **Generalized many-channel conductance formula with application to small rings**. *Phys. Rev. B*, 31:6207–6215, May 1985.

[110] M. Büttiker. **Four-Terminal Phase-Coherent Conductance**. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1761–1764, Oct 1986.

[111] Yoseph Imry and Rolf Landauer. **Conductance viewed as transmission**. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S306–S312, Mar 1999.

[112] M. J. M. de Jong and C. W. J. Beenakker. ***Shot Noise in Mesoscopic Systems***, pages 225–258. Springer Netherlands, Dordrecht, 1997.

[113] P. Seba. **Random matrix theory and mesoscopic fluctuations**. *Phys. Rev. B*, 53:13024–13028, May 1996.

[114] S. Albeverio, F. Haake, P. Kurasov, M. Kus, and P. Seba. **S-matrix, resonances, and wave functions for transport through billiards with leads**. *Journal of Mathematical Physics*, 37(10):4888–4903, 1996.

[115] Yan V. Fyodorov and Hans-Jürgen Sommers. **Statistics of resonance poles, phase shifts and time delays in quantum chaotic scattering: Random matrix approach for systems with broken time-reversal invariance**. *Journal of Mathematical Physics*, 38(4):1918–1981, 1997.

[116] J. J. Sakura. **Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)**. *Addison Wesley, 1st edition, (1993).*

[117] S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simovič, R. Schleser, T. Ihn, P. Studerus, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard. **Counting Statistics of Single Electron Transport in a Quantum Dot**. *Phys. Rev. Lett.*, 96:076605, Feb 2006.

[118] F. A. G. ALMEIDA. **Algoritmos Numéricos de Matrizes Aleatórias Aplicados a Sistemas Mesoscópicos**. *Tese de Doutorado, UFPE, 2010.*

[119] P. W. Brouwer. **Generalized circular ensemble of scattering matrices for a chaotic cavity with nonideal leads**. *Phys. Rev. B*, 51:16878–16884, Jun 1995.

[120] J.J.M. Verbaarschot, H.A. Weidenmüller, and M.R. Zirnbauer. **Grassmann integration in stochastic quantum physics: The case of compound-nucleus scattering**. *Physics Reports*, 129(6):367 – 438, 1985.

[121] A. M. S. Macêdo. **Average conductance coefficients in multiterminal chaotic cavities**. *Phys. Rev. B*, 63:115309, Feb 2001.

[122] A.F. Macedo-Junior and A.M.S. Macêdo. **Brownian-motion ensembles of random matrix theory: A classification scheme and an integral transform method**. *Nuclear Physics B*, 752(3):439 – 475, 2006.

[123] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, and A. M. S. Macêdo. **Quantum interference correction to the shot-noise power in nonideal chaotic cavities**. *Phys. Rev. B*, 78:235305, Dec 2008.

[124] J. G. G. S. Ramos, M. S. Hussein, and A. L. R. Barbosa. **Fluctuation phenomena in chaotic Dirac quantum dots: Artificial atoms on graphene flakes**. *Phys. Rev. B*, 93:125136, Mar 2016.

[125] A. F. Macedo-Junior and A. M. S. Macêdo. **Universal transport properties of asymmetric chiral quantum dots**. *Phys. Rev. B*, 77:165313, Apr 2008.