



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Física

**ANÁLISE DIAGRAMÁTICA DOS
GRUPOS UNIVERSAIS: TEORIA
DO RUÍDO E O SINAL DA
QUIRALIDADE**

Ivana Ribeiro Araujo Carneiro de Lucena

Dissertação de Mestrado
JOÃO PESSOA
Julho de 2020

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

L935a Lucena, Ivana Ribeiro Araujo Carneiro de.
Análise diagramática dos grupos universais : teoria
do ruído e o sinal da quiralidade / Ivana Ribeiro
Araujo Carneiro de Lucena. - João Pessoa, 2020.
155 f. : il.

Orientação: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos.
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Ruído de disparo - Potência. 2. Quiralidade. 3.
Método diagramático. 4. Grafeno - Pontos quânticos. 5.
Regime de universalidade. I. Ramos, Jorge Gabriel Gomes
de Souza. II. Título.

UFPB/BC

CDU 53(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de Dissertação de
Mestrado da aluna **Ivana Ribeiro Araujo Carneiro
de Lucena**, candidata ao Título de Mestre em Física
na Área de Concentração Física da Matéria
Condensada.

Aos trinta dias do mês de julho do ano de dois mil e vinte, às 14:00, reuniram-se, remotamente, os membros da Banca Examinadora constituída para examinar a candidata ao grau de Mestre em Física na área de Física da Matéria Condensada, **Ivana Ribeiro Araujo Carneiro de Lucena**. A comissão examinadora composta pelos professores doutores: Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Paulo Sérgio Rodrigues da Silva (DF/UFPB) e Caio Henrique Lewenkopf (UFF). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra a candidata para que a mesma fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado “*Análise diagramática dos grupos universais: teoria do ruído e o sinal da quiralidade*”. Concluída a exposição, a candidata foi arguida pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: “**aprovada**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, José Sérgio Trindade Silva, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, **30 de julho de 2020**.

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos

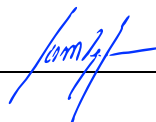
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Paulo Sérgio Rodrigues da Silva

UFPB

Prof. Dr. Caio Henrique Lewenkopf

UFF



Link da reunião:

Ata da Sessão Pública da Defesa de Dissertação de
Mestrado da aluna **Ivana Ribeiro Araujo Carneiro
de Lucena**, candidata ao Título de Mestre em Física
na Área de Concentração Física da Matéria
Condensada.

Aos trinta dias do mês de julho do ano de dois mil e vinte, às 14:00, reuniram-se, remotamente, os membros da Banca Examinadora constituída para examinar a candidata ao grau de Mestre em Física na área de Física da Matéria Condensada, **Ivana Ribeiro Araujo Carneiro de Lucena**. A comissão examinadora composta pelos professores doutores: Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Paulo Sérgio Rodrigues da Silva (DF/UFPB) e Caio Henrique Lewenkopf (UFF). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra a candidata para que a mesma fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado “*Análise diagramática dos grupos universais: teoria do ruído e o sinal da quiralidade*”. Concluída a exposição, a candidata foi arguida pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: “**aprovada**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, José Sérgio Trindade Silva, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, **30 de julho de 2020**.

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos _____

Orientador - UFPB

Prof. Dr. Paulo Sérgio Rodrigues da Silva _____

UFPB

Prof. Dr. Caio Henrique Lewenkopf _____

UFF

Link da reunião:

Ata da Sessão Pública da Defesa de Dissertação de
Mestrado da aluna **Ivana Ribeiro Araujo Carneiro
de Lucena**, candidata ao Título de Mestre em Física
na Área de Concentração Física da Matéria
Condensada.

Aos trinta dias do mês de julho do ano de dois mil e vinte, às 14:00, reuniram-se, remotamente, os membros da Banca Examinadora constituída para examinar a candidata ao grau de Mestre em Física na área de Física da Matéria Condensada, **Ivana Ribeiro Araujo Carneiro de Lucena**. A comissão examinadora composta pelos professores doutores: Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Paulo Sérgio Rodrigues da Silva (DF/UFPB) e Caio Henrique Lewenkopf (UFF). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra a candidata para que a mesma fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado “*Análise diagramática dos grupos universais: teoria do ruído e o sinal da quiralidade*”. Concluída a exposição, a candidata foi arguida pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: “**aprovada**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, José Sérgio Trindade Silva, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, **30 de julho de 2020**.

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de S. Ramos
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Paulo Sérgio Rodrigues da Silva
UFPB

Prof. Dr. Caio Henrique Lewenkopf
UFF



Link da reunião:

Agradecimentos

À UFPB e ao CNPq pelo espaço público e pelo auxílio concedido.

Ao meu amigo Jorge Gabriel Ramos, por tudo que tem me ensinado desde há muito. Em especial, agradeço por ter me apresentado a física como uma visão de mundo, como espaço, lugar, tempo e método de reflexão. Tudo que há de bom nessa dissertação é por sua causa. As partes ruins são falhas minhas em aprender o que você tentou me ensinar.

À professora Maria Luiza, pela coragem, amizade e por discussões intermináveis sobre física. Guardarei com afinho todas as minhas pérolas.

À Marília Santos, por ter me ensinado o método diagramático quando eu ainda estava no início da graduação.

Aos professores do Departamento de Física da UFPB, pelas disciplinas que tive a oportunidade de cursar. Aos servidores do PPGF pelo pragmatismo. E ao seu Mariano pelo café.

Aos meus amigos da física, sobretudo Saulo, com quem vivo a arte e as humanidades nos corredores da física.

Aos meus amigos do passado e presente Vitória Nunes, Janayna Antunes, Nathália Lins, Larah Diniz, Maria Rita Nóbrega, Gabriel Bandeira e João Gabriel (*in memoriam*), junto a quem construí e destruí mundos.

Ao meu pai, Rômulo Carneiro, por ser amável, decente e infalivelmente generoso.

À minha mãe, Cláudia Palmeira, por nunca ter me dado qualquer ideia de que eu não poderia fazer ou ser o que quisesse.

À minha irmã, Germana Ribeiro, por ter me enchido de amor, inspiração, livros e música, por ser incansável em tentar me proteger.

*A ave sai do ovo. O ovo é o mundo. Quem quiser nascer tem que
destruir um mundo.*

—HERNANN HESSE (Demian)

Resumo

Investigamos o transporte eletrônico em pontos quânticos caóticos de grafeno, também conhecidos como Bilhares de Dirac (BD). Notadamente, tais dispositivos nanoscópicos carregam intrinsecamente a simetria quirai/subrede originando propriedades relativísticas exóticas e não-triviais no transporte quântico, a exemplo do tunelamento Klein e de modos eletrônicos não-massivos de Dirac. Diversos estudos, no entanto, demonstram dificuldades na observação direta do sinal da simetria universal quiral. Sendo assim, motivados pela pergunta “quais são as evidências da simetria universal quiral no transporte quântico através de nanoestruturas?”, exploramos os principais observáveis de transporte em BD, condutância e potência do ruído de disparo, no regime de universalidade, ou seja, quando independem dos processos específicos de fabricação da nanoestrutura e de seus detalhes microscópicos. Utilizando uma extensão do método diagramático de integração no grupo unitário, que gerou 11.024 diagramas, obtivemos resultados analíticos exatos válidos inclusive nos limites semiclássico e quântico extremo. Analisando a fórmula obtida para a condutância, percebemos que o termo principal de interferência para a classe universal quiral é idêntico ao correspondente termo para as classes de Wigner-Dyson, semicondutores típicos. Devido à ausência de qualquer indicador da quiralidade na condutância, conjecturamos que esse observável é insensível à existência de subredes intrínsecas por não possuir termos de retroespalhamento coerente. Por outro lado, uma análise do caráter corpuscular do elétron embutido na potência do ruído de disparo nos levou a encontrar um sinal robusto e peculiar para um número arbitrário de canais de espalhamento. O sinal encontrado, gerado pelo termo principal de correção da interferência quântica, é a “impressão digital” da quiralidade que, através das nossas expressões analíticas, pode ser medido para qualquer número de canais abertos. Além disso, os resultados analíticos foram testados e confirmados através de uma simulação numérica baseada no formalismo de Mahaux-Weidenmüller. Nosso trabalho demonstra que tanto o caráter corpuscular quanto o ondulatório contribuem concomitantemente mediante o retroespalhamento coerente para gerar o sinal da quiralidade na física mesoscópica de sistemas abertos fora do equilíbrio.

Palavras-chave: Potência do Ruído de Disparo. Quiralidade. Método Diagramático. Grafeno. Pontos Quânticos. Universalidade

Abstract

We investigated the electronic transport in chaotic quantum dots of graphene, also known as Dirac Billiards (DB). Notably, such nanoscopic devices intrinsically carry chiral/sublattice symmetry giving rise to exotic and non-trivial relativistic properties in quantum transport, such as Klein tunneling and non-massive electronic Dirac modes. Several studies, however, demonstrate difficulties in directly observing the chiral universal symmetry signal. Thus, motivated by the question “What is the evidence of universal chiral symmetry in quantum transport through nanostructures?”, we explored the main observables of transport in DB, conductance and the shot noise power, in the universality regime, which means that they are independent of specific nanostructure manufacturing processes and their microscopic details. Using an extension of the diagrammatic method of integration over the unitary group, which generated 11.024 diagrams, we obtained exact analytical results valid even in the semi-classical and extreme quantum limits. In particular, analyzing the formula obtained for conductance, we realized that the main quantum interference term for the universal chiral class is identical to the corresponding term for the Wigner-Dyson classes, typical semiconductors. Due to the absence of any indicator of chirality in conductance, we conjecture that this observable is insensitive to the existence of intrinsic sublattice because it does not have backscattering terms. On the other hand, an analysis of the corpuscular character of the electron embedded in the shot noise power led us to find a robust and peculiar signal for an arbitrary number of scattering channels. The signal that was found, generated by the main quantum interference correction term, is the “fingerprint” of chirality which, through our analytical expressions, can be measured for any number of open channels. In addition, the analytical results were tested and confirmed through a numerical simulation based on the Mahaux-Weidenmüller formalism. Our work demonstrate that both the corpuscular and the undulatory character contribute concomitantly through coherent backscattering to generate the chirality signal in mesoscopic physics of open systems out of equilibrium.

Keywords: Shot Noise Power. Chirality. Graphene. Quantum Dots. Universality. Diagrammatic Method of Integration.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	More is different	2
1.2	Esta Tese	4
2	Pontos Quânticos de Grafeno	7
2.1	Pontos Quânticos	7
2.1.1	Heteroestruturas e espectro de energia	8
2.2	Realização Física: Pontos Quântico de Grafeno	11
2.2.1	Modelo Tight-Binding para o Grafeno - Reducionismo	11
2.2.2	Hamiltoniano de Dirac - Emergentismo	15
2.3	Grafeno versus Estruturas Semicondutoras 2D	18
2.4	Experimento Relevante	19
2.5	Conclusão	22
3	Transporte Quântico	25
3.1	O transporte clássico	25
3.2	Matriz de Transferência e Tunelamento Ressonante	30
3.2.1	Potencial Duplo	32
3.2.2	Barreira Dupla e Tunelamento Ressonante	34

3.3	O transporte em nanoestruturas	35
3.3.1	A abordagem de espalhamento	39
3.3.1.1	Formalismo de Espalhamento	40
3.3.1.2	Matriz de Esplhamento	42
3.3.1.3	Densidade de corrente	43
3.3.1.4	Teoria de Landauer-Büttiker	44
3.4	Conclusão	51
4	Matrizes Aleatórias e a Técnica Diagramática	53
4.1	Teoria de Matrizes Aleatórias	53
4.2	Teoria de Matrizes Aleatórias de Pontos Quânticos	54
4.2.1	Ponto Quântico Fechado	55
4.2.2	Pontos Quânticos Abertos	58
4.3	Integrais Gaussianas	62
4.3.1	Função Geratriz	62
4.3.2	Valores esperados gaussianos e o Teorema de Wick	63
4.3.2.1	Teorema de Wick	65
4.4	Técnica Diagramática	70
4.4.1	Integração de matrizes unitárias simétricas	75
4.5	Bilhar de Schrödinger vs Bilhar de Dirac	77
4.5.1	Condutância do Bilhar de Schrödinger	78
4.5.2	Condutância do bilhar de Dirac	80
4.6	Conclusão	85

5	Potência do Ruído de Disparo	87
5.1	Conceitos básicos de processos estocásticos	88
5.2	Fundamentos do ruído	91
5.2.1	Movimento Browniano	92
5.2.2	Ruído Térmico	96
5.2.3	Teorema da Flutuação-Dissipação	98
5.2.4	Ruído $1/f$	100
5.2.5	Ruído de Disparo Clássico	102
5.2.6	Densidade espectral das flutuações da corrente	104
5.3	Ruído de Disparo Quântico	105
5.3.1	Classificação do ruído	109
5.4	Ruído de Disparo em Dispositivos Quirais	109
5.4.1	Universalidade: Potência do Ruído de disparo	111
5.4.2	Simulação Numérica	113
6	Conclusões e Perspectivas	117
A	Pesos dos diagramas para o ensemble de Wigner-Dyson	119
B	Pesos dos diagramas para os ensembles com simetria quirial	121

Lista de Figuras

- 2.1 (a) Dois semicondutores separados, A e B, caracterizados pelos seus respectivos potenciais químicos (μ_A e μ_B), gaps de energia (E_{CA} e E_{CB}) e descontinuidades das bandas (ΔE_C e ΔE_V); (b) Quando postos em contato, ocorre troca de cargas e o sistema caminha para a situação onde há um potencial químico médio ou energia de Fermi (E_F); (c) perfil da banda de condução em uma junção do tipo ABA. Os potenciais químicos e a energia de Fermi podem ser entendidos como a energia limite até a qual os estados eletrônicos estão preenchidos (ver Ref.[17]). Em (d) tem-se uma comparação entre as densidades de estados para sistemas zero-, uni-, bi e tridimensionais. Figura retirada da Ref.[27] 9
- 2.2 a. Estrutura cristalina do tipo favo de mel do grafeno, com os vetores $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ e as duas sub-redes A e B. b. Correspondente zona de Brillouin. Os pontos de Dirac estão localizados nos pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ [24] 12
- 2.3 Esquerda: Espectro de energia do Grafeno (em unidades de t) para valores finitos de t e t' , com $t = 2.7eV$ e $t' = 0.2t$. Direita: zoom da banda de energia próximo de um ponto de Dirac [24] 14
- 2.4 (A) Esquema diagramático do dispositivo formado de Si/ SiO_2 /Gr/hBN/Gr (as camadas hexagonais em azul escuro são eletrodos de grafeno; azul claro, hBN; roxo, terminal posterior Si/ SiO_2). A tensão V_g é aplicada entre o grafeno inferior e o substrato de Si. Figura retirada da Ref.([78]) 20
- 2.5 (A e B) Posição relativa das bandas e dos níveis de Fermi nos dois eletrodos de grafeno rotacionados em um pequeno ângulo em relação um ao outro para condições destacadas pelas linhas tracejadas. Figura retirada da Ref.([78]). 20

- 2.6 Representação esquemática de uma condição ressonante para tunelamento entre dois eletrodos de grafeno em um campo magnético. A coloração gradiente da superfície de Fermi no coletor representa uma diferença de fase específica ϕ entre os componentes da função de onda (verde: $\phi = \pi$; vermelho: $\phi = 0$). Figura retirada da Ref.([78]) 21
- 3.1 Fio desordenado de comprimento L dividido em comprimentos que suportam correlação, L_c . 28
- 3.2 Gráfico que representa a probabilidade de transmissão através de uma barreira de potencial finita para $\sqrt{2mV_0a/\hbar}=1,3$ e 7 . A linha pontilhada representa o resultado clássico e as linhas sólidas representam o resultado previsto pela mecânica quântica. Figura retirada da Ref.[35] 33
- 3.3 Figura com o esquema do modelo original de Landauer para o transporte quântico. Figura retirada da Ref.[32] 36
- 3.4 Cavidade 2D com L guias. As setas dentro dos guias representam ondas entrando e saindo da cavidade. No guia l há N_l dessas ondas. Figura retirada da Ref.[50] 40
- 3.5 Figura com o esquema do modelo de Landauer-Büttiker para o transporte quântico: Exemplo com dois terminais. Figura retirada da Ref.[48] 45
- 4.1 Gráfico representando a distribuição de Wigner, $P_w(s)$, e a distribuição de Poisson, $P_P(s)$, como função do espaçamento entre níveis, s , para $D = 1$. Figura retirada da Ref.[55] 55
- 4.2 Densidade de autovalores para um hamiltoniano pertencente ao EGO com $N = 6000$, confirmando a lei do semicírculo de Wigner(curva vermelha). Figura retirada da Ref.[55] 59
- 4.3 Representação diagramática de (a.) matrizes unitárias U_{ab} e U_{ab}^* , (b.) eventual matriz fixa presente no argumento da média no ensemble de matrizes aleatórias e (c.) as funções δ_{ij} de Kronecker que contraem os índices das matrizes unitárias e fixam os tipos de permutação. Figura retirada da Ref.[72] 70
- 4.4 Representação diagramática de duas funções simples usadas para o cálculo de médias no ensemble unitário. Figura retirada da Ref.[72] 72

- 4.5 Todas as possíveis contrações de índices conforme a Eq.(4.55) aplicadas aos dois tipos especiais de funções de matrizes unitárias. Figura retirada da Ref.[72] 73
- 4.6 Representação diagramática de $\langle f^2 \rangle$. Figura retirada da Ref.[72] 75
- 4.7 Representação diagramática de $\langle f(U) \rangle$, onde U é uma matriz unitária e simétrica. O segundo termo surge dos vínculos de simetria, Ref.[32] 77
- 4.8 (a) Objetos básicos das regras diagramáticas: Elemento aleatório (U_{ij}) da matriz U , o projetor no espaço de canais (C_i) e, a delta Kronecker, representando a contração de índice (δ_{ij}) . (b) Representação diagramática da Eq.(4.85). (c) Média da condutância, Eq.(4.86). Note que os diagramas 1,2 e 3 têm pesos V_{11} e, os diagramas 4-9 possuem peso V_2 . Os pesos estão nos apêndices A e B. Figura retirada da Ref.([57]) 82
- 4.9 A média e a variância da condutância são plotados em unidades de $4e^2/h$ e $8e^4/h$, respectivamente. (a),(b) Caso de terminais simétricos, $N = N_1 = N_2$ e, (c),(d) caso de terminais assimétricos, com $N_1 = 2$. As linhas sólidas são as resultados exatos. 84
- 5.1 Classificação do ruído em função da frequência. Figura retirada da referência [4] 110
- 5.2 Média da potência do ruído de disparo realizada sobre o ensemble de matrizes S para um ponto quântico de grafeno com contatos simétricos. Os círculos são os resultados numéricos, enquanto as linhas representam os resultados analíticos. Nota-se a separação explícita entre as linhas que representam os três ensembles, essa separação é causada apenas pelo termo de interferência quântica da simetria de sub-rede, o termo quiral (TQ). 114
- 5.3 Média da potência do ruído de disparo realizada sobre o ensemble de matrizes S para um ponto quântico de grafeno com contatos assimétricos. Os círculos são os resultados numéricos, enquanto as linhas representam os resultados analíticos. Observa-se que as curvas para os três ensembles universais são separadas devido às correções de interferência quântica. 115

- 5.4 Média da potência do ruído de disparo realizada sobre o ensemble de matrizes S para um bilhar de Schrödinger com contatos simétricos. Os círculos são os resultados numéricos, enquanto as linhas representam os resultados analíticos. Nota-se, nesse caso, que não existe separação entre as curvas, caracterizando a ausência do termo de interferência quântica no caso de contatos simétricos. 116

Lista de Tabelas

- 4.1 Classificação de Dyson das classes de simetria segundo o parâmetro β . U é matriz dos autovetores de H , que deixa $P(H)$ invariante sob $H \rightarrow U H U^{-1}$. 57
- 4.2 A decomposição da matriz S como função de matrizes U , onde U é uma matriz ortogonal para o chCOE, unitária para o chCUE e simplética para o chCSE, como descrito na Ref.[38] 81

Introdução

Um dos problemas mais instigantes e de maior relevância para a física é a aparente ruptura entre o mundo macroscópico, descrito pela física clássica, e o mundo microscópico, regido pelas leis da mecânica quântica. De fato, esse problema tem consequências diretas tanto na compreensão fundamental da teoria quântica, quanto nas aplicações tecnológicas dela que se multiplicam com o desenvolvimento da nanociência. A nanociência representa um campo interdisciplinar moderno de pesquisa que congrega as áreas de física, matemática, química e engenharia. Em especial, propõe-se a esclarecer como as leis da mecânica quântica podem ser exploradas no intuito de obter o máximo de controle sobre o transporte de eletrônico e, conseqüentemente, o transporte de informação. A elucidação desse aspecto fomenta a proposição de novas ideias e ferramentas técnicas cujo caráter robusto e universal lhes confere aplicabilidade à computação quântica [1, 2, 3] e física de altas energias [7], por exemplo.

No âmbito experimental, a nanociência tem atingido resultados cada vez mais promissores na manipulação da estrutura atômica da matéria e, conseqüentemente, na realização de sistemas quânticos artificiais nanoestruturadas [9, 10, 8]. O ápice do mérito da pesquisa em controle do transporte quântico veio com o experimento realizado por Gustavsson *et al.* [11], esse mostrou ser possível controlar o processo de transmissão de uma única partícula fundamental por meio de um condutor metálico mesoscópico. Além disso, constatou-se que as propriedades espectrais de sistemas nanoestruturados, como pontos quânticos, são efetivamente análogas às dos sistemas típicos de física nuclear, permitindo, dessa forma, simular simetrias fundamentais da natureza em laboratórios de matéria condensada. Tais avanços têm contribuído para florescimento de uma nova era de tecnologias baseadas em propriedades quânticas emergentes da matéria com potencial impacto nas vidas social e econômica atuais e futuras. Em resposta a esta demanda, diversos países estão dedicando altas quantias no fomento da pesquisa básica em nanociência. Por exemplo, na Europa, o *Quantum Manifesto* [12], uma petição pública que contou com mais de 3000 assinaturas, requereu à Comissão Europeia o investimento de 1 bilhão de euros em projetos e iniciativas de pesquisa em tecnologias quânticas.

No que lhe concerne, a pesquisa teórica em nanociências possui um caráter

plural, residindo na fronteira entre física mesoscópica e nuclear. Ao longo das últimas décadas, observou-se uma miríade de novos fenômenos universais, i.e., fenômenos independentes dos processos específicos de fabricação do sistema, que poderiam em princípio ser usados no desenvolvimento de uma “engenharia” de estados quânticos. A universalidade da descrição teórica de transporte quântico de elétrons em nanodispositivos abre interessantes perspectivas para realizações experimentais em sistemas caóticos de ondas clássicas cuja tecnologia é de menor custo. Importantes exemplos são a dissipação de energia ultrassônica em bilhares electromecânicos [13] e o espalhamento de micro-ondas em cavidades [14].

Historicamente, a contraparte não clássica de sistemas caóticos foi considerada por muito tempo uma área dominada quase que completamente por físicos teóricos [15]. Contribuições experimentais adivinham quase exclusivamente de resultados de espalhamentos de partículas em física nuclear. De maneira fortuita, os ensembles de matrizes de espalhamento típicos dos sistemas mesoscópicos contemplam aqueles estudados por Wigner e Dyson em física nuclear. Esta analogia direta se deve à universalidade, ou seja, ao fato de que as propriedades do espalhamento quântico caótico dependerem quase que exclusivamente de simetrias fundamentais da natureza. Sendo assim, caracterizar de forma eficiente e exata as simetrias da natureza é crucial para o desenvolvimento de novas tecnologias baseada no transporte de elétrons em nanoestruturas.

Hoje é reconhecida a relevância da física mesoscópica para o avanço de uma descrição emergentista da física. Ademais, dispositivos mesoscópicos (nanoestruturas) têm sua importância destacada no contexto atual, onde se busca processar informação quântica. Em especial, com a descoberta de novos materiais como o Grafeno, que exibem propriedades exóticas unicamente devido a sua simetria emergente, os estudos na área de física mesoscópica requerem ainda mais atenção da comunidade científica.

1.1 More is different

A física da matéria condensada constitui um dos principais cenários para o desenvolvimento de novas tecnologias [16, 17], pois seus modelos são cada vez mais realísticos. Dentre a vasta literatura da área, destacam-se os estudos canônicos do físico de Bragg, que mostraram a possibilidade de arranjo estável de longo alcance em materiais cuja estrutura pode ser decomposta em subestruturas microscopicamente periódicas, garantindo dessa forma a formação de simetria emergentes [18] e de propriedades não triviais da matéria. [19, 20, 21]

Mais recentemente, com o controle experimental do grafeno [22, 23], um material verdadeiramente bidimensional, as propriedades do transporte eletrônico mudaram de forma contundente. O grafeno possui uma estrutura periódica de átomos de carbono dispostos em uma estrutura hexagonal [24, 25]. No nível de Fermi, seus elétrons podem ser descritos com uma relação de dispersão linear, levando, efetivamente, a uma física de partículas sem massa que atravessam a nanoestrutura de maneira “relativística” ou, em outras palavras, os elétrons podem ser vistos como neutrinos sem massa descritos pela equação de Dirac. Nesse cenário, há a formação de uma estrutura spinorial que, no caso do grafeno, é interpretada como novos graus de liberdade associados à estrutura de sub-rede. Ou seja, gera-se, assim, quiralidade com relevância teórica e experimental. No presente trabalho chamaremos de “dispositivos de Dirac” as folhas de grafeno bidimensionais sem impurezas e todas as estruturas com simetria de sub-rede.

A quiralidade é uma propriedade fundamental dos elétrons com o espectro relativístico encontrado no grafeno e nos isolantes topológicos. Ela desempenha um papel crucial em fenômenos relativísticos, sendo utilizada para explicar o tunelamento de Klein, a ausência de retroespalhamento nas junções pn do grafeno [4-6], o espectro peculiar de Landau, em que um nível é fixado exatamente no ponto Dirac, levando ao efeito Hall quântico semi-inteiro [1-2], entre outras aplicações, mas ainda é muito difícil de ser medida diretamente. A quiralidade é determinada pela fase relativa na função de onda de dois componentes das quase-partículas de Dirac, que surge da estrutura de sub-rede do grafeno. Essa função de onda de duas componentes é normalmente descrita em termos de um vetor específico, o pseudo-spin, que para partículas quirais, está bloqueado em sua direção de movimento.

Como dito anteriormente, apesar de grandes esforços, sinais quânticos dos graus de liberdade quirais são dificilmente encontrados no transporte quântico [15]. A principal razão é que o aumento da espessura dos terminais conectados à amostra cria mais canais que eliminam facilmente as correções de interferência quântica da condutância [19-21]. Em particular, os resultados analíticos conhecidos mostram que a correção é insignificante quando comparada ao termo ôhmico principal. Como razão central para tal contribuição incipiente, pode-se indicar que a condutância não é significativamente afetada pelo retroespalhamento [22-24]. De fato, pelo formalismo de Landauer, a condutância depende basicamente da possibilidade de tunelamento. Uma maneira de introduzir mecanismos de retroespalhamento seria através da introdução de contatos não ideais, que ligam os terminais ideais ao ponto quântico do grafeno. Entretanto, os contatos podem competir facilmente com os graus de liberdade da sub-rede, o que torna esse projeto pouco esclarecedor ou impróprio. Nesse sentido, propomos um conjunto de possibilidades para a medição direta dos efeitos no transporte quântico da simetria quiral em dispositivos de

Dirac usando ruído de disparo.

Quase que invariavelmente, quando os físicos falam sobre ruído, eles se referem aos processos aleatórios de vários tipos que perturbam suas medições e não ao ruído audível. No entanto, o ruído entrou na física com a invenção do áudio, quando ficou claro que o que afetava a audição do rádio era devido a fenômenos físicos nos circuitos eletrônicos dos receptores. Pouco tempo após a invenção do rádio, o desenvolvimento de tubos a vácuo abriu caminho para uma infinidade de fontes eletrônicas, circuitos e comunicações práticas de áudio. Os amplificadores de áudio baseados em tríodos pareciam inicialmente capazes de obter amplificação ilimitada de sinais fracos e eles concordaram em ter, nas palavras de Walter Schottky, um dos primeiros pesquisadores da área, “o mesmo significado” (para sinais elétricos) do microscópio em óptica. No entanto, logo ficou claro que havia limites físicos significativos para o ganho do amplificador e, em seu artigo de referência de 1918, Schottky observou que eles se deviam à quantização inevitável dos portadores de carga. Desde então, o ruído devido à quantização de carga tornou-se conhecido como ruído de disparo.

A potência do ruído de disparo ocorre mesmo a temperatura nula, basicamente como efeito da discretização da matéria e como extensão espacial da função de onda dos elétrons [6,27]. A potência do ruído de disparo carrega os termos de retroespalhamento na formulação de Landauer-Büttiker, mesmo com contatos ideais. No caso específico de uma estrutura quiral, devemos lembrar não haver uma maneira matemática de descrever toda a rede Bravais com um par de vetores. Isso sugere a criação de uma base que, no que lhe concerne induz, naturalmente a formação de sub-redes. A necessidade de usar uma base forma picos de Bragg associados ao retroespalhamento. Sendo assim, a potência do ruído de disparo pode oferecer fortes sinais quânticos da estrutura quiral, em oposição à condutância. Portanto, nosso estudo revelará sinais quânticos fortemente mensuráveis associados à simetria de sub-rede e ao transporte de neutrinos relativísticos.

1.2 Esta Tese

Nesta tese, pretendemos dar mais um passo para a compreensão dos efeitos da simetria quiral no transporte quântico. Com esse objetivo, investigamos a condutância e a potência do ruído de disparo de dispositivos quirais confinados cuja dinâmica clássica subjacente possa apresentar dinâmica caótica.

No Cap.2, apresentamos em detalhes o que são pontos quânticos e como são fabricados, além de apresentar os sistemas estudados nessa dissertação: pontos

quânticos de Dirac, os quais são nanoestruturas sintetizadas com materiais que carregam intrinsecamente a simetria quirai, a exemplo do grafeno. No Cap.3, mostramos a teoria do transporte clássico e o seu domínio de validade. Essa teoria falha quando aplicada a dispositivos na escala quântica, pois nesse caso surgem efeitos de interferência quântica e caos, afetando as propriedades de transporte. A partir desse fato, nós utilizamos a abordagem de matriz de espalhamento para mostrar que, no regime mesoscópico, o valor da condutância é dado pelos autovalores de transmissão para o caso bidimensional (ponto quântico). Ou seja, uma vez fixada a matriz de espalhamento e, conseqüentemente, a matriz de transmissão, obtém-se imediatamente a condutância do sistema, essa é a conhecida Teoria de Landauer-Büttiker. Usualmente, dentro do formalismo de Landauer-Büttiker, ignora-se a origem microscópica da matriz de espalhamento e o hamiltoniano subjacente. Uma maneira de tratar o problema é estabelecer médias em um ensemble de “cópias” do sistema original tendo como vínculos as simetrias emergentes.

A partir da teoria de matrizes aleatórias que será tratado no Cap.4, desenvolvemos uma extensão do método diagramático de integração no grupo unitário para calcular a condutância em dispositivos que suportavam simetria das classes universais de Wigner-Dyson (WD) e classes universais Quirais. Ao realizar o cálculo, percebemos que o termo principal dos efeitos de interferência quântica da condutância para o caso quirai era equivalente ao do caso padrão, descrito pelos ensembles de WD. Isso significa que a simetria quirai não afeta o termo principal da correção devido à interferência quântica. Analisamos e concluímos que esse fato se deve a ausência de retroespalhamento e, conseqüentemente, a irrelevância, no limite semiclássico, da estrutura de sub-rede dos dispositivos quirais. Apresentamos argumentos físicos fortes para sustentar que se fazia necessário o estudo de outro observável que carregasse a informação do sinal quirai mesmo no limite semiclássico. Ao fazer isso, escolhemos estudar a potência do ruído de disparo que contempla termos de retroespalhamento.

Finalmente, no Cap.5, fizemos uma revisão minuciosa do ruído na literatura, desde o movimento browniano até a potência do ruído de disparo, um tipo de ruído inerente a natureza granular da matéria e se faz presente mesmo a temperatura nula. No final desse capítulo, apresentamos os resultados originais que consistem de um cálculo analítico e uma correspondente confirmação numérica do sinal quirai em dispositivos conhecidos como bilhares de Dirac. Os resultados analíticos são universais e exibem um robusto e peculiar sinal para um número arbitrário de canais de espalhamento.

No Cap.6 apresentamos as conclusões deste trabalho e enumeramos possíveis propostas de sua continuidade corroboradas pelos resultados obtidos até o momento. Os Apêndices A e B contêm pesos dos diagramas apresentados no

Cap.4.

Pontos Quânticos de Grafeno

Nossa intenção neste capítulo é fornecer ao leitor elementos suficientes para a compreensão da física dos Pontos Quânticos de Grafeno, cujos quais representam as principais realizações experimentais dos sistemas estudados nesta dissertação. Não temos a pretensão de representar toda a literatura sobre o tema, uma vez que a mesma é bastante vasta. Começamos discutindo heteroestruturas, pontos quânticos usuais, para em seguida introduzir pontos quânticos intrinsecamente quirais, pontos quânticos feitos de grafeno, por exemplo. A discussão é comparativa, primeiro uma comparação entre descrições de caráter emergente e reducionista, segundo a comparação ocorre entre as propriedades dos pontos quânticos quirais e não quirais.

2.1 Pontos Quânticos

Pode-se dizer que a física mesoscópica estuda sistema na fronteira entre o mundo microscópico e macroscópico, combinando mecânica quântica com um número de graus de liberdade da ordem de 10^{23} . Tal combinação faz com que surjam fenômenos emergentes que não podem ser entendidos através do estudo de cada uma das partículas individualmente. As simetrias presentes no sistema, por exemplo, podem alterar suas propriedades de transporte. Exemplos típicos de dispositivos mesoscópicos amplamente utilizado para investigar o transporte quântico são os Pontos Quânticos (PQ). PQ são cavidades condutoras delimitadas por regiões isolantes e com dimensões espaciais que permitem o transporte coerente de elétrons através de sua estrutura. Em termos gerais, esses sistemas têm dimensões típicas variando de nanômetros a alguns micrômetros. Nos PQ, o confinamento ocorre nas três dimensões espaciais, resultando em um espectro discreto de energia, tal qual o de átomos ou moléculas. Dessa forma, pode-se pensar nos PQ como átomos artificiais cujo número de elétrons encontrados nesses dispositivos pode variar desde um único elétron até alguns milhares. Essas estruturas quânticas possuem tanto o comprimento de coerência de fase (L_ϕ) quanto o livre caminho médio elástico (l_e) excedendo as dimensões do próprio dispositivo, atingindo-se,

desse modo, o regime de transporte balístico. No regime balístico, a interferência entre as ondas espalhadas pelas fronteiras irregulares do sistema gera efeitos no transporte equivalentes aos do regime difusivo, a exemplo das flutuações universais da condutância e localização fraca.

PQ podem ser construídos por técnicas modernas de litografia, brevemente descritas neste documento. No que se refere a geometria, os PQ podem ter uma estrutura regular, com propriedades específicas e não universais, ou uma estrutura irregular que manifesta propriedades universais. Esse caráter de universalidade surge em cavidades nas quais a dinâmica clássica correspondente é caótica. Os sistemas irregulares podem ser classificados consoante as simetrias fundamentais da natureza, tais como reversão temporal, quiral e partícula-buraco.

2.1.1 Heteroestruturas e espectro de energia

A síntese de amostras mesoscópicas, como PQ, é um grande desafio dos tempos atuais e só teve um avanço significativo depois da sintetização de chamadas heteroestruturas [26]. As heteroestruturas são formadas pela junção de semicondutores com diferentes estruturas de banda, tendo como exemplo o GaAs e o AlGaAs. Quando esses materiais são postos em contato atômico, em decorrência do crescimento epitaxial, aparece uma descontinuidade na banda de energia da estrutura resultante [27], nesse ponto descontínuo emerge uma espécie de poço de potencial capaz de limitar o movimento de partículas fundamentais na direção de crescimento da estrutura. A Fig.(2.1) ilustra detalhadamente o diagrama de bandas de energia para o caso de dois semicondutores genéricos com gaps diferentes, A e B . Na junção AB , portadores de carga migram de um material para o outro até que a condição de equilíbrio seja estabelecida através da igualdade entre os potenciais químicos dos dois lados da junção, $\mu_A = \mu_B$. Uma consequência desse equilíbrio se manifesta por meio do *entortamento* das bandas na região da interface. Desse modo, na região da interface tem-se:

$$E_{CA} = E_{CB} + \Delta E_C \quad (2.1)$$

com E_{CA} e E_{CB} representando os perfis da banda de condução para os materiais de cada lado da interface e ΔE_C as descontinuidades das bandas.

Quando as dimensões de um determinado sistema são comparáveis ao comprimento de onda de De Broglie (λ_B), surge confinamento e, portanto, o movimento dos portadores torna-se quantizado, implicando em mudanças no espectro de energia e nas propriedades dinâmicas dos portadores [28, 29]. Se apenas uma das direções é comparável a λ_B , diz-se que o sistema se comporta dinamicamente como uma estrutura bidimensional, ou mais comumente chamado de poços quânticos.

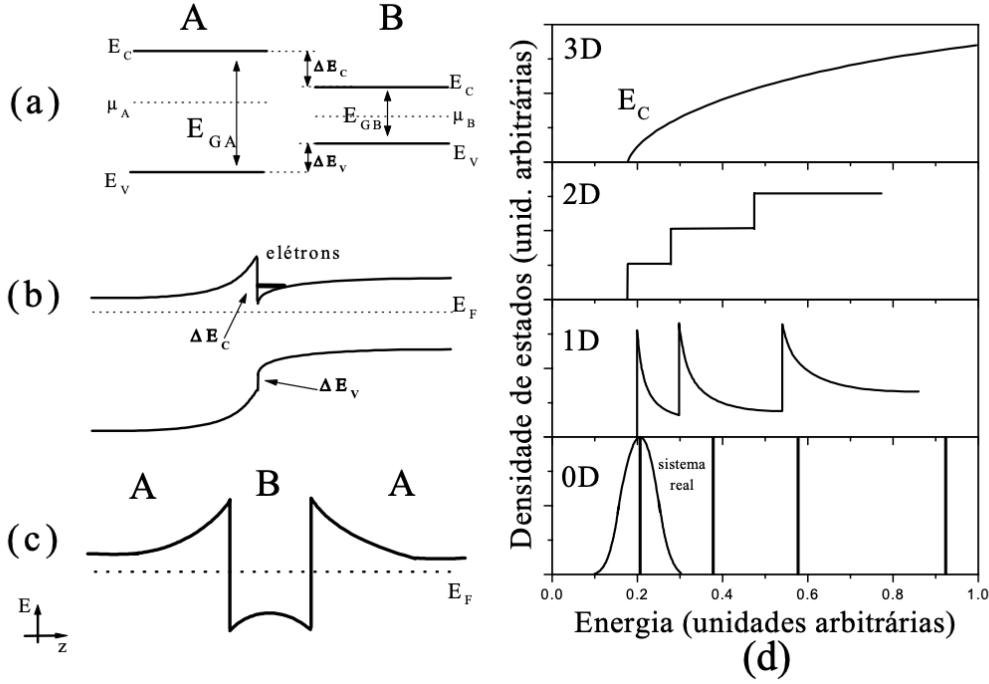


Figura 2.1 (a) Dois semicondutores separados, A e B, caracterizados pelos seus respectivos potenciais químicos (μ_A e μ_B), gaps de energia (E_{CA} e E_{CB}) e descontinuidades das bandas (ΔE_C e ΔE_V); (b) Quando postos em contato, ocorre troca de cargas e o sistema caminha para a situação onde há um potencial químico médio ou energia de Fermi (E_F); (c) perfil da banda de condução em uma junção do tipo ABA. Os potenciais químicos e a energia de Fermi podem ser entendidos como a energia limite até a qual os estados eletrônicos estão preenchidos (ver Ref.[17]). Em (d) tem-se uma comparação entre as densidades de estados para sistemas zero-, uni, bi e tridimensionais. Figura retirada da Ref.[27]

Limitando-se o movimento em duas e depois em três dimensões, obtêm-se sistemas unidimensionais, ou fios quânticos, e zero dimensionais, ou *pontos quânticos*. [30, 31]

Comparando o λ_B associado a um elétron e as dimensões características de um poço de potencial típico em uma heteroestrutura, como no sistema InAs/GaAs, o valor $E = 0.9\text{eV}$ é típico para o potencial de confinamento de elétrons (descontinuidade da banda de condução). O comprimento de De Broglie associado é dado por

$$\lambda_B = \frac{\hbar}{\sqrt{2mqV_0}} = \frac{1.23}{\sqrt{m^*V_0}} \quad (2.2)$$

e usando $V_0 = 0.9\text{eV}$ e $m^* = 0.023m_0$ (massa efetiva para os elétrons no InAs), obtém-se $\lambda_B \approx 8nm$, o qual é um valor razoável se comparado às dimensões típicas

de poços e pontos quânticos e, neste caso, pelo menos um nível discreto pode ser observado.

Por razões pedagógicas, consideremos uma estrutura genérica do tipo ABA. Neste caso, a forma da banda de condução da heteroestrutura ABA é tal como representada na Fig.(2.1.c). Percebe-se na mesma a formação de um poço quântico finito como os tipicamente apresentados nos cursos de mecânica quântica. Destaca-se que as características deste poço podem ser controladas externamente, como a profundidade do poço que pode ser variada. E, as propriedades dos níveis eletrônicos permitidos num poço quântico dependem basicamente das características físicas do poço, tais como largura e profundidade, tem-se assim um versátil laboratório de mecânica quântica. Por ser um dispositivo quântico pode-se descrever o comportamento de um elétron nesta estrutura recorrendo à equação de Schrödinger:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) \right] \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z), \quad (2.3)$$

$$V(z) = \Delta E_C + \Phi(x, y, z). \quad (2.4)$$

E é a energia total do nível quantizado, $\Psi(x, y, z)$ é a função de onda quântica e Φ é o potencial devido à redistribuição de cargas na interface, como representado pela curvatura das bandas próximas às interfaces na Fig.(2.1.c) [27].

A presença de um poço quântico altera o espectro energético acessível aos elétrons dentro dele e agora somente alguns valores discretos de energia são permitidos. Isso significa que para cada estado permitido, os elétrons podem mover-se livremente na direção x-y, mas não na direção z. A energia correspondente a um dado estado nesta estrutura é dada por

$$E = E_{n,z} + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_z^2 + k_y^2) \quad (2.5)$$

onde o primeiro termo é relativo à energia dos níveis discretos na direção z, e o segundo termo descreve a energia nas direções x e y. Note que o movimento dos elétrons e a energia associada tornaram-se quantizadas, representados pelo índice n e, os k's são quantizados na direção z. O sistema comporta-se dinamicamente como um sistema bidimensional com energia de dispersão quadrática.

Com base nas considerações anteriores, para obter um potencial que confina os elétrons nas três direções espaciais ou ponto quântico basta desenvolver um método que limite o movimento dos elétrons também nas direções x e y da estrutura ABA.

Em suma, o processo de preparação de PQ envolve:

1. O crescimento de um cristal específico;
2. Epitaxia para adicionar camadas de diferentes materiais;
3. uma peça para a lateral da amostra;
4. Processo de litografia

2.2 Realização Física: Pontos Quântico de Grafeno

A matéria-prima para a vida é o carbono. As formas alotrópicas mais conhecidas do mesmo são o diamante e o grafite. O último consiste em camadas separadas, cada uma com um átomo de espessura, formando uma estrutura do tipo favo de mel. Essas camadas são fracamente ligadas umas às outras, portanto, podem ser separadas de forma relativamente simples. Vale ressaltar que tal propriedade é crucial no processo de escrita com lápis. Na verdade, grafite vem do grego e significa “para escrever”. Em 1984, Gordon W. Semenoff mostrou que elétrons em uma única camada de grafite são bem descritos pela forma mais simples da equação de Dirac, a mesma usada para descrever partículas sem massa em um *mundo* bidimensional. Por outro lado, isolar uma única camada de grafite, também chamada de grafeno, parecia algo remoto para a época. Existia a “crença” de que materiais verdadeiramente bidimensionais não existiam, de fato. Finalmente, em 2004, Andre Geim e Konstantin Novoselov obtiveram sucesso em isolar a primeira folha de grafeno.

O grafeno é um material com propriedades peculiares, fato este que permite sua aplicação em diversos cenários, em especial, na spintrônica. Em contraste com a eletrônica clássica, que opera usando a carga eletrônica e está gradualmente atingindo seus limites impostos pela mecânica quântica, a spintrônica foca em uma diferente propriedade do elétron: spin (ou momento magnético intrínseco).

Nesse capítulo revisaremos a física do grafeno e conectar com nossos resultados teóricos.

2.2.1 Modelo Tight-Binding para o Grafeno - Reducionismo

O grafeno tem sido descrito como “o irrevogável material plano” (*Geim e MacDonald, 2007*), ou seja, o mais perfeito material bidimensional possível na natureza, pois este tem exatamente a espessura de um átomo e a dinâmica de

portadores de carga fica necessariamente restrita a uma camada bidimensional. Além disso, o transporte eletrônico no grafeno é muito peculiar, dado que a sua rede do tipo favo de mel carrega, intrinsecamente, duas sub-redes equivalentes, e tais sub-redes dão origem à quiralidade, importante propriedade de simetria que foi central na obtenção dos resultados desta dissertação.

A estrutura do tipo favo de mel pode ser pensada como uma rede triangular com uma base com dois átomos por célula unitária, com os vetores bidimensionais da rede sendo $\mathbf{a}_1 = (a/2)(3, \sqrt{3})$ e $\mathbf{a}_2 = (a/2)(3, -\sqrt{3})$ com $a \approx 0.142nm$, representando a distância entre carbonos. A célula fundamental no espaço recíproco é a zona de Brillouin, que, no caso do grafeno, contém dois pontos não equivalentes, $\mathbf{K} = (2\pi/(3a), 2\pi/(3\sqrt{3}a))$ e $\mathbf{K}' = (2\pi/(3a), -2\pi/(3\sqrt{3}a))$, e estes são chamados de pontos de Dirac (PD). Os PD são de grande importância no transporte eletrônico do grafeno, eles ocupam um papel similar aos dos pontos Γ no gap das bandas de semicondutores como o GaAs. Essencialmente, toda a física discutida neste trabalho é: a física dos portadores de carga (elétrons e/ou buracos) no grafeno perto dos pontos de Dirac (ou seja, com o vetor de onda $q = |\mathbf{q}| \ll 2\pi/a$ dos pontos de Dirac); e a física dos semicondutores bidimensionais que ocorrem ao redor do ponto Γ . Fig.(2.2)

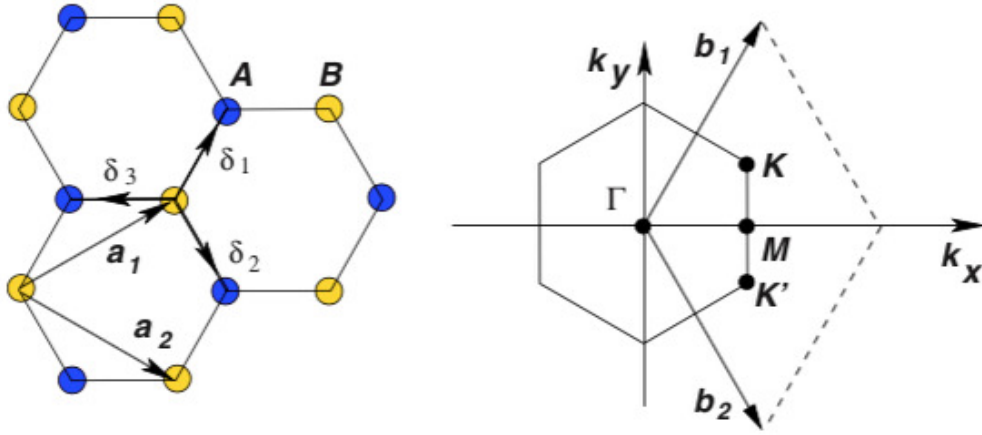


Figura 2.2 **a.** Estrutura cristalina do tipo favo de mel do grafeno, com os vetores $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ e as duas sub-redes A e B. **b.** Correspondente zona de Brillouin. Os pontos de Dirac estão localizados nos pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ [24]

Partindo de um modelo reducionista, ou seja, olhando para a interação átomo-átomo, vamos definir no hamiltoniano utilizando aproximação de primeiros vizinhos:

$$\hat{H} = -t \sum_{(i,j),\sigma} (\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\sigma} + \hat{b}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}) - t' \sum_{((i,j)),\sigma} (\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\sigma} + h.c.) \quad (2.6)$$

onde $\hat{a}_{i\sigma}(\hat{a}_{i\sigma}^\dagger)$ é um operador fermiônico que aniquila (cria) um elétron de spin verdadeiro $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no i -ésimo átomos da sub-rede **A**, $\hat{b}_{j\sigma}(\hat{b}_{j\sigma}^\dagger)$ é também um operador fermiônico que aniquila (cria) elétrons na sub-rede **B**, (i,j) denota a soma sobre os primeiros vizinhos e $((i,j))$ a soma sobre os segundos vizinhos. Nota-se que os primeiros vizinhos de um determinado átomo da sub-rede **A** são três átomos da sub-rede **B**, e vice-versa, enquanto os segundos vizinhos de um dado átomo totalizam 6 e são da mesma sub-rede. O parâmetro de *hopping* entre primeiros vizinhos, $t \approx 2.8eV$, é pelo menos uma ordem de magnitude maior do que entre segundos vizinhos, $t' < 0.1eV$. Desconsiderando a interação entre segundos vizinhos, o hamiltoniano, que parte de uma visão reducionista de primeiros princípios, toma forma mais simples,

$$\hat{H} = -t \sum_{(i,j),\sigma} (\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\sigma} + \hat{b}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}) \quad (2.7)$$

Objetivando-se diagonalizar o hamiltoniano do grafeno, pode-se decompor os operadores em termos de componentes de Fourier dadas por,

$$\hat{a}_{i\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (2.8)$$

$$\hat{b}_{i\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (2.9)$$

onde $\mathbf{k}$ é o vetor de onda no chamado espaço recíproco, enquanto $\mathbf{r}_i$ é o vetor de posição do i -ésimo átomo na sub-rede correspondente. Nota-se que existem N átomos em cada sub-rede e a transformação aplicada leva os operadores de criação e aniquilação do espaço real, onde as posições correspondem aos índices i,j para o espaço de momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, já que o sistema em questão é bidimensional. Nas Eqs.(2.8)-(2.9), que são transformadas de Fourier discretas, o N representa o número de átomos da rede (ou de sítios). Utilizando a representação de Fourier da delta de Dirac,

$$\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_i e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_i} \quad (2.10)$$

e substituindo as Eqs.(2.8)-(2.9) e seus respectivos conjugados hermitianos na Eq.(2.7), após alguma álgebra o hamiltoniano descrito pela interação entre primeiros vizinhos fica escrito:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger H \psi_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.11)$$

onde H_N é uma matriz e o $\psi_{\mathbf{k}\sigma}$ é um *pseudo-spinor* na chamada representação de Nambu. Esses são dados por

$$H_N = \begin{bmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f(\mathbf{k})^* & 0 \end{bmatrix}$$

$$\psi_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{bmatrix}$$

e a função $f(\mathbf{k})$ é definida pelo modelo *tight-binding* através da interação com os primeiros vizinhos, com vetores relativos δ_n definidos previamente na primeira seção. Substituindo os δ_n em $f(\mathbf{k})$, tem-se

$$f(\mathbf{k}) = -t \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} \quad (2.12)$$

$$f(\mathbf{k}) = -te^{ik_y a} \left[1 + 2e^{\frac{-3i}{2}k_y a} \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \right] \quad (2.13)$$

A energia de dispersão de monocamadas do grafeno fora obtida primeiramente pelo físico Wallace em 1947, utilizando o procedimento aqui descrito de primeiros vizinhos, mantendo a interação de segundos vizinhos. Através da diagonalização da matriz H_N , obtemos os autovalores resultantes na própria energia de dispersão,

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm|f(\mathbf{k})| = \pm t \left[1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{3k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \right]^{1/2} \quad (2.14)$$

onde o sinal de positivo se aplica a banda superior (banda de condução, π), e o sinal negativo a banda inferior (banda de valência), (π^*). Fica claro na eq.2.14 que o espectro é simétrico em relação ao nível zero de energia. Isto, no entanto, só é verdade desconsiderando uma interação de segundos vizinhos, pois, para valores finitos de t' (*hopping* de segundos vizinhos), a simetria elétron-buraco é quebrada, e, as bandas π e π^* tornam-se assimétricas. Na figura 2.3 está exposta toda a estrutura de bandas do grafeno tanto com interação de primeiros quanto de segundos vizinhos. Na mesma figura, também está descrita a estrutura de banda próximo a um ponto de Dirac (pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ da zona de Brillouin).

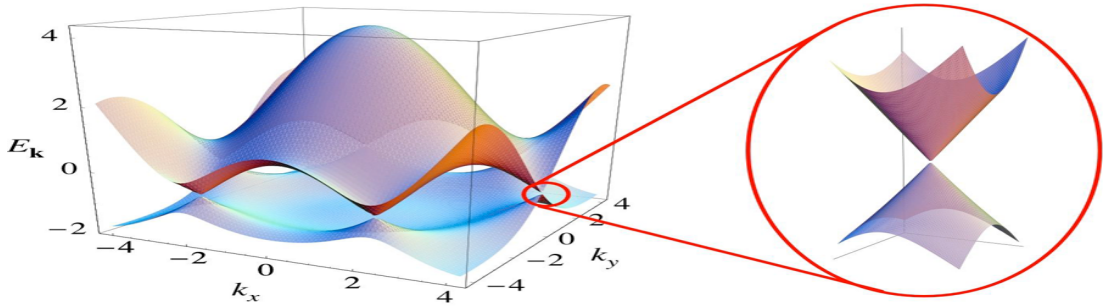


Figura 2.3 Esquerda: Espectro de energia do Grafeno (em unidades de t) para valores finitos de t e t' , com $t = 2.7\text{eV}$ e $t' = 0.2t$. Direita: zoom da banda de energia próximo de um ponto de Dirac [24]

O potencial eletroquímico $\mu(T=0) = E_F$ do grafeno em temperatura nula ($T=0$) passa exatamente por zero, ou seja, o nível de Fermi no grafeno é exatamente zero. Outro fato importante é que as duas bandas de energia, de valência e de condução, se tocam e, conseqüentemente, $E_+ = E_- = 0$

2.2.2 Hamiltoniano de Dirac - Emergentismo

Objetivando estudar a física próximo aos pontos Dirac, expande-se a função $f(\mathbf{k})$ em série de Taylor em torno de $\mathbf{K}$, e lembrando que $f(\mathbf{K}) = 0$,

$$f(\mathbf{q}) = f(\mathbf{k} - \mathbf{K}) = \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} = \frac{3at}{2}[q_x - q_y], \quad (2.15)$$

onde o vetor $\mathbf{q} = (q_x, q_y) = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ corresponde a um pequeno descolamento no vetor de onda $\mathbf{k}$ em torno do ponto $\mathbf{K}$ e $\nabla_{\mathbf{k}} = (\partial/\partial k_x, \partial/\partial k_y)$ é o operador gradiente em relação às variáveis $\mathbf{k}$. Ao aplicar a função $f(\mathbf{q}) = \hbar(q_x - iq_y)$ na definição de H_N , pode-se escrever o hamiltoniano expandido em torno do ponto $\mathbf{K}$ na forma que segue

$$H = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \psi_{\mathbf{q}\sigma} \quad (2.16)$$

onde $\psi_{\mathbf{q}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{q}\sigma} \\ b_{\mathbf{q}\sigma} \end{pmatrix}$ é um pseudo-spinor de Nambu, e a componente $a_{\mathbf{q}\sigma}(b_{\mathbf{q}\sigma})$ corresponde à amplitude de probabilidade de um elétron ocupar um átomo na sub-rede $\mathbf{A}(\mathbf{B})$ com spin verdadeiro σ e momento $\mathbf{q}$ em relação ao vetor $\mathbf{K}$, ou seja, o vetor de onda total será dado por $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$.

Pode-se diagonalizar a matriz que aparece na eq.2.16 e encontram-se os seguintes autovalores de energia

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| = \pm \hbar v_F \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \quad (2.17)$$

O aspecto mais relevante da energia de dispersão do grafeno é a relação linear que se estabelece entre energia e momento com a banda de valência passando pelo ponto $\mathbf{q} = 0$, sem apresentar gap de energia entre a banda de valência e de condução. O grafeno é, portanto, um semiconductor sem gap de energia na banda e com dispersão linear, ao invés de quadrática como em heteroestruturas convencionais. A existência de dois pontos de Dirac, $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$, onde os cones de Dirac para elétrons e buracos se tocam, no espaço de momento, origina uma degenerescência de *valley*, $g_\nu = 2$ para o grafeno. Além disso, qualquer espalhamento *intervalleys* entre os

pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ eleva a degenerescência do *valley*, mas esses efeitos requerem a presença de uma dispersão forte na escala da rede. A dispersão *intervalley* é geralmente fraca e, quando pode ser ignorada, a presença de um segundo vale pode ser considerada simplesmente pelo fator de degenerescência $g_\nu = 2$.

A relação de dispersão linear do grafeno $E_\pm(\mathbf{q} = \hbar v_F \mathbf{q})$ depende explicitamente da constante v_F . Como vimos, pela abordagem *tight-binding*, eq.2.15, a constante $(3at)/2$ tem unidades da constante de Planck vezes velocidade e pode ser expressa na forma $\hbar v_F$, onde v_F é a velocidade de Fermi para esse caso. O nível de Fermi passa exatamente pelo ponto $\mathbf{K}$, onde a função foi expandida. A velocidade de Fermi fará o papel da velocidade da luz no vácuo, para partículas relativísticas. Recorrendo aos valores das constantes do grafeno, $t = 2.8\text{eV}$, $a = 1.42\text{\AA}$ e $\hbar = 6.59 \times 10^{-16}\text{eV.s}$, pode-se obter a velocidade de Fermi, $v_F = 9 \times 10^5 \approx 10^6\text{m/s}$. Esse valor corresponde a aproximadamente $1/300$ da velocidade da luz no vácuo, e é uma das características mais distintas do grafeno, aliada a sua estrutura verdadeiramente bidimensional.

Esse tipo de dispersão linear entre momento e energia, que em duas dimensões resulta em um duplo cone, corresponde ao caso de partículas relativísticas sem massa. Portanto, surge um efeito que emerge da simetria de sub-rede do grafeno: os elétrons próximos aos pontos de Dirac, comportam-se efetivamente como férmions de Dirac sem massa, mas o papel da velocidade da luz é assumido pela velocidade de Fermi v_F .

A fim de demonstrar a emergência do comportamento relativístico dos férmions de Dirac sem massa, consideram-se as matrizes de Pauli para um pseudo-spin

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

que permite escrever a eq.2.16 na forma

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} \psi_{\mathbf{q}\sigma} \quad (2.19)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ e $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} = \sigma_x q_x + \sigma_y q_y$. E, apelando para um truque envolvendo a função delta de Kronecker, a saber: veja que $\sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} F_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}$ para quaisquer funções $F_{\mathbf{q}}$ e $G_{\mathbf{q}}$ e, além disso, podemos utilizar a definição da função delta Kronecker. Fazendo isso, a eq.2.19 toma a seguinte forma

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}' \psi_{\mathbf{q}'\sigma} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$$

$$= \hbar v_F \frac{1}{N} \sum_j \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \sigma \cdot \mathbf{q}' \psi_{\mathbf{q}'\sigma} e^{-(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_j} \quad (2.20)$$

Em seguida, leva-se o somatório sobre j ao limite do contínuo, lembrando que $\psi_\sigma(\mathbf{r}_j) = \sum_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$ e que o termo $\sigma \cdot \mathbf{q}'$ pode ser obtido fazendo a substituição $\mathbf{q}' = -i\nabla$, onde ∇ opera sobre as variáveis $\mathbf{r}$ no espaço real. O resultado final obtido tem a forma

$$\hat{H} = i\hbar v_F \sum_{\sigma} \int d^2r \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \sigma \cdot \nabla \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

Destaca-se que $-i\hbar\nabla$ é o operador momento $\mathbf{p}$ da mecânica quântica e as matrizes σ_x e σ_y fazem o papel das matrizes α de Dirac, dando origem a uma teoria de Dirac para partículas sem massa.

Observando-se que a eq.2.21 tem a forma de um valor médio da mecânica quântica, assumindo que ψ é uma função de onda clássica, onde o operador em questão é o hamiltoniano de Dirac em duas dimensões espaciais, para uma partícula relativística sem massa, ou seja, $\hat{H}_D = -i\hbar v_F \sigma \cdot \nabla$. A função de onda $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo com esse hamiltoniano, ou seja,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\sigma}}{\partial t} = \hat{H}_D \psi_{\sigma} = -i\hbar v_F \sigma \cdot \nabla \psi_{\sigma} \quad (2.22)$$

a função de onda ψ_{σ} nos pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ são relacionadas por simetria de reversão temporal: se colocarmos a origem do sistema de coordenadas do espaço de momento em um ponto $\mathbf{M}$ entre os pontos $\mathbf{K}$'s da zona de Brillouin, então a reversão temporal torna-se equivalente à reflexão ao longo do eixo k_x , ou seja, $(k_x, k_y) \rightarrow (k_x, -k_y)$.

Uma quantidade relevante usada para caracterizar as autofunções é a sua helicidade, cuja qual é definida como sendo a projecção do operador momento ao longo da direção do (pseudo)spin. O operador quântico para a helicidade tem a forma:

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \sigma \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (2.23)$$

Fica claro dessa definição que tanto a função $\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ quanto $\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ são autofunções de $\hat{h}$:

$$\hat{h} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \pm \frac{1}{2} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \quad (2.24)$$

Portanto, os elétrons (buracos) tem uma helicidade positiva (negativa). E, a Eq.(2.24) implica que σ tem seus dois autovalores tanto na direção do ($\uparrow$) ou contrária ao ($\downarrow$) momento. Essa propriedade, em síntese, diz que próximo aos pontos de Dirac os estados têm uma helicidade ou *quiralidade* bem definida. Vale ressaltar que a quiralidade não está definida em relação ao spin real do elétron, mas sim devido a uma variável de pseudo-spin associado com duas componentes da função de onda.

O mapa da estrutura eletrônica do grafeno em termos da teoria de Dirac é tão forte quanto a energia de dispersão linear do mesmo. A existência de duas sub-redes equivalentes e independentes leva a existência de uma surpreendente dinâmica quiral no grafeno. As duas ramificações lineares da energia de dispersão do grafeno se interseccionam nos pontos de Dirac e tornam-se independentes uma das outras, indicando a existência de número quântico de pseudospin análogo ao spin eletrônico, mas completamente independente do spin real. Portanto, portadores no grafeno carregam um índice emergente em adição ao índice de orbital e de spin. A existência do número quântico de pseudospin quiral é um produto natural da estrutura de rede do tipo favo de mel do grafeno, compreendendo as duas sub-redes independentes.

2.3 Grafeno versus Estruturas Semicondutoras 2D

Neste capítulo, apresentamos dois tipos de estruturas bidimensionais, a primeira consistindo em uma heteroestrutura, GaAs-AlGaAs, e a segunda, o grafeno, a promessa para o transporte bidimensional. Contudo, surge a pergunta: qual a real diferença entre tais estruturas e por que estudar o grafeno é tão relevante mesmo diante do desenvolvimento de décadas no entendimento de tais heteroestruturas?

Existem, falando de forma geral, quatro diferenças qualitativas entre o grafeno e um sistema semicondutor bidimensional. Essas diferenças são suficientemente importantes para enfatizar a diferença entre os dois sistemas: primeiramente, semicondutores 2D são sistemas tipicamente com gaps grandes ($> 1\text{eV}$) entre as bandas, desse modo, o transporte de elétrons e o de buracos devem ser estudados usando sistemas completamente diferentes. De maneira contrária, como vimos anteriormente, não existe gap entre a banda de condução e a banda de valência no espectro do grafeno, portanto um semicondutor sem gap onde a natureza dos portadores muda nos pontos de Dirac de elétrons para buracos (ou vice-versa), tudo em uma única estrutura. Um corolário direto dessa ausência de gap no grafeno é a sua natureza sempre metálica, onde o potencial químico (Nível de Fermi) está sempre na banda de condução ou de valência. Em contrapartida,

heteroestruturas bidimensionais se tornam isolantes abaixo de uma voltagem limite, e o nível de Fermi é no meio do gap da banda [25].

Ademais, pode-se desatacar, mais uma vez, que o grafeno é um sistema quirial, enquanto semicondutores bidimensionais usuais são não-quirais. Quiralidade no grafeno leva a uma importante consequência no que se refere ao transporte, como discutiremos na parte de resultados. Outra diferença importante entre esses dois materiais é que a energia de dispersão do grafeno é linear, enquanto a de semicondutores é quadrática. Fato este que origina propriedades de transporte relativísticas exóticas e não-triviais no grafeno.

Finalmente, os portadores de carga confinados no grafeno estão, idealmente, em uma estrutura bidimensional, pois uma camada de grafeno tem precisamente a espessura de um átomo. Para estruturas semicondutores 2D, a dinâmica quântica é bidimensional em virtude do confinamento induzido por um campo magnético externo. Sendo assim, semicondutores 2D são sistemas “quase-bidimensionais” e sempre apresentam uma espessura média na terceira dimensão, $\langle z \rangle (\approx 5 - 50 nm)$, com $\langle z \rangle \leq \lambda_F$, onde λ_F é o comprimento de onda de Fermi. A condição $\langle z \rangle < \lambda_F$ define um sistema eletrônico bidimensional.

A energia de dispersão de um semicondutor 2D é dada pela Eq.(2.5), onde $E_{n,z}$ é a energia de confinamento quântico. Se mais de um nível quântico é ocupado por portadores, o sistema não é mais, estritamente falando, bidimensional, portanto, um semicondutor 2D deixa de ser bidimensional quando a densidade de portadores é alta o suficiente para ocupar sub-bandas [25].

2.4 Experimento Relevante

Existem muitos experimentos relacionados aos fenômenos que envolvem a simetria quirial. Nesta seção, discutiremos o experimento pioneiro que mede a quiralidade no grafeno: K. S. Novoselov et. al *Tuning the valley and chiral quantum state of Dirac electrons in van der Waals heterostructures*; Science 353, 575 (2016). [78]

A quiralidade é uma propriedade fundamental dos elétrons com o espectro relativístico encontrado no grafeno e nos isolantes topológicos. Ela desempenha um papel crucial nos fenômenos relativísticos, como o tunelamento de Klein, contudo, sua visualização direta é altamente complexa. Novoselov *et al.* relataram a observação direta e a manipulação da quiralidade e polarização do pseudospin no tunelamento de elétrons entre dois cristais de grafeno quase perfeitamente

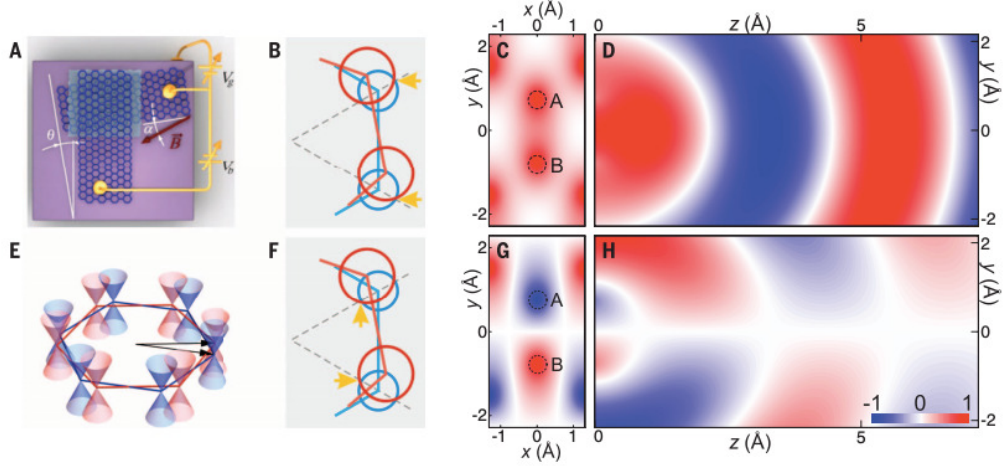


Figura 2.4 (A) Esquema diagramático do dispositivo formado de Si/ SiO_2 /Gr/hBN/Gr (as camadas hexagonais em azul escuro são eletrodos de grafeno; azul claro, hBN; roxo, terminal posterior Si/ SiO_2). A tensão V_g é aplicada entre o grafeno inferior e o substrato de Si. Figura retirada da Ref.([78])

alinhados. Utilizando um forte campo magnético no plano como uma ferramenta para resolver as contribuições dos estados eletrônicos quirais que possuem uma diferença de fase entre duas componentes de sua função de onda vetorial. Neste experimento, não apenas os autores lançam luz sobre a quiralidade, mas também demonstram uma técnica para preparar o grafeno. O dispositivo estudado, Fig.(2.4),

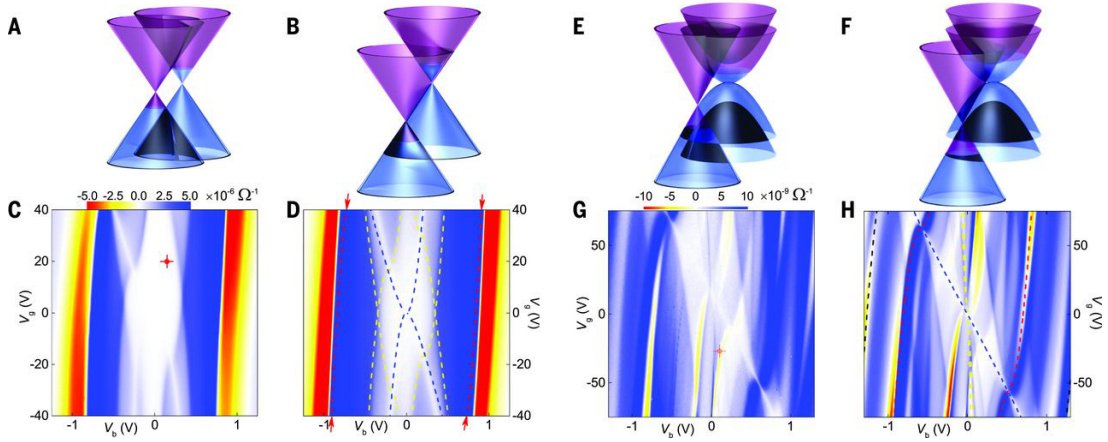


Figura 2.5 (A e B) Posição relativa das bandas e dos níveis de Fermi nos dois eletrodos de grafeno rotacionados em um pequeno ângulo em relação um ao outro para condições destacadas pelas linhas tracejadas. Figura retirada da Ref.([78]).

foi formado por Si/ SiO_2 /Gr/hBN/Gr (as camadas hexagonais em azul escuro são eletrodos de grafeno; azul claro, hBN; roxo, terminal posterior Si/ SiO_2). Uma

tensão V_g foi aplicada entre o grafeno inferior e o substrato de Si. Na Fig.(2.4B) mostra dois cones da zona de Brillouin (ZN) demonstrando esquematicamente as superfícies de Fermi para emissor (círculos azuis) e coletor (círculos vermelhos). As setas amarelas marcam os estados no emissor quando as componentes da função de onda nas duas sub-redes estão na fase (mostrada em (C)). Na Fig.(2.4C), a distribuição no espaço real da parte real da função de onda nas sub-redes A e B. Os dois componentes da função de onda estão em fase. Na Fig.(2.4D), está representado esquematicamente o padrão de interferência da função de onda de duas componentes do elétron na distância especificada acima da camada de grafeno quando o elétron é retirado do mesmo. O estado original do elétron em $z = 0$ é como em (C). (E) mostra que o desalinhamento rotacional de ângulo entre os dois cristais de grafeno leva a uma pequena diferença de momento entre as duas estruturas de banda no espaço recíproco. As setas amarelas marcam os estados no emissor quando as componentes da função de onda nas duas sub-redes estão fora de fase (mostrado em (G)). (G) Distribuição no espaço real da parte real da função de onda nas sub-redes A e B. Os dois componentes da função de onda estão fora de fase.

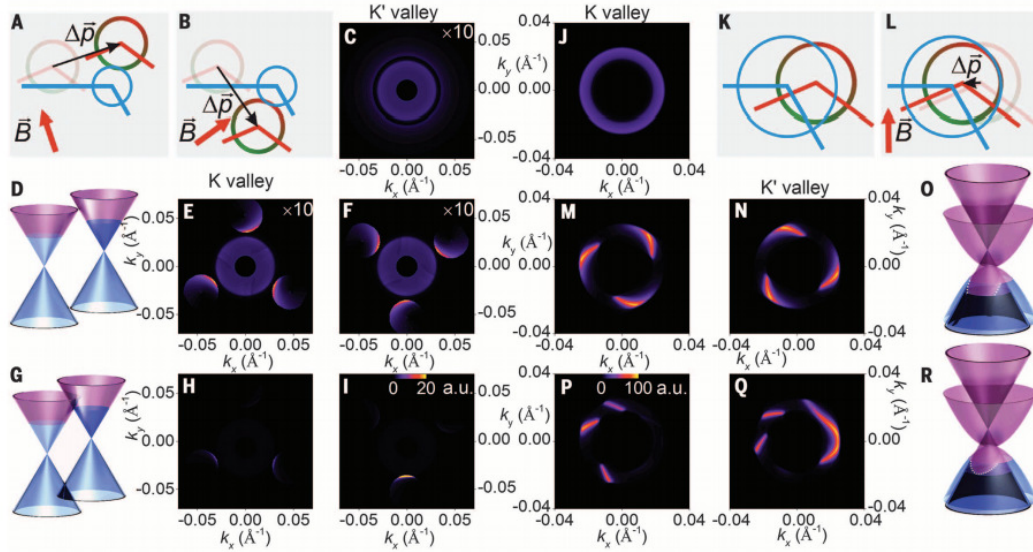


Figura 2.6 Representação esquemática de uma condição ressonante para tunelamento entre dois eletrodos de grafeno em um campo magnético. A coloração gradiente da superfície de Fermi no coletor representa uma diferença de fase específica ϕ entre os componentes da função de onda (verde: $\phi = \pi$; vermelho: $\phi = 0$). Figura retirada da Ref.([78])

2.5 Conclusão

Uma palavra capaz de sintetizar os objetivos da física mesoscópica é controle: controle para investigar a dinâmica de partículas ao nível quântico. Para atingir tal objetivo, uma das direções mais importantes da pesquisa na área foi o desenvolvimento de técnicas experimentais para a produção de heteroestruturas semicondutoras, ou também conhecidas como pontos quânticos. Esses pontos quânticos podem ter diferentes tamanhos e formas, por exemplo. Sendo assim, surge naturalmente a pergunta de como as características do ponto quântico afetam os observáveis de transporte: será que a geometria afeta a condutância? De que forma as simetrias fundamentais deixam sua impressão digital?

Em particular, após estudar o grafeno percebemos propriedades eletrônicas genuinamente exóticas devido a novos graus de liberdade gerados pela simetria quiral/sub-rede. Dentro desse cenário, como seria um ponto quântico de grafeno e como suas simetrias adicionais afetariam o transporte?

A característica marcante do grafeno é o seu espectro de energia, a saber, a existência dos pontos de Dirac, que torna a densidade local dos portadores de carga muito sensível aos campos elétricos. Surge, dessa forma, a possibilidade de criar estados localizados perto da energia zero do hamiltoniano de Dirac bidimensional. A existência de estados ligados em um poço quântico é uma das características básicas dos sistemas descritos pela equação de Schrödinger. A situação difere para a equação de Dirac, pois partículas relativísticas quirais podem penetrar por barreiras de potencial altas e amplas. Essa penetração ideal significa que não se pode transferir automaticamente a técnica de fabricação de pontos quânticos usando o confinamento através de duas barreiras. Surpreendentemente, no grafeno é suficiente criar uma barreira única, o que pode ser até simples do ponto de vista experimental. Os estados quase-circulares existem na barreira potencial, cujas inclinações esquerda e direita funcionam como as “barreiras de tunelamento” para os elétrons relativísticos. A largura dos níveis de energia desses estados quase limitados diminui exponencialmente com a largura da barreira e pode ser muito pequena. Além disso, a existência dos estados quasibound (ressonâncias) é independente da maneira como as ondas de elétrons se espalham na borda da faixa de grafeno (condições de contorno). No entanto, as posições e as larguras das ressonâncias individuais e, especialmente, o valor da condutância de fundo entre as ressonâncias dependem do tipo de limite.

Em suma, pontos quânticos de grafeno podem gerar efeitos surpreendentes nos observáveis de transporte e permitem aplicações tecnológicas audaciosas, como a construção de um computador quântico. Sendo assim, nos próximos capítulos nos comprometeremos a entender como as simetrias adicionais do grafeno afetam o

transporte eletrônico.

Transporte Quântico

Neste capítulo, apresentaremos a teoria do transporte eletrônico, clássico e quântico. Se aspira traçar um panorama de seu estado da arte na literatura. Embora objetivemos descrever o fenômeno em múltiplos aspectos, esta tarefa se torna inviável dada a vasta quantidade de estudos que tratam direta-ou indiretamente do assunto. Neste sentido, nos limitaremos a reportar os resultados centrais para a área de física mesoscópica. Na seção 2.1 é discutido o transporte no regime clássico, em particular quando as teorias clássicas começam a falhar. A seção 2.2 apresenta um modelo de potencial duplo para representar a importância da fase quântica. Finalmente, é apresentada uma dedução explícita da fórmula de Landauer-Büttiker utilizando o formalismo de espalhamento (seção 2.3).

3.1 O transporte clássico

Em física da matéria condensada, a mecânica quântica é crucial para se entender a estrutura da matéria. Entretanto, muito geralmente, o movimento de elétrons em metais e semicondutores sujeitos a um campo externo pode ser descrito por uma teoria de transporte clássico. Particularmente, em condutores macroscópicos as propriedades de transporte são obtidas a partir da observação da resposta do sistema ao estímulo externo [10]. Geralmente, a relação entre o estímulo e a resposta é linear e, a razão entre essas duas quantidades (estímulo/resposta), fornece informações sobre o sistema. Para exemplificar, materiais metálicos macroscópicos apresentam uma relação linear entre a corrente e a voltagem conhecida como *Lei de Ohm*,

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (3.1)$$

onde W é a área da seção transversal do condutor e L o seu comprimento. A resistência depende da condutividade σ (resistividade ρ , com $\sigma = \rho^{-1}$) intrínseca do material e da geometria do condutor (L e W). Nos metais, a origem da resistência se deve aos processos de espalhamento inelásticos (defeitos, impurezas, temperatura). A resistência é um observável estatístico macroscópico, visto que muitos elétrons estão envolvidos no processo de condução. Mais precisamente, do

ponto de vista estatístico, a resistência é um valor médio ou média da razão entre as medidas da corrente e da voltagem. Intrinsecamente haverá flutuações ao redor do valor médio da resistência medida em função do tempo, usualmente chamadas de ruído em eletrônica.

O conceito de flutuação está matematicamente associado à variância e elas são responsáveis por limitar a precisão de medidas experimentais. Contudo, em algumas situações, essas flutuações carregam informações adicionais acerca da dinâmica do transporte dos portadores de carga, como discutido no Cap.5.

Destaca-se também que não é o número de elétrons ou o tamanho do condutor que torna o comportamento do sistema clássico [33]. Na verdade, a teoria de transporte clássico falha completamente quando o condutor é resfriado até uma temperatura absoluta próxima a zero. Congelar o sistema significa diminuir as colisões inelásticas dos elétrons com outros graus de liberdade e, a ausência de colisões inelásticas faz com que a coerência de fase seja mantida e dessa coerência emergem efeitos quânticos observáveis.

Sistemas mesoscópicos são tais que suas escalas de comprimento residem entre o microscópico e o macroscópico. Eles contêm muitos elétrons, da ordem de 10^{19} . Entretanto, suas propriedades não podem ser obtidas usando o limite termodinâmico (volume e número de partículas tendendo ao infinito). Dos estudos do transporte através de condutores mesoscópicos, constatou-se que a Lei de Ohm, Eq.(3.1), falha quando as dimensões dos sistemas tornam-se pequenas comparáveis com as seguintes escalas de comprimento características [9]:

1. Comprimento de onda de Fermi, λ_F : menor escala de comprimento. Varia de alguns angstroms em metais a centenas de angstroms em heteroestruturas semicondutoras;
2. Caminho livre médio para espalhamento elástico, l_e : caracteriza a desordem do sistema e se relaciona com o tempo de espalhamento elástico, τ_e , por $l_e = v_F \tau_e$, onde v_F é a velocidade de Fermi. Em metais desordenados, l_e varia de algumas centenas de angstroms, em materiais policristalinos, a alguns angstroms, em ligas amorfas. Por outro lado, em heteroestruturas de GaAs-GaAlGa, l_e é da ordem de $10\mu m$;
3. Comprimento de coerência de fase, L_ϕ : comprimento característico para a interferência de funções de onda eletrônicas. L_ϕ aumenta com o decréscimo da temperatura e pode ser muito maior que l_e . É a escala de comprimento relevante em física mesoscópica;
4. Comprimento de localização, ξ : escala de comprimento importante relacio-

nada com a desordem. No regime metálico as funções de ondas correspondentes a auto-energias próximas à energia de Fermi são estendidas sobre a amostra, mas no regime isolante a função de onda torna-se localizada e decai exponencialmente a partir de um ponto r_0 , denominado centro de localização. Dependendo do grau de desordem, o sistema pode se comportar como um condutor ou isolante;

À medida que o comprimento de coerência de fase se torna maior que o tamanho do sistema condutor, ele não mais pode ser descrito por constantes materiais, a exemplo da condutividade presente na Lei de Ohm, Eq.(3.1).

Consideremos o seguinte experimento idealizado [33]: Uma corrente elétrica, I , passando por um fio metálico de seção transversal W e comprimento L . A medição do potencial, U , ao longo do fio leva a condutância $G(L, W) = I/U$. Uma corrente de 1A corresponde à passagem de 10^{19} elétrons por segundo através da seção de um fio condutor. Em um metal como o cobre, um elétron (elétron de valência) está muito fracamente ligado ao resto do átomo e fica deslocalizado na rede cristalina, isto deu origem à ideia de “elétrons livres” como portadores de carga na corrente de condução metálica. Também para o cobre, o número de elétrons livres é de aproximadamente 8.5×10^{28} , logo, o número de portadores nesse caso é da mesma ordem que números típicos da teoria cinética dos gases. Sendo assim, grandezas macroscópicas, como corrente e condutividade, são obtidas por métodos estatísticos, a partir de valores médios de grandes microscópicas.

Nesse contexto, em 1900, Drude propôs seu modelo para o gás de elétrons livres contidos em um “recipiente”, este sendo feito de um material condutor. As principais hipóteses do então modelo eram: (a) Entre colisões, o movimento do elétron é livre e independente; (b) As colisões são *instantâneas* e randomizantes, ou seja, as velocidades antes e depois da colisão são descorrelacionadas; (c) O tempo médio entre colisões é um parâmetro fenomenológico τ ; (d) Os elétrons estão em equilíbrio térmico com o material. Após cada colisão, o elétron emergente com velocidade aleatória em direção e intensidade apropriada à temperatura local. O excesso de energia gerada é dissipada nas colisões [10].

Sendo assim, ao considerar tais hipóteses no sistema em questão, tem-se que a condutividade é igual à condutividade clássica de Drude:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (3.2)$$

Vale ressaltar que, das hipóteses de Drude, foi possível deduzir uma expressão para a condutividade que considera parâmetros microscópicos. Contudo, nesta dedução também se considerou a Lei de Ohm e desse fato emerge a questão: O

quão pequenas podem ser as dimensões (W e/ou L) do material antes da lei de Ohm deixar de ser válida?

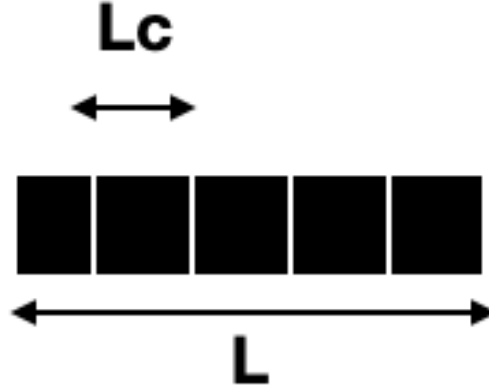


Figura 3.1 Fio desordenado de comprimento L dividido em comprimentos que suportam correlação, L_c .

Se $L \leq L_\phi$, a fase não relaxa e o sistema carrega correlações ao longo de toda sua extensão. Seja L_c o comprimento de correlação de um fio desordenado, então, tendo o fio em questão comprimento L , ele pode ser dividido em pequenos comprimentos que suportam correlação, de tal forma que $N = L/L_c$ é o número de blocos não correlacionados, Fig.(3.1). Sendo a resistência total do fio a soma da resistência de cada parte L_c [34], tem-se:

$$R = \sum_{i=1}^N R_i, \langle R_i \rangle = \rho L_c$$

$$\langle R \rangle = N \rho L_c = \rho L \text{ (Lei de Ohm)} \quad (3.3)$$

e definindo $\text{var}(R_i) = r^2$ conclui-se que $\text{var}(R) = N \text{var}(R_i) = N r^2$.

Prova:

$$\begin{aligned}
var(R) &= \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2 \\
&= \left\langle \left(\sum_{i=1}^N R_i \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N R_i \right\rangle^2 \\
&= \left\langle \sum_{i=1}^N R_i^2 + \sum_{i \neq j=1}^N R_i R_j \right\rangle - \sum_{i=1}^N \langle R_i \rangle^2 - \sum_{i=1}^N \langle R_i \rangle \langle R_j \rangle \\
&= \left(\left\langle \sum_{i=1}^N R_i^2 \right\rangle - \sum_{i=1}^N \langle R_i \rangle^2 \right) + \left(\sum_{i \neq j} \langle R_i R_j \rangle - \sum_{i \neq j} \langle R_i \rangle \langle R_j \rangle \right) \quad (3.4)
\end{aligned}$$

onde o último termo entre parênteses da Eq.(3.4) cancela por se tratar da correlação e a escala de L_c não suporta correlações. Por fim,

$$\begin{aligned}
var(R) &= \sum_{i=1}^N \left(\langle R_i^2 \rangle - \langle R_i \rangle^2 \right) \\
&= N var(R_i) \text{ c.q.d} \quad (3.5)
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\delta R = \sqrt{var(R)} = r\sqrt{N} \quad (3.6)$$

onde $R = \langle R \rangle \pm \delta R$, sendo assim, usando a Eq.(3.3) na Eq.(3.6), tem-se:

$$\frac{\delta R}{\langle R \rangle} = \frac{r\sqrt{N}}{N\rho L_c} \approx N^{-1/2} = \left(\frac{L_c}{L} \right)^{-1/2} \longrightarrow 0 (L \gg L_c) \quad (3.7)$$

Percebe-se, desse modo, que surgem novos efeitos devido à coerência de fase entre os elétrons, não observados nas medições de coeficientes de transporte em condutores macroscópicos. A grandeza física que quantifica a coerência de fase é denominada propagador [33].

O propagador é um objeto quântico que descreve a amplitude de probabilidade de um único elétron se propagar de um ponto $\mathbf{r}$ para outro ponto $\mathbf{r}'$ no tempo t . Essa amplitude, $A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$, é a superposição de todas as amplitudes relacionadas a cada caminho $\mathbf{p}$ conectando os dois pontos, tal que $\mathbf{p}(0) = \mathbf{r}$ e $\mathbf{p}(t) = \mathbf{r}'$. A mesma pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \sum_{\mathbf{p}} c \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{p}] \right) \quad (3.8)$$

onde a ação clássica $S[\mathbf{p}]$ do caminho $\mathbf{p}$ aparece como um fator de fase e c como uma constante de normalização. Devido à pequenez do quantum de ação, $\hbar$,

pequenas mudanças no caminho e, portanto, na ação clássica $S[\mathbf{p}]$, tipicamente levam a fortes oscilações. Como consequência dessas oscilações, vários termos se cancelam na soma da Eq.(3.8). Entretanto, para os caminhos que são soluções da equação de movimento clássica,

$$\delta S|_{\mathbf{p}} = 0 \quad (3.9)$$

a ação é estacionária. Desse modo, os caminhos clássicos são dominantes na soma, mas restam efeitos não clássicos devido a flutuações no fator de fase. Contanto que o elétron sofra apenas colisões elásticas, o propagador seleciona fases definidas ao longo de cada caminho que contribui para ele. Segundo o princípio da superposição quântica, as amplitudes de todos os caminhos precisam ser somadas coerentemente antes de se assumir o valor quadrado absoluto, probabilidade de transição,

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \left| \sum_{\mathbf{p}} c \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{p}] \right) \right|^2. \quad (3.10)$$

Se, por outro lado, os elétrons experienciam colisões inelásticas ou acoplamento com muitos outros graus de liberdade dinâmicos, a coerência é destruída e a probabilidade fica igual a de uma soma de amplitudes incoerentes ao quadrado.

A questão central, dado que destacamos a importância do propagador e da coerência de fase na caracterização dos efeitos quânticos no transporte eletrônico, é saber como surge tal fase, como ela influencia nos observáveis de transporte e de quais parâmetros depende a mesma.

3.2 Matriz de Transferência e Tunelamento Ressonante

Nesta seção, apresentaremos e discutiremos um método matemático para a análise da propagação de ondas em sistemas unidimensionais. Tal é comumente conhecido como método da matriz de transferência.

A matriz de transferência permite estudar propriedades das amostras através de experimentos de espalhamento. Longe da amostra, incide-se uma onda plana com um determinado vetor de onda q e mede-se como essa onda é transmitida através do potencial. Obviamente, o coeficiente de transmissão T e de reflexão R são funções de q . Assim, faz-se possível descobrir as propriedades do sistema a partir da sua resposta ao espalhamento.

Consideremos uma região compacta do espaço com um potencial arbitrário com forma desconhecida. Nesse ponto espacial, há o colapso da informação quântica,

3.2. MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA E TUNELAMENTO RESSONANTE 11

ou seja, por métodos reducionistas não é possível obter informações úteis sobre o sistema, apenas uma investigação que considere o todo revela aspectos relevantes acerca da interação das ondas incidentes com o potencial.

A matriz de transferência (M), detentora da informação quântica, relaciona o lado esquerdo do potencial com o lado direito da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} A_R \\ B_R \end{pmatrix} = M(E) \begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix}, \quad M(E) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Considerando a simetria de reversão temporal e a conservação de carga, tem-se que M é uni modular. Dado isto, depois de alguma álgebra, encontram-se os coeficientes de reflexão e transmissão em função das entradas da matriz M ,

$$R = |m_{21}/m_{22}|^2, T = |1/m_{22}|^2 \quad (3.12)$$

Na situação especial para uma auto-energia específica do potencial $V(x)$ onde $m_{11}(E) = 1 \Leftrightarrow m_{12}(E) = 0$, a onda é totalmente transmitida com mudança de fase, essa situação caracteriza uma condição de ressonância.

O comportamento dual de um objeto quântico, ora se comportando como onda, ora como partícula, está no cerne da explicação de diversos efeitos quânticos. Em particular, o fato de partículas quântica apresentarem um comportamento ondulatório faz surgir a “interferência quântica”, isto é, a superposição de ondas de probabilidade incidentes, refletidas e transmitidas, em analogia com o eletromagnetismo clássico, leva a uma interferência construtiva ou destrutiva. Tal superposição de estados é o que leva a quantização do momento e da energia em sistemas de baixa dimensionalidade, por exemplo. Contudo, queremos investigar como essa propriedade afeta o transporte eletrônico. Para tal iniciaremos a discussão de como o comportamento ondulatório afeta o transporte eletrônico em nanoestruturas com um efeito particular, o tunelamento ressonante.

Talvez o fenômeno de transporte mais extensivamente estudado seja o tunelamento de partículas massivas, o qual é uma manifestação da natureza ondulatória da matéria. Em geral, o termo “tunelamento” refere-se ao transporte de partículas através de uma região proibida classicamente. Na mecânica clássica, uma partícula é completamente refletida nos chamados pontos de retorno, isto é, pontos onde a energia total é igual à energia potencial. Quanticamente, a equação subjacente ao movimento é a equação de Schrödinger, na qual o papel do potencial é análogo no eletromagnetismo ao da permissividade especial variável. No eletromagnetismo, a solução da equação de onda deve satisfazer certas condições de contorno na interface abrupta entre dois dielétricos de permissividade diferente, levando a uma certa porção de uma onda incidente sendo transmitida e uma certa porção refletida. Da mesma forma, na mecânica quântica, a função de onda e sua derivada normal

devem ser contínuas através de um limite de duas regiões de energia potencial diferente, levando à reflexão e transmissão de ondas de probabilidade no limite.

A descoberta de materiais radioativos por Marie Curie no final do século XIX foi o embrião da teoria de tunelamento quântico. Esses materiais possuem taxas características. Em 1928, George Gamow compreendeu a desintegração alfa em termos da “perfuração quântica” da barreira de potencial coulombiano pela função de onda da partícula alfa dentro do núcleo para o exterior. Gamow resolveu o potencial modelo para o núcleo e disso derivou a relação entre a meia-vida da partícula e a energia de emissão de radiação. Logo depois, esses dois grupos já começaram a se perguntar se seria possível a partícula tunelar também para dentro do núcleo. Na verdade, um ano antes dos trabalhos de Gamow com decaimento alfa, em 1927, um físico alemão chamado Friedrich Hund já havia notado a possibilidade do que ele chamava de “penetração de barreira” no cálculo do desdobramento da energia fundamental num poço potencial duplo. Esse fenômeno aparece, por exemplo, nas transições de “inversão” da molécula de amônia. No mesmo ano, Lothar Nordheim usou a equação de Schrödinger no cálculo do coeficiente de reflexão de um elétron incidindo sobre vários tipos de interface e notou que, mesmo que tenha energia insuficiente para vencer a barreira classicamente, ele ainda poderia atravessá-la.

3.2.1 Potencial Duplo

Nesse sentido, considere o problema envolvendo uma barreira de potencial que é padrão e demonstra claramente o efeito de tunelamento quântico. Este problema, ao nível teórico, consiste em resolver a equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo para uma partícula que encontra uma barreira de energia potencial retangular. Geralmente supõe-se, como aqui, que uma partícula livre colide com a barreira da esquerda.

Embora classicamente uma partícula se comportando como uma massa pontual seria refletida, uma partícula realmente se comportando como uma onda de matéria tem uma probabilidade diferente de zero de penetrar na barreira e continua seu passeio como uma onda do outro lado. A probabilidade de a partícula passar através da barreira é dada pelo coeficiente de transmissão, enquanto a probabilidade de que ela seja refletida é dada pelo coeficiente de reflexão.

Considere uma barreira de potencial de altura V_0 no intervalo $x \in [0, a]$, ou

3.2. MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA E TUNELAMENTO RESSONANTE 3

seja,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ V_0, & \text{se } 0 < x < a \\ 0, & \text{se } a < x \end{cases} \quad (3.13)$$

Resolvendo a equação de Schrödinger para esse potencial, obtém-se o coeficiente (probabilidade) de tunelamento:

$$T = T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \sqrt{2m(V_0 - E)a^2/\hbar^2}} \quad (3.14)$$

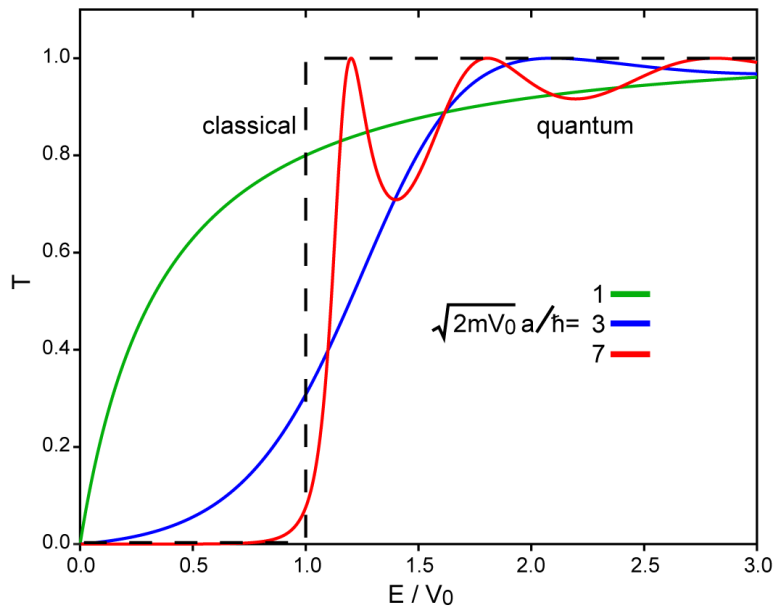


Figura 3.2 Gráfico que representa a probabilidade de transmissão através de uma barreira de potencial finita para $\sqrt{2mV_0}a/\hbar=1,3$ e 7. A linha pontilhada representa o resultado clássico e as linhas sólidas representam o resultado previsto pela mecânica quântica. Figura retirada da Ref.[35]

Diante desse resultado, infere-se que $T(E) = 1$ para $E > V_0$ quando $E_n - V_0 = n^2 \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$, $n = 1, 2, \dots$, ou seja, quando as funções de onda se ajustam às bordas da barreira, surge uma ressonância. Para o caso em que $E < V_0$, surpreendentemente, existe uma probabilidade diferente de zero da partícula ser transmitida, resultado este que substancialmente diferente do caso clássico. A transmissão é exponencialmente suprimida a medida que a largura da barreira aumenta, o que coincide com o resultado do modelo de Gamow e com o resultado semiclássico.

3.2.2 Barreira Dupla e Tunelamento Ressonante

Um experimento envolvendo uma barreira gera ressonâncias, como vimos anteriormente. Contudo, tais ressonâncias são triviais, já que ocorrem em uma configuração praticamente transparente (semiclássica). Uma realização muito mais interessante ocorre para o problema de duas barreiras, pois este é o caso mais simples que demonstra os efeitos de interferência quântica.

Neste caso o coeficiente de transmissão da barreira dupla fica:

$$T^{(Tot)} = \frac{T^2}{|1 + Re^{-2i(\phi_t + qa + qW)}|^2}, \quad (3.15)$$

onde $q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e W é a distância entre as barreiras. O termo de transmissão T representa uma taxa de quantos elétrons que incidem no sistema vão conseguir atravessá-lo. Percebe-se, nesse caso, a emergência de uma lógica não-ortodoxa, dado que a probabilidade de transmissão do elétron que interage com um sistema formado por duas barreiras idênticas em série, Eq.(3.15), difere do quadrado da probabilidade de transmissão através de um sistema formado por uma única barreira, Eq.(3.14).

Nesse problema da barreira dupla também é possível notar o surgimento de uma fase no termo de transmissão e quando essa fase for $-\pi$, tem-se $T^T = T^2/T^2 = 1$. Sendo assim, a condição de tunelamento ressonante fica

$$\cos \phi_t + qa + qW = 0. \quad (3.16)$$

De onde se observa que a condição de tunelamento para barreiras longas equivale exatamente à condição de quantização das energias para o poço de largura W , e, a condição de quantização do tunelamento ressonante é mantida pelos autovalores de energia do poço. Sendo assim, uma grande lição é que atingir as condições de ressonância equivale a encontrar os estados ligados que, levam ao conhecimento das energias,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (3.17)$$

e, das energias é possível saber a configuração do espaço dos momentos, que leva, finalmente, através da aplicação de uma transformada de Fourier, ao espaço de configurações.

Para o caso de duas barreiras geometricamente iguais (simétricas), na condição de ressonância, a transmissão através das mesmas é a unidade, ainda que a transparência de uma barreira individual seja exponencialmente menor. A razão física desse resultado é a interferência quântica (IQ). A manifestação da IQ se dá

por meio da fase, ela detém a informação sobre a probabilidade de transmissão da partícula e manifesta o caráter ondulatório da matéria. Outro atributo relevante da fase, em especial para este trabalho, é o fato de a mesma depender da geometria das barreiras.

O ponto central do resultado exposto na Eq.(3.15), é perceber que a fase detentora da informação sobre probabilidade de transmissão da partícula depende da geometria e das bordas da barreira. Pela teoria de Landauer da condutância, o transporte é descrito pelos coeficientes de transmissão, o que nos leva a concluir que da fase do coeficiente de tunelamento, dependente da geometria da barreira, emergem as informações de sobre as propriedades universais do transporte.

Assim sendo, onde no caso clássico de tunelamento nada ocorreria, no caso quântico de um elétron viajando e encontrando uma barreira de potencial, ele adquire uma fase que gera propriedades não triviais de interferência quântica. Então, surge, de maneira fortuita, a questão: dado que a fase afeta o transporte e a mesma depende da geometria, qual seria um modelo adequado para descrever o transporte por nanoestruturas? Como visto anteriormente, nanoestruturas são sistemas bidimensionais cuja geometria é difícil de controlar e, além disso, diferentemente do exemplo do potencial duplo, uma nanoestrutura pode ter acoplada a si vários fios com diferentes energias para os elétrons se propagarem.

Dentro deste cenário, na próxima seção investigaremos como se dá o transporte por nanoestruturas e como a fase quântica se manifesta.

3.3 O transporte em nanoestruturas

Recentes experimentos mostram ser possível controlar o processo de transmissão de uma única partícula fundamental por meio de um condutor metálico nanoestruturado. De maneira contundente, o experimento da Ref.[11] mede o transporte de elétrons individualmente e obtém mensuráveis fundamentais do transporte quântico. Dado esse controle experimental, o estudo teórico do transporte eletrônico fica totalmente justificado.

O tema de transporte quântico tem em vista estudar como ocorre o transporte de elétrons em nanoestruturas, o qual também faz parte do campo da nanociência. Contudo, é uma parte com certas peculiaridades. Se tentarmos assumir uma visão reducionista, e, buscar através de uma única sentença sintetizar a essência do transporte quântico, esta seria: *Não é importante se a estrutura é composta de átomos* [9]. O fenômeno de transporte é emergente, ou seja, suas propriedades não de-

pendem imediatamente do material ou da composição da estrutura onde ocorre o transporte, e, mais importante, demonstrou-se experimentalmente que algumas características sequer dependem do tamanho da nanoestrutura. Por exemplo, propriedades de transporte em pontos quânticos compostos de poucos elétrons podem ser idênticas a de dispositivos semicondutores feitos com bilhões de átomos. Mas, como isso é possível, se afirmamos anteriormente que ao nível quântico a informação está contida em uma fase dependente da geometria?

A fim de elucidar esse problema, o físico Landauer formulou uma abordagem original que considera o sistema nanoestruturado acoplado a reservatórios grandes, onde todos os processos inelásticos são contabilizados. Consequentemente, o transporte através do sistema pode ser formulado como um problema de espalhamento. Sendo assim, torna-se possível reduzir um problema de transporte de não-equilíbrio a um problema de espalhamento quântico.

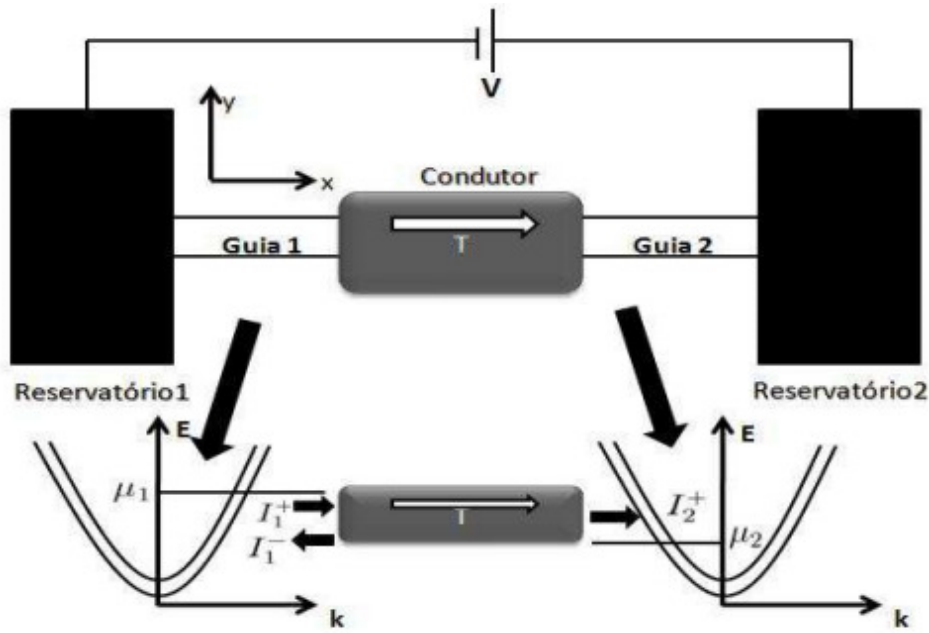


Figura 3.3 Figura com o esquema do modelo original de Landauer para o transporte quântico. Figura retirada da Ref.[32]

Originalmente, a fórmula de Landauer para a condutância foi deduzida baseada na hipótese de que a distribuição eletrônica no espaço dos momentos é equivalente à configuração de elétrons no condutor, a menos de uma variação macroscópica devido a um possível gradiente de temperatura. Aliado a isto, considerava-se também um campo incidindo uniformemente na amostra, dessa forma toda a

configuração está sujeita à mesma aceleração

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{-e\mathbf{E}}{\hbar} \quad (3.18)$$

onde $\mathbf{k}$ é o número de onda que caracteriza o momento no espaço de configurações, e $\mathbf{E}$ o campo elétrico aplicado ao sistema. O campo tira o sistema do equilíbrio, e a configuração interna do sistema tenta retornar à configuração de equilíbrio, caracterizando a condutividade do sistema.

Se considerarmos um sistema condutor livre de meios espalhadores, então, um eventual elétron transportado por esse condutor não sofreria nenhuma alteração no seu estado. Contudo, se tomarmos um pequeno obstáculo no caminho do elétron, então, haveria um processo de acumulação em um lado deste obstáculo dado pelos elétrons que nele incidem são refletidos e uma pequena parcela seria transmitida para o outro lado do obstáculo. Com o excesso de carga em um lado do obstáculo, há uma geração de momento de dipolo definida pela distribuição desse excesso de carga gerado. Esse dipolo elétrico crescerá até um momento em que o obstáculo não intervesse mais, ou seja, a presença do obstáculo cria um certo número de estados para ocupação de elétrons, após esses estados serem totalmente preenchidos, os elétrons seguintes não seriam capturados mais pelo obstáculo. Sendo assim, o dipolo elétrico gerado por cada obstáculo do condutor constitui o campo elétrico associado à corrente total que passa pelo condutor, e a medição do espaçamento desses dipolos é o que caracteriza a condutividade do mesmo [36, 37, 10]. Posto isso, Landauer lançou uma nova proposta a fim de eliminar a necessidade de o campo ser uniforme, pois, como comentado acima, cometeríamos um erro de cálculo relevante. Sendo assim, Landauer trabalhou o comportamento do problema do transporte frente à variação espacial, utilizando a equação de transporte de Boltzmann. Contudo, derivaremos a sua fórmula utilizando uma visão reducionista do problema: consideraremos dois contatos descritos por dois parâmetros intensivos macroscópicos, temperatura e o potencial químico, ligados a um condutor balístico de dimensões mesoscópicas quasi-unidimensionais. O caso ideal configura a ausência de reflexão do condutor para um dos contatos, onde a recíproca não é verdadeira. Isso caracteriza o caso de um condutor balístico, onde a resistência do sistema é dada somente na interface entre o condutor e o contato, chamada resistência de contato. Desse modo, o condutor vai possuir estados $+k$ e $-k$, oriundos dos contatos da esquerda e da direita, respectivamente, pois, cada contato vai possuir um potencial eletroquímico, μ_1 e μ_2 . Assim, a configuração dos contatos obedecerá à distribuição de Fermi-Dirac. Se o condutor possuir somente 1 canal propagador de onda, ter-se-ia uma corrente elétrica dada pela forma semiclássica:

$$I = nev \quad (3.19)$$

onde n é a densidade de elétrons no condutor por unidade de comprimento à velocidade v definida no espaço de fase e e , o valor da carga elétrica. Considerando um

condutor mesoscópico com k estados propagantes, tem-se uma corrente ajustada pela Fermi-Dirac para cada estado k , assim,

$$\begin{aligned} I &= ne \sum_{k=0}^{+\infty} v(k) f(k) \\ &= ne \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f(k). \end{aligned} \quad (3.20)$$

O estado referente à $k = 0$ é considerado possuidor da energia de corte do condutor ϵ , assim, para qualquer energia abaixo desta, não existe estados propagantes. A soma no espaço dos momentos pode ser entendida como um ladrilhamento no espaço contínuo dos momentos de $2\pi/L$, pois, considera-se que cada elétron ocupe o condutor obedecendo a sua periodicidade no espaço dos momentos. Para cada ladrilho, temos uma degenerescência de 2 elétrons, e pelo princípio da exclusão de Pauli, assim, podemos fazer a substituição

$$\sum_k \rightarrow 2 \frac{L}{2\pi} \int dk.$$

Sendo assim, fazendo essa substituição na Eq.(3.20), tem-se

$$I = n \frac{2eL}{2\pi\hbar} \int_0^{+\infty} \frac{\partial E(k)}{\partial k} f(k) dk. \quad (3.21)$$

E, a densidade eletrônica é dada por $1/L$. Substituindo a variável de integração, tem-se:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\epsilon}^{+\infty} f(E) dE. \quad (3.22)$$

Para um condutor operando na energia E , existe um número M de canais abertos nesse condutor, assim, o número total de canais abertos M para uma dada energia E será

$$M(E) = \sum_N \theta(E - \epsilon_N) \quad (3.23)$$

Como podemos ver, o número de canais é dado pela função acumulação, dada pela função Heaviside θ . Para o nível de energia de corte temos 1 canal aberto, para o nível seguinte, 2, e assim por diante. Então, a corrente total será a contribuição de todos esses estados modulados pela Fermi-Dirac

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) M(E) dE, \quad (3.24)$$

aqui, utilizamos o fato que a Heaviside é não-nula a partir da energia de corte. Essa corrente é originada a partir da criação dos estados k devido aos contatos,

dessa forma, teremos que definir a corrente devido ao contato à esquerda e o da direita, respectivamente, como

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(E) M(E) dE$$

$$I^- = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} f_2(E) M(E) dE.$$

Assim, a corrente total será dada por

$$I = I^+ - I^- = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1(E) - f_2(E)) M(E) dE. \quad (3.25)$$

A abordagem de Landauer foi amplamente testada no regime que se dispõe, sucedendo em bons resultados [41]. Agora, derivaremos um resultado mais geral que considera o acoplamento de múltiplos reservatórios.

3.3.1 A abordagem de espalhamento

O estudo do espalhamento de ondas em sistemas complexos tem interessado físicos de diversas áreas, desde óptica, com estudos da propagação da luz em meios desordenados, até a física nuclear [42, 43, 44], com experimentos de bombardeios de núcleons por núcleos pesados.

Vale ressaltar que o espalhamento de um núcleon por um núcleo atômico pode ser descrito por duas escalas de tempo distintas: (1.) Uma resposta imediata associada a processos diretos onde o núcleon incidente sente o campo médio produzido pelos outros núcleons; (2.) Uma resposta retardada, ou equilibrada, associada à formação e decaimento de um núcleo composto. Características similares a essas também surgem no problema de espalhamento para sistemas simples de uma partícula. Um exemplo é o espalhamento de uma partícula em uma cavidade de dimensões maiores que o comprimento de onda, na qual a dinâmica clássica correspondente é caótica. Uma realização experimental desses sistemas são os pontos quânticos, o ponto atua como uma cavidade ressonante conectada a guias de onda eletrônicos. Experimentalmente, aplica-se uma corrente elétrica através dos guias que conectam a cavidade e mede-se a diferença de potencial através da cavidade, calculando-se a condutância G .

Landauer [45, 46], como vimos anteriormente, foi o primeiro a estabelecer a conexão entre a condutância de um sistema quanto-mecânico e o problema de espalhamento associado: a corrente através do condutor é expressa em termos da probabilidade do elétron ser transmitido através dele. Mais tarde, Büttiker

[47] estendeu o resultado para medidas em dispositivos de muitos terminais na presença de campo magnético. O formalismo de Landauer-Büttiker tem sido extensivamente usado na interpretação dos experimentos em física mesoscópica.

A ideia central da abordagem de espalhamento consiste em relacionar as propriedades de transporte do sistema, condutância e as flutuações da corrente, com as propriedades de espalhamento desse sistema, isto é, relacionar com os coeficientes (probabilidades) de transmissão e reflexão. Diferentemente do modelo do potencial duplo (caso unidimensional) que foi resolvido utilizando o método da matriz de transferência, no transporte através de nanoestruturas bidimensionais utilizamos a abordagem da matriz de espalhamento, pois vínculos associados à unitariedade são facilmente incorporados nesse formalismo.

3.3.1.1 Formalismo de Espalhamento

Nesta seção seguiremos a Ref.[48].

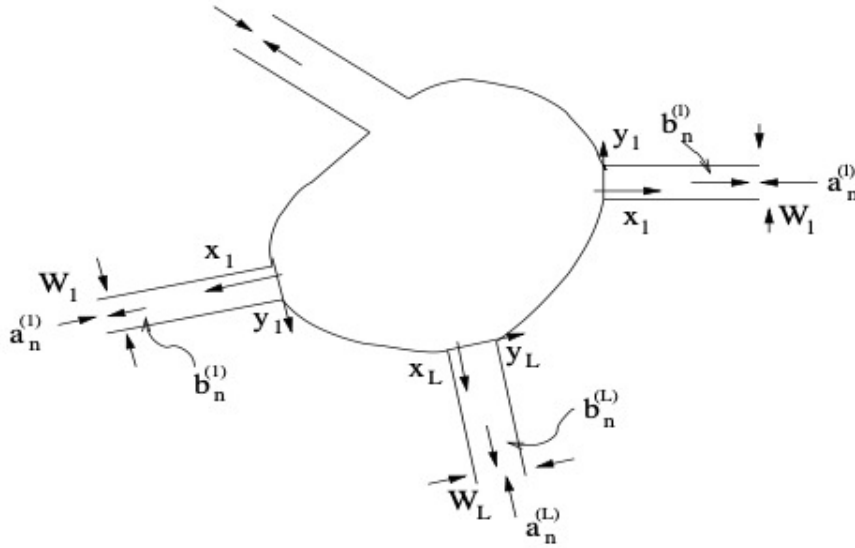


Figura 3.4 Cavidade 2D com L guias. As setas dentro dos guias representam ondas entrando e saindo da cavidade. No guia l há N_l dessas ondas. Figura retirada da Ref.[50]

Estamos interessados em estudar o problema de espalhamento de um elétron com energia de Fermi $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ em uma microestrutura 2D como mostrado na Fig.(3.4). A microestrutura consiste em uma cavidade conectada a reservatórios de elétrons por L guias. O l -ésimo guia ($l = 1, \dots, L$) tem largura W_l . Nosso ponto

de partida é a equação de Schrödinger

$$\frac{1}{2m} \left[-i\hbar \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right]^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (3.26)$$

dentro da estrutura com condições de contorno ideais de paredes impenetráveis: a função de onda se anula nas paredes. Aqui, $V(\vec{r})$ é o potencial devido às impurezas e $\vec{A}(\vec{r})$ é o potencial vetor de um campo magnético externo. Os guias são considerados ideais.

Em cada guia, introduz-se um sistema de coordenadas (x_l, y_l) , como indicado na Fig.(3.4). O eixo x_l é paralelo ao guia e está orientado para fora da cavidade. O eixo y_l aponta na direção transversal e assume os valores 0 e W_l nas paredes do guia. Para o guia l e para $x_l > 0$ temos a solução da equação de Schrödinger

$$\psi(\vec{r}) \propto \chi_n(y_l) e^{\pm i k_{l,n} x_l}, \quad (3.27)$$

onde o sinal positivo (negativo) representa ondas planas saindo (entrando) da cavidade. As funções $\chi_n(y_l)$ são soluções da parte transversal do hamiltoniano na presença de campo magnético. A solução do problema de espalhamento consiste em relacionar as amplitudes das ondas que saem da cavidade com as que entram.

Na ausência do campo magnético, $B = 0$, as funções $\chi_n(y)$ ficam

$$\chi_n(y_l) = \sqrt{\frac{2}{W_l}} \sin(K_{l,n} y_l), \quad K_{l,n} = \frac{n\pi}{W_l}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.28)$$

onde $K_{l,n}$ é o número de onda transversal. As funções $\chi_n(y)$ se anulam nas paredes e formam um conjunto completo

$$\int_0^{W_l} \chi_n(y_l) \chi_m(y_l) dy_l = \delta_{n,m} \quad (3.29)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \chi_n(y) \chi_n(y') = \delta(y - y'). \quad (3.30)$$

Em consequência das condições de contorno de “paredes rígidas” temos uma quantização transversal. Para cada n inteiro na Eq.(3.28) temos um modo ou canal. Os números de onda transversal e longitudinal se relacionam por:

$$[k_{l,n}]^2 + [K_{l,n}]^2 = k_F^2 \equiv \frac{2mE_F}{\hbar^2}. \quad (3.31)$$

Se $K_{l,n} < k_F$, então $[k_{l,n}]^2 > 0$, $k_{l,n}$ é real e as exponenciais $e^{\pm i k_{l,n} x_l}$ na Eq.(3.27) representam ondas propagantes nos guias: são os modos propagantes ou canais

abertos. Por outro lado, quando $K_{l,n} > k_F$, então $[k_{l,n}]^2 < 0$ e $k_{l,n}$ é imaginário, dando origem a ondas que decaem exponencialmente nos guias: estes são os modos evanescentes ou canais fechados. Se

$$N_l < k_F W_l / \pi < N_l + 1, \quad (3.32)$$

há N_l canais abertos no guia l . Longe da cavidade, ou seja, para $x_l \rightarrow \infty$, apenas os canais abertos contribuem para a função de onda. A forma assintótica da função de onda no guia l é dada por

$$\sum_{n=1}^{N_l} \left[a_n^{(l)} \frac{e^{-ik_{l,n}x_l}}{(\hbar k_{l,n}/m)^{1/2}} + b_n^{(l)} \frac{e^{ik_{l,n}x_l}}{(\hbar k_{l,n}/m)^{1/2}} \right] \chi_n(y_l). \quad (3.33)$$

A normalização aqui presente atende à prescrição usual de problemas de espalhamento.

3.3.1.2 Matriz de Espalhamento

Podemos definir o vetor das N_l amplitudes das ondas incidentes na cavidade através do guia l

$$\mathbf{a}^{(l)} = (a_1^l, \dots, a_{N_l}^l)^T. \quad (3.34)$$

Agrupando todos os $\mathbf{a}^{(l)}$ ($l = 1, \dots, L$), temos o vetor

$$\mathbf{a} = (\mathbf{a}^{(1)}, \dots, \mathbf{a}^{(L)})^T, \quad (3.35)$$

associado às ondas que entram na cavidade a partir de todos os canais abertos em todos os guias. De maneira similar, definimos o vetor $\mathbf{b}$ associado às ondas que saem da cavidade. A matriz de espalhamento, ou matriz S , conecta essas amplitudes

$$\mathbf{b} = S\mathbf{a}. \quad (3.36)$$

Seus elementos de matriz são rotulados por S_{kl}^{ij} e conectam estados do modo l do guia j aos estados do modo k do guia i . A matriz S pode ser representada na forma de blocos

$$S = \begin{bmatrix} r_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1L} \\ t_{21} & r_{22} & \cdots & t_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{L1} & t_{L2} & \cdots & r_{LL} \end{bmatrix}, \quad (3.37)$$

onde os blocos r_{ll} são matrizes $N_l \times N_l$ que descrevem a reflexão do l -ésimo guia nele mesmo. Os blocos t_{lm} são matrizes $N_l \times N_m$ que descrevem a transmissão

dos N_m canais do guia m para os N_l canais do guia l . Sendo N_T o número total de modos em todos os guias, a matriz S é quadrada e tem ordem

$$N_T = \sum_{l=1}^L N_l. \quad (3.38)$$

Outra maneira de expressar a função de onda no l -ésimo guia é pelo vetor N_l dimensional [49],

$$\Psi_l(\vec{r}) \equiv [\psi_1(x_l, y_l), \dots, \psi_{N_l}(x_l, y_l)]^T, \quad (3.39)$$

cujas entradas são as funções de onda de cada modo propagante:

$$\begin{aligned} \psi_n(x_l, y_l) &= \phi_n(x_l) \chi_n(y_l), \\ \phi_n(x_l) &= a_n^{(l)} \frac{e^{-ik_{l,n}x_l}}{(\hbar k_{l,n}/m)^{1/2}} + b_n^{(l)} \frac{e^{ik_{l,n}x_l}}{(\hbar k_{l,n}/m)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

3.3.1.3 Densidade de corrente

A densidade de corrente no guia l é dada por: [75]

$$j_l \equiv \frac{\hbar}{m} Im \int_0^{W_l} \left[\Psi_l^\dagger(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} \Psi_l(\vec{r}) \right]_{x_l=0} dy_l \quad (3.41)$$

Notando que

$$\left[\Psi_l^\dagger(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} \Psi_l(\vec{r}) \right]_{x_l=0} = \sum_{j=1}^{N_l} \left[\phi_j^*(x_l) \frac{\partial \phi_j(x_l)}{\partial x_l} \right]_{x_l=0} \chi_j^2(y_l) \quad (3.42)$$

e usando a relação de ortogonalidade (3.29), temos

$$j_l = \frac{\hbar}{m} Im \sum_{j=1}^{N_l} \left[\phi_j^*(x_l) \frac{\partial \phi_j(x_l)}{\partial x_l} \right]_{x_l=0} = \sum_{n=1}^{N_l} (|b_n^l|^2 - |a_n^l|^2). \quad (3.43)$$

A Eq.(3.43) pode ser escrita na forma matricial. Para tal, note que

$$\sum_{n=1}^{N_l} (|b_n^l|^2 - |a_n^l|^2) = (b_1^{l*}, \dots, b_{N_l}^{l*}, a_1^{l*}, \dots, a_{N_l}^{l*}) \begin{pmatrix} b_1^l \\ \vdots \\ b_{N_l}^l \\ -a_1^l \\ \vdots \\ -a_{N_l}^l \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Definindo o vetor $2N_l$ – *dimensional* das amplitudes das ondas de todos os modos do guia l

$$\mathbf{c}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{b}^l \\ \mathbf{a}^l \end{pmatrix} = (b_1^l, \dots, b_{N_l}^l, a_1^l, \dots, a_{N_l}^l)^T, \quad (3.45)$$

a densidade de corrente fica

$$j_l = \mathbf{c}_l^\dagger \Sigma_z \mathbf{c}_l, \quad (3.46)$$

onde Σ_z é uma generalização $2N_l$ – *dimensional* da matriz σ_z de Pauli em termos da matriz identidade $N_l \times N_l$

$$\Sigma_z = \sigma_z \otimes 1_{N_l} = \begin{pmatrix} 1_{N_l} & 0 \\ 0 & -1_{N_l} \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

3.3.1.4 Teoria de Landauer-Büttiker

Consideremos uma amostra mesoscópica conectadas a dois reservatórios (terminais), esquerdo (L) e direito (R), onde é assumido que tais reservatórios são suficientemente grandes de tal modo a serem caracterizados pelas suas respectivas temperaturas $T_{L,R}$ e potenciais químicos $\mu_{L,R}$, e as funções de distribuição dos elétrons nos reservatórios serão aquelas da estatística de Fermi-Dirac:

$$f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu_\alpha)/k_B T_\alpha] + 1} \quad (3.48)$$

com o subíndice $\alpha = L, R$. Nota-se que um estado de equilíbrio nos terminais somente pode ser estabelecido via processos inelásticos internos de cada terminal. Entretanto, não são considerados processos inelásticos nos sistemas mesoscópicos, tais sistemas apresentam coerência de fase eletrônica, como exposto anteriormente. Tal consideração é justificável pelo fato de os reservatórios serem grandes comparados com a secção transversal reta W (secção de choque) e do comprimento L dos condutores mesoscópicos, desse modo, os condutores mesoscópicos podem ser considerados como apenas uma pequena perturbação entre os reservatórios, os quais podem ter suas propriedades locais descritas por estados de equilíbrio. Outro fato a se destacar diz respeito a irreversibilidade do fenômeno, apesar da dinâmica de espalhamento no condutor ser descrita por um hamiltoniano, a irreversibilidade é introduzida em decorrência dos processos de entrada e saída dos portadores de carga na região de espalhamento não serem eventos relacionados (estatística poissoniana) [48].

Assume-se, sem perda de generalidade, que longe da região de espalhamento o movimento eletrônico longitudinal (ao longo do eixo do condutor) e transversal (perpendicular ao condutor) são separáveis, e considera-se o transporte efetivo

sempre ocorrendo do reservatório esquerdo (L) para o direito (R). Movimento longitudinal é contínuo e caracterizado pelo vetor de onda $k_l \hat{z}$, com autovalor de energia $E_l = \hbar^2 k_l^2 / 2m$. O movimento transverso é confinado, fato este que origina a quantização desse movimento e o mesmo passa a ser caracterizado pelo índice discreto n , com autovalor de energia $E_{\alpha;n}$ que pode ser diferente em cada reservatório. Esses autovalores de energia do movimento transverso são chamados de canais (modos) transversos de propagação. Assim, tem-se $E = E_l + E_n$. O número total de canais no guia esquerdo e no direito é denotado por $N_{L,R}(E)$, respectivamente.

Introduzindo os operadores criação(aniquilação) $a_{Ln}^\dagger(E)$ ($a_{Ln}(E)$). Este atua criando (aniquilando) um elétron com energia E no canal transverso n do guia esquerdo, incidente no condutor mesoscópico. Além disso, os operadores de criação (aniquilação), $b_{Ln}^\dagger(E)$ ($b_{Ln}(E)$), descrevem elétrons refletidos do condutor mesoscópico para o reservatório esquerdo. Tais operadores obedecem às seguintes relações de anti-comutação:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{Ln}^\dagger(E) \hat{a}_{Ln'}(E') + \hat{a}_{Ln'}(E) \hat{a}_{Ln}^\dagger(E') &= \delta_{nn'} \delta(E - E') \\ \hat{a}_{Ln}(E) \hat{a}_{Ln'}(E') + \hat{a}_{Ln'}(E') \hat{a}_{Ln}(E) &= 0 \\ \hat{a}_{Ln}^\dagger(E) \hat{a}_{Ln'}^\dagger(E') + \hat{a}_{Ln'}^\dagger(E') \hat{a}_{Ln}^\dagger(E) &= 0 \end{aligned}$$

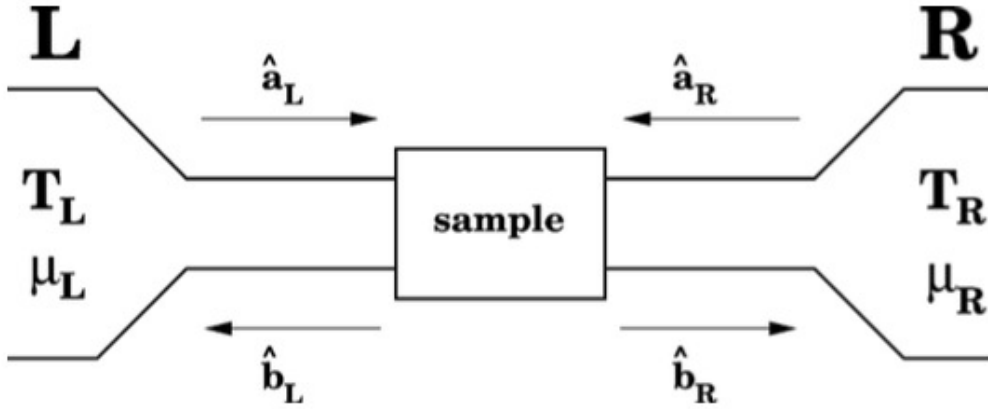


Figura 3.5 Figura com o esquema do modelo de Landauer-Büttiker para o transporte quântico: Exemplo com dois terminais. Figura retirada da Ref.[48]

Os operadores $\hat{a}$ e $\hat{b}$ estão relacionados pela matriz de espalhamento s ,

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{L1} \\ \dots \\ \hat{b}_{LN_1} \\ \hat{b}_{R1} \\ \dots \\ \hat{b}_{RN_R} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \hat{a}_{L1} \\ \dots \\ \hat{a}_{LN_1} \\ \hat{a}_{R1} \\ \dots \\ \hat{a}_{RN_R} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

Os operadores de criação, $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{b}^\dagger$, obedecem a mesma regra com relação a matriz $S^\dagger$. A matriz S tem dimensão $(N_L + N_R) \times (N_L + N_R)$. Seu tamanho, assim como o tamanho da matriz de elementos, depende da energia total E . A matriz $S(E)$ pode ser escrita em uma estrutura de blocos como segue:

$$S(E) = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

onde os blocos diagonais r ($N_L \times N_L$) e r' ($N_R \times N_R$) descrevem a reflexão do elétron voltando para o reservatório da esquerda e direita, respectivamente. Os elementos da não diagonal, os blocos retangulares t ($N_R \times N_L$) e t' ($N_L \times N_R$) são responsáveis por descrever a transmissão através da amostra mesoscópica. A conservação do número de partículas (elétrons) envolvidas no transporte implica que a matriz S é unitária. Ademais, na presença de simetria de reversão temporal, ou seja, na ausência de campos magnéticos, a matriz de espalhamento também é simétrica.

Considere uma partícula que sai de um dos dois reservatórios ligados ao condutor por intermédio de guias e adentra a um condutor, 3.5. Como dito anteriormente, tomamos a condução como sendo separável por uma função de onda transversal e outra longitudinal. A função de onda longitudinal define os modos propagantes, enquanto a transversal provê o canal por onde a partícula irá propagar-se, dada por uma função de onda com ortogonalidade bem definida. Dada essa análise, podemos prever a função de onda no condutor.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n^{N(E)} \int dE \frac{e^{-iEt/\hbar}}{\sqrt{hv_n(E)}} \chi_n(y) (\hat{a}_n^{ik_n x} + \hat{b}_n^{-ik_n x}) \quad (3.51)$$

onde v_n é a velocidade no espaço de fase. Reservamos a parte transversal para o eixo y , e a longitudinal para o x , portanto, χ_n é uma função ortogonal e a_n e b_n os operadores de criação e aniquilação. A Eq.(3.51) surge com o objetivo de implementar o caso multiterminal, para tal, o condutor multicanal é visto como um conjunto de vários canais singulares, por isso a normalização deve conter a

densidade de estados, $\partial E/\partial k$. Por fim, consideramos a Eq.(3.51) nessa forma, pois estamos analisando a solução longe do condutor, então, a função de onda será dada por frentes de ondas moduladas pelas funções ortogonais χ_n .

Como estamos interessados na corrente resultante para o caso de um condutor mesoscópico multicanal utilizaremos a definição usual, dada a distribuição de corrente, do operador de corrente no lado esquerdo como

$$\hat{I}_L(t) = \oint \mathbf{J}_L \cdot d\mathbf{l} = \int \mathbf{J}_L dx \quad (3.52)$$

Da quântica elementar, temos fórmula para a densidade de corrente

$$\hat{J}_L(t) = \frac{\hbar e}{2im} \int dy \left(\hat{\Psi}_L^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \hat{\Psi}_L(\mathbf{r}, t)}{\partial x} - \hat{\Psi}_L(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \hat{\Psi}_L^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right),$$

de onde, vê-se imediatamente que

$$\frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial x} = i \sum_n^{N(E)} \int dE \frac{e^{iEt/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar v_{Ln}(E)}} \chi_{Ln}(y) k_{Ln} (\hat{a}_{Ln} e^{ik_{Ln}x} - \hat{b}_{Ln} e^{-ik_{Ln}x}) \quad (3.53)$$

Dessa forma, substituindo diretamente em Eq.(3.53), obtém-se a seguinte expressão para o operador corrente:

$$\begin{aligned} I_L(z, t) = & \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_n \int dE dE' \frac{e^{i(E-E')t/\hbar}}{\sqrt{v_{Ln}(E)v_{Ln}(E')}} [[v_{Ln}(E) + v_{Ln}(E')] \times \\ & [e^{i(k_{Ln}(E')-k_{Ln}(E))z} a_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E') - e^{i(k_{Ln}(E)-k_{Ln}(E'))z} b_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E')] + \\ & [v_{Ln}(E) - v_{Ln}(E')] [e^{-i(k_{Ln}(E)-k_{Ln}(E'))z} a_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E') - \\ & e^{i(k_{Ln}(E)-k_{Ln}(E'))z} b_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E')]] \quad (3.54) \end{aligned}$$

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

$$I_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} [a_{Ln}^\dagger(E) a_{Ln}(E') - b_{Ln}^\dagger(E) b_{Ln}(E')] \quad (3.55)$$

Nota-se que $\hat{n}_{Ln}^+(E) = \hat{a}_{Ln}^\dagger(E) \hat{a}_{Ln}(E)$ é o operador número de ocupação dos portadores incidentes sobre o condutor a partir do reservatório esquerdo através

do canal n , e, de forma análoga, $\hat{n}_{Ln}^-(E) = \hat{b}_{Ln}^\dagger(E)\hat{b}_{Ln}(E)$ é o operador número de ocupação dos portadores refletidos do condutor para o reservatório esquerdo pelo canal n . Fazendo-se $E' = E + \hbar\omega$ e integrando em relação a ω , tem-se,

$$\hat{I}_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE [\hat{n}_{Ln}^+(E, t) - \hat{n}_{Ln}^-(E, t)] \quad (3.56)$$

onde $\hat{n}_{Ln}^\pm(E, t)$ são os números de ocupação dependente do tempo dos portadores que se movem da esquerda para a direita com energia E . Sendo assim, a Eq.(3.56) estabelece que a corrente no tempo t é simplesmente determinada pela diferença do número de ocupação entre os canais da esquerda e direita. Contudo, buscando achar uma expressão que seja mais geral, tomamos a relação linear correspondente entre $\hat{a}$ e $\hat{b}$ através da matriz de espalhamento, assim

$$\hat{I}_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} (\hat{a}_{Ln}^\dagger(E) \hat{a}_{Ln}(E') - \sum_{\alpha, \beta, m, k} \hat{a}_{\alpha m}^\dagger(E) s_{L\alpha, mk}^*(E) s_{L, \beta, kn}(E') \hat{a}_{\beta n}(E')),$$

onde adicionamos o índice m a fim de não eliminar os termos cruzados do produto das amplitudes de saída. Ainda, pode-se reescrever a expressão acima da seguinte forma:

$$\hat{I}_L(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha\beta} \sum_{m,n}^{N(E)} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} \hat{a}_{\alpha m}^\dagger(E) A_{\alpha, \beta}^{mn}(L; E, E') \hat{a}_{\beta n}(E'), \quad (3.57)$$

onde os índices α e β rotula os reservatórios e eles podem assumir os valores L ou R. A matriz A é definida como

$$A_{\alpha\beta}^{mn}(L; E, E') = \delta_{mn} \delta_{\alpha L} \delta_{\beta L} - \sum_k s_{L\alpha, mk}^*(E) s_{L, \beta, kn}(E') \quad (3.58)$$

A equação acima é chamada de matriz-corrente, ela é responsável por caracterizar a corrente no terminal L na existência de um estado incidente no terminal α e β , no canal m e n . Como o próprio conceito induz a intuir, e como veremos mais adiante, os elementos da matriz-corrente governam as flutuações e serão necessárias no cálculo do ruído.

Com a Eq.(3.57), podemos obter a corrente média que flui pelo condutor mesoscópico. Para um sistema no equilíbrio termodinâmico, a média quântico-estatística do produto de operadores de criação e aniquilação de elétrons de um gás de Fermi é dado por,

$$\langle \hat{a}_{\alpha m}^\dagger(E) \hat{a}_{\beta n}(E') \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} \delta(E - E') f_\alpha(E). \quad (3.59)$$

Usando as Eqs.(3.57) e (3.59), e sabendo que a matriz de espalhamento S é unitária, obtém-se,

$$\langle I_L \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \int dE \text{Tr}[t^\dagger(E)t(E)][f_L(E) - f_R(E)]. \quad (3.60)$$

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

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \text{Tr}[t^\dagger(E_F)t(E_F)]. \quad (3.61)$$

Dessa forma, é possível observar a relação entre a matriz de espalhamento no nível de Fermi e a condutância na Eq.(3.61), a qual é uma expressão básica invariante para a descrição das propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos. Diagonalizando a matriz $t^\dagger t$, ela terá um conjunto real de autovalores, probabilidade de transmissão, $\mathbf{T}_n(E)$ variando entre zero e um. Na base dos auto-canais de condução, pode-se reescrever a Eq.(3.60),

$$\langle I_L \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_n \int dE \mathbf{T}_n(E)[f_L(E) - f_R(E)]. \quad (3.62)$$

Logo, obtemos a fórmula de Landauer para multi-canais de condução abertos:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_n \mathbf{T}_n(E_F). \quad (3.63)$$

onde n são canais degenerados em relação ao spin dos elétrons. Essas bases de auto-canais são chamadas de bases naturais para a expressão da condutância. Destaca-se que apesar de a condutância ser descrita apenas como os coeficientes de transmissão, há observáveis de transporte, como o ruído de disparo, que não são apenas descritos por esses coeficientes, assim, os coeficientes de transmissão não são os elementos fundamentais da descrição do transporte, mas sim a cinética eletrônica, governada pela matriz de espalhamento S .

Por completeza, trataremos o caso de um condutor acoplado a dois terminais e também o caso multiterminal. Considerando um condutor mesoscópico conectado a múltiplos reservatórios eletrônicos (α), caracterizados pela função de distribuição de Fermi $f_\alpha(E)$, onde $E = E_F + \mu_\alpha$. Para uma dada energia, o guia α apresentará $N_\alpha(E)$ canais de condução abertos. Com isso, pode-se, mais uma vez, introduzir os operadores de criação e aniquilação dos estados incidentes ($\hat{a}_{\alpha n}^\dagger, \hat{a}_{\alpha n}$) e dos refletidos ($\hat{b}_{\alpha n}^\dagger, \hat{b}_{\alpha n}$), através do canal n . Novamente, ambos os operadores estão relacionados por meio da matriz de espalhamento, como na Eq.(3.49), da seguinte forma,

$$b_{\alpha m}(E) = \sum_{\beta n} S_{\alpha\beta;mn}(E) a_{\beta n}(E). \quad (3.64)$$

De acordo com as derivações anteriores, pode-se generalizar o operador corrente, Eq.(3.58), para o caso do fluxo eletrônico do reservatório α de um condutor multiterminal,

$$I_\alpha(t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\beta\gamma} \sum_{m,n} \int dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} a_{\beta m}^\dagger(E) A_{\beta\gamma}^{mn}(\alpha; E, E') a_{\gamma n}(E') \quad (3.65)$$

com,

$$A_{\beta\gamma}^{mn}(\alpha; E, E') = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma} - \sum_k^{N(E)} s_{\alpha\beta;mk}^*(E) s_{\alpha\gamma;kn}(E') \quad (3.66)$$

onde os sub-índices γ e k referem-se aos guias e aos canais abertos para condução, respectivamente. A corrente média do condutor advinda do guia β , o qual se encontra com um potencial eletroquímico $\mu_\beta = \mu_{eq} + eV_\beta$, onde μ_{eq} refere-se ao potencial químico no equilíbrio, é dada por:

$$\langle I_\alpha \rangle = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\beta(\beta \neq \alpha)} V_\beta \int dE \left(\frac{-\partial f}{\partial E} \right) [N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - Tr(s_{\alpha\beta}^* s_{\alpha\beta})], \quad (3.67)$$

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

$$\langle I_\alpha \rangle = \sum_\beta G_{\alpha\beta} V_\beta \quad (3.68)$$

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

$$G_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int dE \left(\frac{-\partial f}{\partial E} \right) [N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - Tr(s_{\alpha\beta}^* s_{\alpha\beta})]. \quad (3.69)$$

Lembrando que os elementos da matriz de espalhamento são calculados no nível de Fermi, $s_{\alpha\beta} = s_{\alpha\beta}(E_F)$. Essa expressão para a matriz de condutância tem sido aplicada com sucesso, pioneiramente por Büttiker, no início da década de 1990, a uma gama de sistemas mesoscópicos e sem simetria de reversão-temporal.

A soma da corrente que entra no condutor por todos os terminais é nula em cada instante de tempo (conservação da corrente), para garantir que não haja fontes nem sorvedouros de cargas internas ao condutor, no caso de dois terminais temos: $I_L + I_R = 0$. Também é considerado não haver corrente líquida no condutor se os potenciais eletroquímicos de todos os terminais são simultaneamente alterados por uma mesma voltagem aplicada (invariância de gauge), desconsiderando a variação do potencial devido a um possível gradiente de temperatura. Para a matriz de condutância $G_{\alpha\beta}$, a conservação da corrente e a invariância de gauge implicam: $\sum_\alpha G_{\alpha\beta} = \sum_\beta G_{\alpha\beta} = 0$. Especialmente, no caso de dois terminais: $G = G_{LL} = G_{RR} = -G_{LR} = -G_{RL}$. Assim, no caso de dois terminais, calculando

apenas um dos elementos da matriz de condutância é suficiente para se obter a matriz de condutância completa. Quando é aplicado um campo magnético externo B ao condutor e considerando uma corrente estacionária, as relações de Onsager podem ser aplicadas à matriz de condução: $G_{\alpha\beta}(B) = G_{\beta\alpha}(-B)$. Contudo, nos casos estacionários (corrente DC), a conservação da corrente e a invariância de gauge são devidos a matriz de espalhamento ser unitária.

3.4 Conclusão

Após uma breve digressão acerca do transporte clássico e tendo conhecimento dos avanços na miniaturização dos dispositivos eletrônicos, é razoável questionar quais parâmetros tornam-se relevantes no transporte na escala quântica. Explicitamente, vimos que na escala quântica uma partícula pode *tunelar*, ou seja, existe uma probabilidade diferente de zero da mesma atravessar uma região classicamente proibida. Através do formalismo de matriz de transferência, constatamos o surgimento de uma fase dependente da geometria na taxa de tunelamento e, mais importante, esta fase é a manifestação contundente da natureza ondulatória da matéria, onde tal propriedade leva aos efeitos de interferência quântica. A pergunta que emerge é: O que há de novo no transporte quântico em nanoestruturas?

Nanoestruturas são dispositivos com poucos átomos capazes de confinar partículas fundamentais, a exemplo do elétron. Através desses dispositivos, o elétron se comporta como uma onda e, uma vez confinado dentro dele, colide com as bordas. Contudo, como a geometria do ponto não é controlável, a colisão com bordas aleatórias faz com que surja o caos e toda a informação sobre esses elementos caóticos estão contidos na fase quântica presente na taxa de transmissão. Segundo a formulação de Landauer-Büttiker, a condutância, um importante observável de transporte, pode ser calculado através das taxas de transmissão (autovalores de transmissão da matriz S), desse modo, unindo todas as informações aqui expostas, pode-se concluir que a condutância para cada nanoestrutura específica vai ser aleatória. E, sobrando, do ponto de vista da física teórica, a informação estatística.

Por conseguinte, apresentaremos, no próximo capítulo, a Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA) e o Método Diagramático de Integração que nos permitirá calcular as propriedades estatísticas universais em um ensemble de matrizes de espalhamento.

Matrizes Aleatórias e a Técnica Diagramática

Neste capítulo vamos estabelecer o arcabouço técnico necessário ao desenvolvimento dos resultados centrais da dissertação. De forma geral, este conjunto de ferramentas fornece meios para chegarmos aos resultados analíticos exatos no regime quântico extremo. A Seção 3.1 apresenta um panorama da teoria de matrizes aleatórias (TMA) e apontamos motivações para utilização da mesma. Na Seção 3.2 discutimos o teorema de Wick, elemento central no desenvolvimento da técnica diagramática. Em seguida, na Seção 3.3, apresentamos propriamente como utilizar a técnica diagramática. Por fim, a Seção 3.3 apresenta o cálculo da condutância em dois sistemas relevantes: Bilhar de Schrödinger e Bilhar de Dirac.

4.1 Teoria de Matrizes Aleatórias

Os sistemas conservativos clássicos que passam por uma transição para o caos têm um comportamento dinâmico muito complexo Ref.[69]. O quanto dessa complexidade permanece no sistema correspondente? A fim de responder tal pergunta, pesquisas indicaram que sistemas quânticos, cujos correspondentes clássicos são caóticos, têm espectros cujas propriedades estatísticas são semelhantes às de matrizes aleatórias que extremizam as informações Ref.[15]. Assim, qualquer estudo das manifestações quânticas do caos requer uma análise do conteúdo informacional dos sistemas quânticos usando conceitos da teoria da matriz aleatória (TMA), por essa razão, para estudarmos pontos quânticos caóticos recorreremos a TMA.

O uso da teoria de matrizes aleatórias como uma ferramenta para estudar propriedades estatísticas de sistemas quânticos surgiu pela primeira vez na física quando o físico nuclear E. Wigner propôs usá-la para analisar sequências complexas dos níveis de energia nuclear. Naquela época, os dados experimentais mostravam espaçamentos entre níveis de energia próximos. Pensava-se que tais espaçamentos de níveis próximos resultavam das limitações do aparato experimental. Contudo,

Wigner conseguiu dar uma explicação usando argumentos estatísticos Ref.[68]. Ele supôs uma possível distribuição de espaçamento entre níveis vizinhos, assumindo que os elementos da matriz hamiltoniana apresentavam números aleatórios com distribuição gaussiana. Assim, ele obteve uma distribuição para os espaçamentos, s , entre autovalores,

$$P_w(s) = \frac{\pi s}{2D^2} \exp\left(\frac{-\pi s^2}{4D^2}\right), \quad (4.1)$$

onde D é a média de espaçamento entre autovalores vizinhos na sequência de autovalores considerada. A Eq.(4.1) é conhecida como *distribuição de Wigner*. A distribuição de Wigner prevê uma pequena probabilidade de se encontrar pequenos espaçamentos entre autovalores de energia mais próximos. Fato este que é um pouco diferente para o caso onde os autovalores são distribuídos aleatoriamente. Para sequências aleatórias de autovalores, o espaçamento entre vizinhos mais próximos satisfaz a *distribuição de Poisson*,

$$P_P(s) = \frac{1}{D} \exp\left(\frac{-s}{D}\right), \quad (4.2)$$

onde D é novamente a média de espaçamento entre autovalores vizinhos. Na Fig.(4.1), há uma comparação entre a distribuição de Wigner, $P_w(s)$, e a de Poisson, $P_P(s)$, para o caso em que $D = 1$. Para sistemas cujos autovalores estão distribuídos aleatoriamente, existe uma grande probabilidade de se encontrar pequenos espaçamentos entre autovalores. Sendo assim, para sistemas cujos elementos da matriz hamiltoniana são distribuídos aleatoriamente, existe uma pequena probabilidade de se encontrar espaçamentos próximos entre autovalores Ref.[70].

Após o êxito inicial da TMA na compreensão dos fenômenos nucleares, ela foi aplicada nas mais diversas áreas da física, desde a óptica até a física da matéria condensada. Na física mesoscópica, ela é bastante utilizada para estudar as propriedades de transporte em sistemas desordenados, Ref.[19]. A TMA aparece, ainda, em domínios tão díspares quanto o estudo dos zeros da função zeta de Riemann e a distribuição temporal de ônibus urbanos. Nesse capítulo, desenvolveremos ferramentas baseadas em TMA que nos permitirá analisar o conteúdo informacional de sistemas mesoscópicos que manifestam propriedades caóticas.

4.2 Teoria de Matrizes Aleatórias de Pontos Quânticos

A única condição para que pontos quânticos caóticos possam ser descritos pela teoria de matrizes aleatórias de Wigner-Dyson é a de que o tempo de permanência do elétron na cavidade seja maior que o tempo ergódico τ_e , o tempo necessário à exploração completa do espaço de fase do sistema. Enquanto esta exigência é

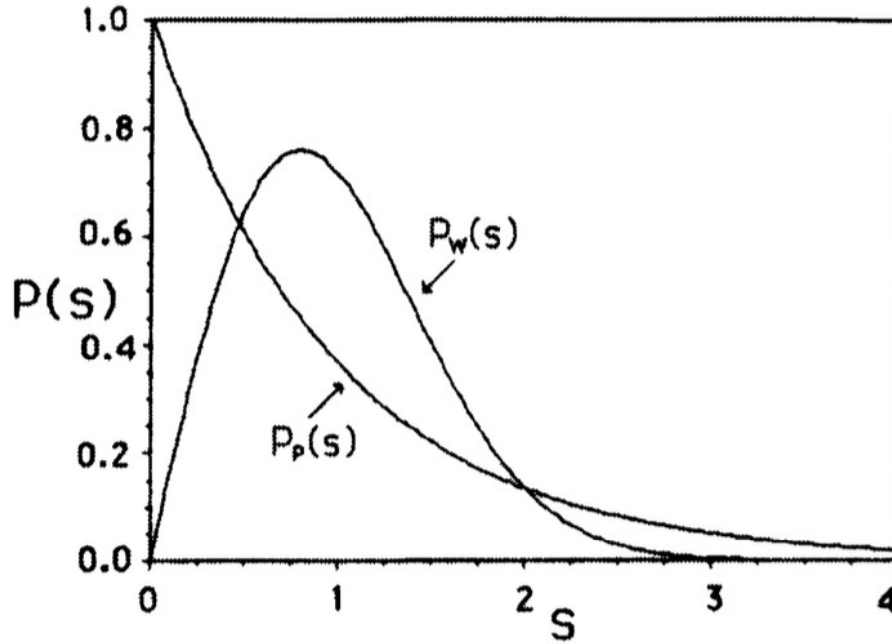


Figura 4.1 Gráfico representando a distribuição de Wigner, $P_w(s)$, e a distribuição de Poisson, $P_p(s)$, como função do espaçamento entre níveis, s , para $D = 1$. Figura retirada da Ref.[55]

atendida para pontos quânticos fechados, o mesmo só ocorre com pontos quânticos abertos se eles estiverem conectados aos guias através de contatos pontuais. Uma vez satisfeita esta condição, o comportamento do sistema é universal e independe da forma do ponto quântico ou de sua configuração de impurezas.

4.2.1 Ponto Quântico Fechado

Um ponto quântico fechado é descrito por seus níveis de energia e autofunções, exatamente como um átomo. Tais propriedades são bastante sensíveis à distribuição de impurezas ou às condições de contorno da amostra. Sendo assim, pode-se considerar um ensemble de pontos quânticos com configuração de impurezas ou formas diferentes e calcular as propriedades estatísticas dos níveis de energia e funções de onda. Verifica-se que essas propriedades são universais, ou seja, independem da forma do ponto ou da distribuição de impurezas, dependendo estritamente das simetrias básicas do problema: simetrias de reversão temporal, rotação de spin e espaciais.

As propriedades estatísticas universais de um ponto quântico caótico são

semelhantes a de uma grande matriz aleatória e hermitiana, H , que obedeça às mesmas simetrias do hamiltoniano microscópico do ponto quântico. Os níveis energéticos de um ponto quântico correspondem aos autovalores da matriz H , e suas funções de onda aos autovetores. A distribuição precisa da matriz H não é relevante. Tal fato celebra a universalidade da TMA, e é esta mesma universalidade que governa as propriedades estatísticas dos níveis energéticos e funções de onda do ponto caótico, garantindo que essas não dependam dos detalhes microscópicos.

Wigner e Dyson estudaram um ensemble de matrizes hermitianas H , $N \times N$, com distribuição de probabilidade

$$P(H) = C_N \exp[-\beta \text{Tr} V(H)], \quad (4.3)$$

onde C_N é uma constante de normalização. Quando $V(H) \propto H^2$, tem-se o ensemble gaussiano. O índice β aparecendo em 4.3 é chamado *índice de simetria*, estando relacionado à presença de certas simetrias fundamentais. A utilidade do ensemble gaussiano resulta do fato de que os elementos independentes do hamiltoniano são variáveis aleatórias independentes, pois

$$\text{Tr} V(H) = \text{Tr} H^2 = \sum_{i,j} |H_{ij}|^2. \quad (4.4)$$

e a distribuição fatora, simplificando os cálculos. No limite $N \rightarrow \infty$ as correlações espectrais tornam-se independentes de V . Isso é conhecido como *universalidade* das correlações espectrais.

Os valores possíveis de β são 1, 2 e 4, correspondendo ao número de graus de liberdade dos elementos da matriz H . Como a transformação

$$H \rightarrow U H U^{-1}, \quad (4.5)$$

com U sendo uma matriz ortogonal ($\beta = 1$), unitária ($\beta = 2$), ou simpléticas¹ ($\beta = 4$) deixa $P(H)$ invariante, e o ensemble é chamado de ortogonal, unitária ou simplético, respectivamente. Fisicamente, $\beta = 2$ se aplica ao caso de simetria de reversão temporal quebrada por um campo magnético ou por impurezas magnéticas. Na presença de simetria de reversão temporal (SRT), temos $\beta = 1$ se o spin do elétron é conservado e $\beta = 4$ se a simetria de rotação de spin (SRS) é quebrada devido a uma forte interação spin-órbita. Tal classificação, atribuída à Dyson, está resumida na Tabela 4.1.

Para determinar a distribuição dos autovalores e autovetores de H , considere E_n como sendo o conjunto de autovalores de H e U a matriz de autovetores, então

$$H = U \text{diag}(E_1, E_2, \dots, E_N) U^\dagger. \quad (4.6)$$

¹Um quatérnion q é a combinação linear da matriz identidade $\mathbf{1}$ e das matrizes de Pauli $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$: $q = q_0 \mathbf{1} + i q_1 \sigma_1 + i q_2 \sigma_2 + i q_3 \sigma_3$. Quando os números q_i são reais, diz-se que q é um quatérnion real.

4.2. TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS DE PONTOS QUÂNTICOS 57

β	SRT	SRS	Elementos de H	U
1	Sim	Sim	Reais	Ortogonal
2	Não	Irrelevante	Complexos	Unitária
4	Sim	Não	Quatérnions reais	Simplética

Tabela 4.1 Classificação de Dyson das classes de simetria segundo o parâmetro β . U é matriz dos autovetores de H , que deixa $P(H)$ invariante sob $H \rightarrow UHU^{-1}$.

Como $\text{Tr } V(H) = \sum_n V(E_n)$ depende apenas dos autovalores, a distribuição da Eq.(4.3) é independente dos autovetores. Isso significa que U é uniformemente distribuído no grupo unitário (para $\beta = 2$) e no ortogonal e simplético (para $\beta = 1$ e 4).

Para achar a distribuição $P(E_n)$ dos autovalores devemos multiplicar $P(H)$ pelo jacobiano J que relaciona o volume infinitesimal $d\mu(H)$ no espaço de matrizes hermitianas com os elementos de volume $d\mu(U)$, $\prod_n dE_n$, dos autovetores e autovalores, ou seja,

$$d\mu(H) = J d\mu(U) \prod_n dE_n. \quad (4.7)$$

O jacobiano depende apenas do autovalores,

$$J(E_n) = \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta. \quad (4.8)$$

A distribuição de autovalores resultante é dada por:

$$\begin{aligned} P(E_n) &= C_\beta \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta \prod_k e^{-\beta V(E_k)} \\ &= C_\beta \exp \left[-\beta \left(\sum_{i < j} u(E_i, E_j) + \sum_k V(E_k) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

A Eq.(4.9) tem a forma de uma distribuição de Gibbs da mecânica estatística clássica, onde o índice de simetria desempenha o papel do inverso da temperatura e $u(E, E') = \ln|E - E'|$ representa o potencial repulsivo de um par de cargas em um problema eletrostático bidimensional Ref.[71]. Neste problema, temos N cargas nas posições $E_1, E_2, \dots, E_N$ mantidas por um “potencial de confinamento” V que, para ensembles gaussianos, é o do oscilador harmônico. Esse sistema de cargas pontuais em equilíbrio térmico é chamado de gás de Coulomb. A partir da Eq.(4.9), vários resultados podem ser extraídos, como a densidade de autovalores (função de um ponto):

$$\rho = \langle \hat{\rho}(E) \rangle, \quad (4.10)$$

onde $\hat{\rho}(E)$ é a densidade microscópica dada por

$$\hat{\rho}(E) = \sum_{i=1}^N \delta(E - E_i). \quad (4.11)$$

A densidade de autovalores é determinada pelo potencial $V(E)$. No limite de N grande podemos usar a equação de campo médio

$$V(E) = \int \rho(E') \ln|E - E'| dE' + C. \quad (4.12)$$

Para ensembles gaussianos com $V(H = NH^2/4\lambda^2)$, encontramos para todas as classes de simetrias $\beta = 1, 2$ e 4 a seguinte expressão

$$\rho(E) = \frac{N}{2\pi\lambda^2} \sqrt{4\lambda^2 - E^2}. \quad (4.13)$$

O parâmetro λ controla o espaçamento médio $\Delta = \pi\lambda/N$ na origem $E = 0$. A densidade de estados para o ensemble gaussiano é conhecido como lei do semicírculo de Wigner. Esta é uma propriedade dos ensembles gaussianos e não tem nenhuma relevância física já que densidades de estados diferentes são obtidas para outro potenciais. Podemos obter a densidade de autovalores (4.13) numericamente. Partindo de um hamiltoniano real e simétrico, caso $\beta = 1$, cujos elementos são números aleatórios com distribuição gaussiana de média nula e variâncias,

$$\sigma_{kk} = \langle H_{kk}^2 \rangle - \langle H_{kk} \rangle^2 = \frac{2\lambda^2}{N} \quad (4.14)$$

$$\sigma_{kl} = \langle H_{kl}^2 \rangle - \langle H_{kl} \rangle^2 = \frac{\lambda^2}{N}, \quad (4.15)$$

geramos a matriz aleatória, calculamos seus autovalores e fazemos um histograma. Escolhendo $\lambda = 1/2$, os autovalores ficam distribuídos no intervalo $(-1, 1)$ e o limite $N \rightarrow \infty$ é atingido elevando-se a dimensão da matriz. A Fig. (4.2) mostra a densidade de autovalores para uma matriz 6000×6000 .

4.2.2 Pontos Quânticos Abertos

Enquanto um sistema fechado é caracterizado pelos níveis de energia e funções de onda, um sistema aberto conectado a guias é descrito por seus autovalores de transmissão τ_n , os quais são obtidos através da diagonalização da matriz $tt^\dagger$. A matriz de transmissão t , por sua vez, é um dos blocos que constituem a matriz de espalhamento S :

$$S = \begin{pmatrix} r & t \\ t' & r' \end{pmatrix}.$$

A distribuição das matrizes de espalhamento para um ponto quântico aberto depende do tamanho e da transparência dos contatos. Apesar dessa “não universalidade trivial”, a estatística de um ponto quântico caótico é universal no sentido de que não depende da forma ou tamanho do ponto quântico e da concentração de

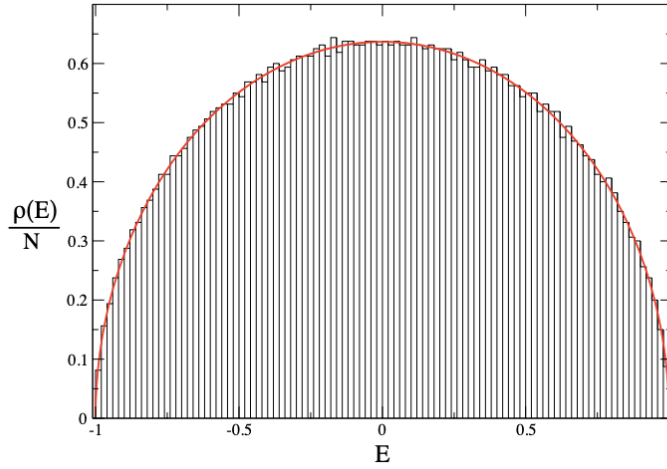


Figura 4.2 Densidade de autovalores para um hamiltoniano pertencente ao EGO com $N = 6000$, confirmando a lei do semicírculo de Wigner (curva vermelha). Figura retirada da Ref. [55]

impurezas. A única condição para a universalidade é que as partículas explorem ergodicamente o espaço de fase antes de saírem da cavidade. Tal condição é satisfeita para um ponto quântico caótico com contatos pontuais. Outra diferença entre TMA das matrizes de espalhamento e a dos níveis de energia é que, ao contrário do hamiltoniano, a matriz S é finita. Por exemplo, para uma cavidade conectada à dois guias que suportam um modo propagante cada, a matriz S é 2×2 .

Há duas maneiras de se obter a TMA para a matriz de espalhamento de um ponto quântico aberto:

- **Abordagem Hamiltoniana:** nesta abordagem há dois métodos diferentes: no primeiro parte-se da TMA da matriz hamiltoniana H , $N_c \times N_c$, da cavidade fechada, sem os guias. Obtém-se, em seguida, a matriz de espalhamento do ponto quântico aberto através de uma relação conhecida como *Fórmula de Mahaux-Weidenmüller*:

$$S(E) = \mathbf{1} - 2\pi i W^\dagger (E - H + i\pi W W^\dagger)^{-1} W, \quad (4.16)$$

onde W é uma matriz não aleatória que descreve o acoplamento com os guias. Como o limite $N_c \rightarrow \infty$ é tomado, a estatística da matriz S é universal, não dependendo do hamiltoniano $\hat{H}$.

O segundo método, consiste em uma teoria de matrizes aleatórias aplicada diretamente à matriz de espalhamento, sem nenhuma referência ao hamiltoniano.

60 CAPÍTULO 4. MATRIZES ALEATÓRIAS E A TÉCNICA DIAGRAMÁTICA

No caso de dois terminais com $N_1 = N_2 = N$, a matriz S pode ser escrita na representação polar Ref.[51]:

$$S = \begin{pmatrix} v_1 & 0 \\ 0 & v_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{1-\tau} & \sqrt{\tau} \\ \sqrt{\tau} & \sqrt{1-\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_3 & 0 \\ 0 & v_4 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

onde τ representa uma matriz diagonal N -dimensional com os autovalores de transmissão τ_a ($a = 1, \dots, N$). Os v_i ($i = 1, \dots, 4$) são matrizes unitárias $N \times N$ arbitrárias para o caso $\beta = 2$. No caso ortogonal, $\beta = 1$, temos as restrições $v_3 = v_1^T$ e $v_4 = v_2^T$. No caso simplético, $\beta = 4$, os autovalores de transmissão são duplamente degenerados, $\tau = \mathbf{diag}(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$, e as matrizes v_i são quatérnions auto-duais $N \times N$ com as restrições $v_3 = \bar{v}_1$ e $v_4 = \bar{v}_2$. A representação polar é natural para o estudo da condutância já que separa os autovalores de transmissão de fatores irrelevantes de fase (as matrizes v_i).

Estamos interessados nas propriedades de um ensemble de sistemas representados por um ensemble de matrizes S . Para cálculos neste ensemble precisamos definir a medida invariante $d\mu(S)$ do espaço das matrizes S . A medida permanece invariante sob um automorfismo de uma dada classe de simetria nela mesma, isto é,

$$d\mu^\beta(S) = d\mu^\beta(S'), \quad (4.18)$$

para $\beta = 2$ temos $S' = U_0 S V_0$, onde U_0 e V_0 são matrizes unitárias fixas. Esta relação define um automorfismo sobre o conjunto das matrizes unitárias. Para $\beta = 1$ temos $V_0 = U_0^T$ e para $\beta = 4$, $V_0 = \bar{U}_0$. O cálculo da medida invariante, embora longo, segue o algoritmo:

1. Definimos o elemento diferencial de arco $ds^2 = \mathbf{Tr}[dS^\dagger dS]$.
2. Identificamos o tensor métrico do espaço através da relação $ds^2 = \sum g_{\mu\nu}(x) \delta x_\mu \delta x_\nu$.
3. Obtemos o elemento de volume a partir da relação $dV = |\det g(x)|^{1/2} \prod x_\mu$.

A forma da medida invariante depende da parametrização escolhida para a matriz S Refs.[51, 52, 53]. No trabalho original de Dyson, a matriz S foi escrita na decomposição autovalor-autovetor

$$S = \Omega \mathbf{diag}(e^{i\phi_1}, \dots, e^{i\phi_N}) \Omega^\dagger, \quad (4.19)$$

onde os números reais ϕ_j estão relacionados aos deslocamentos de fase de espalhamento. A matriz unitária $2N \times 2N$, Σ , tem elementos reais para $\beta = 1$, complexos

4.2. TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS DE PONTOS QUÂNTICOS 51

para $\beta = 2$ e quatérnions reais para $\beta = 4$. Estes são os ensembles circulares de Dyson, cujas medidas estão contidas na expressão

$$d\mu(S) \propto \prod_{a < b} |e^{i\phi_a} - e^{i\phi_b}|^\beta \prod_c d\theta_c d\mu(\Omega). \quad (4.20)$$

• **Abordagem Informacional:** pode-se obter a TMA da matriz de espalhamento, S , sem fazer referência ao hamiltoniano $\hat{H}$. Para tanto, define-se um ensemble de matrizes S , a partir do qual são calculadas as propriedades de um ensemble de sistemas. Sendo $P(S)$ a densidade de probabilidade de encontrar a matriz S no elemento de volume $d\mu(S)$ do espaço de matrizes S , tem-se a seguinte condição de normalização:

$$\int d\mu(S) P(S) = 1. \quad (4.21)$$

Associando a entropia informacional $\mathbf{S}$ à densidade de probabilidade $P(S)$:

$$\mathbf{S} \equiv - \int d\mu(S) P(S) \ln P(S), \quad (4.22)$$

é possível encontrar, através do *princípio de máxima entropia informacional*, a distribuição mais aleatória que obedece ao vínculo estabelecido na Eq.(4.21). O resultado obtido é como segue,

$$P(S) = \text{constante} \quad (4.23)$$

A Eq.(4.23) descreve o ensemble circular de Dyson, apropriado para descrever pontos quânticos caóticos acoplados a guias através de contatos pontuais ideais.

Na presença de outros vínculos, a distribuição $P(S)$ não é mais dada por uma constante. Por exemplo, introduzindo o vínculo

$$\int d\mu(S) S^p P(S) = \overline{S}^p, \quad (4.24)$$

onde $p = 1, 2, \dots$. E maximizando a entropia informacional $\mathbf{S}$ associada a $P(S)$ impondo (4.21) e (4.24), obtém-se:

$$P(S) \propto |\text{Det}(\mathbf{1} - \overline{S}^\dagger S)|^{-\beta(N_1 + N_2 - 1 + 2/\beta)} \quad (4.25)$$

onde N_1 e N_2 são os números de canais abertos nos guias 1 e 2, respectivamente, e $\overline{S}$ é uma matriz subunitária fixa². A Eq.(4.25) é a expressão do núcleo de Poisson, apropriado à descrição de pontos quânticos caóticos que se conectam aos guias através de barreiras de transparência arbitrárias.

² $\overline{S}$ é dita subunitária porque os autovalores de $\overline{S}\overline{S}^\dagger$ são menores do que ou iguais a 1.

4.3 Integrais Gaussianas

Nesta seção seguiremos a Ref.[56].

Medidas gaussianas assumem um papel fundamental em muitos campos: em teoria de probabilidade, como consequência do teorema do limite central, em mecânica quântica, como iremos mostrar, assim como, em teoria quântica de campos. No que se refere ao método diagramático usado para calcular médias, o papel da medida gaussiana é definir regras para as permutações diagramáticas. Sendo assim, apresentaremos aqui como tais regras surgem naturalmente. Para tanto, faremos uma breve revisão de importantes resultados matemáticos envolvendo integrais gaussianas e propriedades de valores esperados da gaussiana. Em particular, apresentaremos a prova do teorema de Wick em sua forma matricial, que será relevante mais a frente.

4.3.1 Função Geratriz

Para discutir propriedades de valores esperados com relação a alguma medida ou distribuição de probabilidade, é conveniente introduzir a função geratriz dos momentos da distribuição. Isso também nos permite definir a função geradora dos cumulantes da distribuição.

Considerando a medida positiva ou a distribuição de probabilidade $\Omega(x_1, x_2, \dots, x_n)$ definida em $\mathbb{R}^n$ e devidamente normalizada. Denota-se por

$$\langle F \rangle \equiv \int d^n x \Omega(\mathbf{x}) F(\mathbf{x}) \quad (4.26)$$

onde

$$d^n x \equiv \prod_{i=1}^n dx_i$$

o valor esperado da função $F(x_1, \dots, x_n)$. E, a normalização é escolhida tal que $\langle 1 \rangle = 1$. Geralmente é conveniente introduzir a transformada de Fourier da distribuição, e, considere aqui um caso especial onde a transformada de Fourier é uma função analítica que também existe para argumentos imaginários. Assim,

$$Z(\mathbf{b}) = \langle e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{x}} \rangle = \int d^n x \Omega(x) e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{x}} \quad (4.27)$$

onde

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n b_i x_i. \quad (4.28)$$

A vantagem dessa definição é que o integrando permanece uma medida positiva para todos os valores reais de $\mathbf{b}$. Em seguida, expandindo o integrando em potências das variáveis b_k , reconhecem-se os coeficientes como valores esperados, momentos da distribuição:

$$Z(\mathbf{b}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{k_1, k_2, \dots, k_l=1}^n b_{k_1} b_{k_2} \dots b_{k_l} \langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_l} \rangle. \quad (4.29)$$

A função $Z(\mathbf{b})$ é assim a geratriz dos momentos da distribuição, isto é, os valores esperados das funções monomiais. Esses valores esperados podem ser obtidos através da diferenciação da função $Z(\mathbf{b})$. Diretamente, diferenciando os dois lados da Eq.(4.27) com respeito a b_k , obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial b_k} Z(\mathbf{b}) = \int d^n x \Omega(\mathbf{x}) x_k e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{x}}. \quad (4.30)$$

Repetindo a diferenciação, obtém-se, no limite $\mathbf{b} = 0$,

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_l} \rangle = \left[\frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} Z(\mathbf{b}) \right]_{\mathbf{b}=0} \quad (4.31)$$

Essa noção é muito útil para o presente trabalho. Sendo assim, por razões pedagógicas, considere o seguinte exemplo: A fim de calcular o valor esperado da função x^2 ,

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 Z(x) dx; \quad (4.32)$$

Seja $\alpha \equiv 2$, então

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(\frac{-x^2}{\alpha}\right) dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha^{-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-x^2}{\alpha}\right) dx = \frac{-\partial}{\partial \alpha^{-1}} \dots = 1 \quad (4.33)$$

4.3.2 Valores esperados gaussianos e o Teorema de Wick

Como consequência do teorema do limite central das probabilidades, a distribuição gaussiana ocupa uma importante posição em todos os fenômenos estocásticos, portanto, em física no geral. Aqui, gostaríamos de relembrar algumas propriedades das integrais gaussianas e de valores esperados gaussianos, dado que serão explorados na exposição do teorema de Wick.

A integral gaussiana será dada da seguinte forma, generalizada para números complexos:

$$Z(\mathbf{A}) = \int d^n x \exp\left(-\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j\right) \quad (4.34)$$

64 CAPÍTULO 4. MATRIZES ALEATÓRIAS E A TÉCNICA DIAGRAMÁTICA

Esta convergirá se a matriz $\mathbf{A}$ com elementos A_{ij} for uma matriz complexa simétrica tal que a parte real seja não-negativa (isso implica que todos os autovalores de $\text{Re } \mathbf{A}$ são não negativos) e nenhum autovalor a_i de $\mathbf{A}$ desaparece:

$$\text{Re } \mathbf{A} \geq 0, \quad a_i \neq 0 \quad (4.35)$$

Sendo assim, muitos métodos permitem provar que

$$Z(\mathbf{A}) = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2}. \quad (4.36)$$

- Prova do resultado (4.36) para **Matrizes Reais**

A integral gaussiana geral unidimensional pode ser calculada facilmente e, para um $a > 0$, encontra-se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ax^2/2 + bx) = \sqrt{2\pi/a} e^{b^2/2a}. \quad (4.37)$$

Sabe-se que qualquer matriz real e simétrica pode ser diagonalizada por uma transformação ortogonal e a matriz $\mathbf{A}$ da Eq.(4.34) pode assim ser escrita como o produto de outras matrizes: $\mathbf{A} = \mathbf{O} \mathbf{D} \mathbf{O}^T$, onde a matriz $\mathbf{O}$ é ortogonal e a matriz $\mathbf{D}$ com elementos D_{ij} diagonais,

$$\mathbf{O}^T \mathbf{O} = \mathbf{1}, \quad D_{ij} = \delta_{ij} a_i. \quad (4.38)$$

Fazendo-se uma mudança de variáveis, $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{y}$, na Eq.(4.34), obtém-se:

$$x_i = \sum_{j=1}^n O_{ij} y_j \Rightarrow \sum_{i,j} x_i A_{ij} x_j = \sum_{i,j,k} x_i O_{ik} a_k O_{jk} x_j = \sum_i a_i y_i^2 \quad (4.39)$$

E, o correspondente jacobiano é $J = |\det \mathbf{O}| = 1$. Então, a integral pode ser fatorizada do seguinte modo

$$Z(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^n \int dy_i e^{-a_i y_i^2/2}. \quad (4.40)$$

A matriz $\mathbf{A}$ é positiva, com todos os autovalores a_i positivos, portanto, a integral converge. Dos resultados acima, infere-se que

$$Z(\mathbf{A}) = (2\pi)^{n/2} (a_1 a_2 \dots a_n)^{-1/2} = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2}. \quad (4.41)$$

- Prova do resultado (4.36) para uma **Integral Gaussiana Geral**

De posse do resultado para matrizes reais (calculado acima), é possível calcular o valor de uma integral gaussiana generalizada:

$$Z(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \int d^n x \exp \left(- \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) \quad (4.42)$$

Para calcular $Z(\mathbf{A}, \mathbf{b})$ olhamos para o mínimo da forma quadrática,

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j - \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) = \sum_{j=1}^n A_{kj} x_j - b_k = 0. \quad (4.43)$$

Introduzindo a matriz inversa $\Delta = \mathbf{A}^{-1}$ pode-se escrever a solução como sendo

$$x_i = \sum_{j=1}^n \Delta_{ij} b_j \quad (4.44)$$

e, após uma mudança de variáveis, $x_i \mapsto y_i$,

$$x_i = \sum_{j=1}^n \Delta_{ij} b_j + y_i, \quad (4.45)$$

a integral se torna

$$Z(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \exp \left[\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \int d^n y \exp \left(- \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} y_i A_{ij} y_j \right) \quad (4.46)$$

A mudança de variável faz com que a integral acima se reduza à Eq.(4.34). Assim, pode-se concluir que

$$\mathbf{Z}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = (2\pi)^{n/2} (\det \mathbf{A})^{1/2} \exp \left[\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \quad (4.47)$$

Vale ressaltar que integrais gaussianas têm uma propriedade notável: após a integração sobre uma variável, encontramos novamente uma integral gaussiana. Essa estrutura explica o porquê da estabilidade da distribuição de probabilidade gaussiana e também algumas propriedades da técnica diagramática, tema central do presente capítulo.

4.3.2.1 Teorema de Wick

Quando a matriz $\mathbf{A}$ é real e positiva, o integrando da gaussiana pode ser considerado uma medida positiva ou a distribuição de probabilidade em $\mathbb{R}^n$, o

que pode ser usado para calcular valores esperados de funções de n variáveis x_i ,

$$\langle F(\mathbf{x}) \rangle \equiv \mathcal{N} \int d^n x F(\mathbf{x}) \exp \left(- \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right) \quad (4.48)$$

onde a normalização $\mathcal{N}$ é determinada pela condição $\langle 1 \rangle = 1$:

$$\mathcal{N} = Z^{-1}(\mathbf{A}, 0) = (2\pi)^{-n/2} (\det \mathbf{A})^{1/2}. \quad (4.49)$$

A função

$$Z(\mathbf{A}, \mathbf{b}) / Z(\mathbf{A}, 0) = \langle e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{x}} \rangle, \quad (4.50)$$

é a geratriz dos momentos da distribuição, onde $Z(\mathbf{A}, \mathbf{b})$ é a função da Eq.(4.42). Valores esperados são, desse modo, obtidos diferenciando a Eq.(4.50) com respeito a variável b_i :

$$\langle x_{k_1}, \dots, x_{k_l} \rangle = (2\pi)^{-n/2} (\det \mathbf{A})^{1/2} \left[\frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} Z(\mathbf{A}, \mathbf{b}) \right]_{\mathbf{b}=0} \quad (4.51)$$

e, substituindo $Z(\mathbf{A}, \mathbf{b})$, explicitamente, pela Eq.(4.47),

$$\langle x_{k_1} \dots x_{k_l} \rangle = \frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} \exp \left[\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \quad (4.52)$$

De forma mais geral, se $F(\mathbf{x})$ é uma série de potências na variável x_i , seu valor esperado é dado pela identidade

$$\langle F(\mathbf{x}) \rangle = F \left(\frac{\partial}{\partial b} \right) \exp \left[\sum_{i,j} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right]_{\mathbf{b}=0} \quad (4.53)$$

A identidade (4.52) leva ao teorema de Wick.

Teorema 4.3.1 (Teorema de Wick). *Toda vez que diferenciamos na r.h.s geramos um fator exponencial $\mathbf{b}$. Devemos diferenciar esse fator b em um momento posterior, caso contrário a contribuição correspondente a tal fator some quando fazemos $\mathbf{b}$ igual a zero. Conclui-se que o valor esperado do produto $x_{k_1} \dots x_{k_l}$ com o peso gaussiano proporcional a $\exp \left(-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right)$ é dado pela seguinte expressão: pares com todas as possibilidades de permutações de índices $k_1 \dots k_l$ (l deve ser par, caso contrário, o momento desaparece). Para cada par $k_p k_q$, podemos associar um elemento $\Delta_{k_p k_q}$ da matriz $\Delta = A^{-1}$. Então,*

$$\begin{aligned} \langle x_{k_1} \dots x_{k_l} \rangle &= \sum_{\text{permutações } P \text{ de } k_1 \dots k_l} \Delta_{k_{P_1} k_{P_2}} \cdots \Delta_{k_{P_{l-1}} k_{P_l}} \\ &= \sum_{\text{permutações } P \text{ de } I(i,j), (k,l)} \prod \langle x_{ij} x_{kl} \rangle \end{aligned} \quad (4.54)$$

As equações acima são propriedades de todas as medidas gaussianas centradas, ou seja, $\langle x_i \rangle = 0$. Elas são conhecidas com o nome Teorema de Wick. Este foi adaptado a mecânica quântica e a teoria quântica de campos, e forma a base da teoria de perturbação.

Mais uma vez por razões pedagógicas, considere o seguinte *exemplo*: Vamos calcular as seguintes médias usando o teorema de Wick e as identidades de integrais gaussianas definidas acima: (a.) $\langle x_k \rangle$ (b.) $\langle x_k x_l \rangle$ (c.) $\langle x_k x_l x_w \rangle$ (d.) $\langle x_k x_l x_w x_z \rangle$

Fazendo uso da Eq.(4.52):

$$\begin{aligned}\langle x_k \rangle &= \frac{\partial}{\partial b_k} \exp \left[\sum_{i,j=1} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right]_{\mathbf{b}=0} \\ \langle x_k \rangle &= \exp \left[\sum_{i,j} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j \right] \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1} \delta_{ik} \Delta_{i,j} b_j + \sum_{i,j=1} b_i \Delta_{i,j} \delta_{jk} \right]_{\mathbf{b}=0} \\ \langle x_k \rangle &= \exp \left[\sum_{i,j=1} \frac{1}{2} b_i \Delta_{i,j} b_j \right] \left[\sum_{k,j=1} \Delta_{kj} b_j \right]_{\mathbf{b}=0} = 0\end{aligned}$$

Utilizando o teorema de Wick de forma direta, encontramos

$$\langle x_k x_l \rangle = \sum_{k,l} \Delta_{kl},$$

onde o termo Δ_{kl} representa a única permutação de índices possível. E, obviamente, dado que o número de termos é ímpar,

$$\langle x_k x_l x_w \rangle = 0.$$

Por fim,

$$\begin{aligned}\langle x_k x_l x_w x_z \rangle &= \sum_{k,w} \Delta_{kw} \sum_{l,z} \Delta_{lz} + \sum_{l,w} \Delta_{lw} \sum_{k,z} \Delta_{kz} + \sum_{k,l} \Delta_{kl} \sum_{w,z} \Delta_{wz} \\ &= \sum_{k,w,l,z} \Delta_{kw} \Delta_{lz} + \sum_{k,w,l,z} \Delta_{kz} \Delta_{lw} + \sum_{k,w,l,z} \Delta_{kl} \Delta_{wz}\end{aligned}$$

Usando o resultado para $\langle x_i x_j \rangle$, tem-se:

$$\langle x_k x_l x_w x_z \rangle = \sum_{k,w,l,z} \langle x_k x_w \rangle \langle x_l x_z \rangle + \sum_{k,w,l,z} \langle x_l x_w \rangle \langle x_k x_z \rangle + \sum_{k,w,l,z} \langle x_k x_l \rangle \langle x_w x_z \rangle.$$

Finalmente,

$$\langle x_k x_l x_w x_z \rangle = \sum_{k,w,l,z} \prod_{(k,l)(w,z)} \langle x_k x_l x_w x_z \rangle.$$

Do teorema de Wick e do exemplo acima apresentado, pode-se concluir que:

(a.) A média de uma função polinomial com peso gaussiano diferirá de zero apenas no caso de cada expoente dos monômios ser par, ou, de forma generalizada, para uma função $f(U) = U_{a_1 b_1} \dots U_{a_m b_m} U_{\alpha_1 \beta_1}^* \dots U_{\alpha_n \beta_n}$, a média $\langle f(U) \rangle$ é zero a menos que $n=m$.

(b.) Nessa média todas as permutações de índices contribuirão com um peso específico, e, no exemplo anterior (item d.), as permutações cíclicas que contribuem podem ser representadas diagramaticamente.

Para citar outro exemplo de estruturas de permutações cíclicas, consideremos o grupo simétrico S_3 de 1,2,3. Nesse caso, existem seis permutações possíveis com as respectivas estruturas cíclicas escritas em parênteses: (a.) $1, 2, 3 \rightarrow (1)(2)(3)$, (b.) $1, 3, 2 \rightarrow (1)(23)$, (c.) $2, 1, 3 \rightarrow (3)(12)$, (d.) $(2, 3, 1) \rightarrow (123)$, (e.) $3, 1, 2 \rightarrow (132)$ e (f.) $3, 2, 1 \rightarrow (2)(13)$. Na permutação (b), por exemplo, da estrutura ordenada original, trocamos a segunda entrada pela terceira e a terceira pela segunda $2 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ (23) e a primeira se manteve (1). Portanto, a permutação **b** tem dois ciclos c_k , $k = 1, 2$ sendo o (23) de comprimento $c_2 = 2$ e o (1) de comprimento $c_1 = 1$. Esses dois ciclos são chamados de disjuntos por não terem interseção. Note-se que $\sum_k c_k = 3$ para as seis permutações possíveis.

A generalização do exemplo anterior para o caso de S_n pode ser estudo em detalhes na Ref.[73]. Destaca-se que S_n tem uma única fatorização disjunta (ciclos) de comprimentos $c_1, c_2, \dots, c_k$ com $n = \sum_k c_k$. Sendo assim, cada permutação (representada por um diagrama), terá um peso específico, e este dependerá dos comprimentos dos ciclos da fatoração PP' , ou seja, o peso de cada permutação $V_{P,P'} = V_{c_1, c_2, \dots, c_k}$.

Por fim, sinterizando o teorema de Wick e as condições (a.), (b.), (c.) em uma única equação que represente a média de uma função polinomial genérica, tem-se:

$$\langle U_{a_1 b_1} \dots U_{a_m b_m} U_{\alpha_1 \beta_1}^* \dots U_{\alpha_n \beta_n} \rangle = \delta_{mn} \sum_{P, P'} V_{P, P'} \prod_{j=1}^n \delta_{a_j \alpha_{P(j)}} \delta_{b_j \beta_{P'(j)}} \quad (4.55)$$

Para usarmos explicitamente a fórmula acima, vamos considerar o caso de $n = m = 2$. A soma sobre todas as permutações P e P' contempla a identidade, $id = [(1, 2) \rightarrow (1, 2)]$, e a permutação de troca, $ex = [(1, 2) \rightarrow (2, 1)]$. Portanto, a Eq.(4.55) nos leva a concluir

$$\begin{aligned} \langle U_{a_1 b_1} U_{a_2 b_2} U_{\alpha_1 \beta_1}^* U_{\alpha_2 \beta_2}^* \rangle &= V_{id, id} \delta_{a_1 \alpha_1} \delta_{b_1 \beta_1} \delta_{a_2 \alpha_2} \delta_{b_2 \beta_2} + V_{ex, id} \delta_{a_1 \alpha_2} \delta_{b_1 \beta_1} \delta_{a_2 \alpha_1} \delta_{b_2 \beta_2} \\ &+ V_{id, ex} \delta_{a_1 \alpha_1} \delta_{b_1 \beta_2} \delta_{a_2 \alpha_2} \delta_{b_2 \beta_1} + V_{ex, ex} \delta_{a_1 \alpha_2} \delta_{b_1 \beta_2} \delta_{a_2 \alpha_1} \delta_{b_2 \beta_1}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

A permutação $P^{-1}P'$ que corresponde ao $P = P' = id$ é novamente a identidade da permutação: $P^{-1}P' = id = [(1, 2) \rightarrow (1, 2)]$. Essa permutação cíclica tem a

seguinte fatoração $id = (1 \rightarrow 1)(2 \rightarrow 2)$, então, $P^{-1}P'$ fatoriza em dois ciclos de comprimento um. Portanto, a estrutura cíclica de $P^{-1}P'$ é 1, 1, e $V_{id,id} = V_{1,1}$. O segundo termo da Eq. (2.47), correspondente ao $P = ex$ e $P' = id$ tem $P^{-1}P' = ex = [(1, 2) \rightarrow (2, 1)]$, que fatoriza em um ciclo de comprimento dois, $ex = (1 \rightarrow 2 \rightarrow 1)$. Desse modo, a estrutura cíclica de $P^{-1}P'$ é 2, e $V_{ex,id} = V_2$. E, tratando os dois outros termos de forma similar, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle U_{a_1 b_1} U_{a_2 b_2} U_{\alpha_1 \beta_1}^* U_{\alpha_2 \beta_2}^* \rangle &= V_{1,1} \delta_{a_1 \alpha_1} \delta_{b_1 \beta_1} \delta_{a_2 \alpha_2} \delta_{b_2 \beta_2} + V_2 \delta_{a_1 \alpha_2} \delta_{b_1 \beta_1} \delta_{a_2 \alpha_1} \delta_{b_2 \beta_2} \\ &+ V_2 \delta_{a_1 \alpha_1} \delta_{b_1 \beta_2} \delta_{a_2 \alpha_2} \delta_{b_2 \beta_1} + V_{1,1} \delta_{a_1 \alpha_2} \delta_{b_1 \beta_2} \delta_{a_2 \alpha_1} \delta_{b_2 \beta_1}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

No caso mais geral, S_n , os coeficientes $V_{1,\dots,1}$ vão se referir as permutações idênticas, $P = P'$, ou seja, contrações gaussianas, entre pares, das matrizes U e U^* . Coeficientes $V_{c_1,\dots,c_k}$ com algum $c_j \neq 1$ fornece contribuições não-gaussianas.

O coeficientes V são determinados pela relação de recorrência Ref.[72]

$$NV_{c_1,\dots,c_k} + \sum_{p+q=c_1} V_{p,q,c_2,\dots,c_k} + \sum_{j=2}^k c_j V_{c_1+c_j,c_2,\dots,c_{j-1},\dots,c_k} = \delta_{c_1 1} V_{c_2,\dots,c_k}, \quad (4.58)$$

com $V_0 \equiv 1$. Outra característica do método é a possibilidade de expandir as relações de recorrência em potências de N^{-1} . Por exemplo, na Ref.[74], encontra-se a seguinte relação

$$V_{c_1,\dots,c_k} = \prod_{j=1}^k V_{c_j} + \mathcal{O}(N^{k-2n-2}), \quad (4.59)$$

$$V_c = \frac{1}{c} N^{1-2c} (-1)^{c-1} \binom{2c-2}{c-1} + \mathcal{O}(N^{-1-2c}) \quad (4.60)$$

($c^{-1} \binom{2c-2}{c-1}$ são os números de Catalan). Por exemplo, o coeficiente $V_{1,\dots,1} = N^{-n} + \mathcal{O}(N^{-n-2})$. A aproximação gaussiana permite tomar todos os V 's iguais a zero, exceto $V_{1,\dots,1}$ definido como N^{-n} . Os coeficientes $V_{c_1,\dots,c_k}$ determinam os momentos de U . Similarmente, os coeficientes $W_{c_1,\dots,c_k}$ determinam os cumulantes de U . Esses são obtidos dos momentos por subsequente subtração de todas as fatorações possíveis nos cumulantes de baixo grau. Por exemplo,

$$\begin{aligned} W_{c_1} &= V_{c_1}, \\ W_{c_1,c_2} &= V_{c_1,c_2} - W_{c_1} W_{c_2}, \\ W_{c_1,c_2,c_3} &= V_{c_1,c_2,c_3} - W_{c_1} W_{c_2,c_3} - W_{c_2} W_{c_1,c_3} - W_{c_1} W_{c_2} W_{c_3}. \end{aligned}$$

CAPÍTULO 4. MATRIZES ALEATÓRIAS E A TÉCNICA DIAGRAMÁTICA

E a relação de recorrência (4.58) para V implica em uma relação para W

$$NW_{c_1, \dots, c_k} + \sum_{p+q=c_1} W_{p,q,c_2, \dots, c_k} + \sum_{j=2}^k c_j W_{c_1+c_j, c_2, \dots, c_{j-1}, c_{j+1}, \dots, c_k} \\ + \sum_{p+q=c_1} \sum_{l=1}^k \frac{1}{(l-1)!(k-l)!} \sum_P W_{p, c_{P(2)}, \dots, c_{P(l)}} W_{q, c_{P(l+1)}, c_{P(k)}} = 0, \quad (4.61)$$

com $W_0 \equiv 1$ e P a permutação de $2, \dots, k$. Expandindo em potências de N^{-1} , obtém-se

$$W_{c_1, \dots, c_k} = 2^k N^{-2n-k+2} (-1)^{n+k} \frac{(2n+k-3)!}{(2n)!} \prod_{j=1}^k \frac{(2c_j-1)!}{(c_j-1)!^2} + \mathcal{O}(N^{-2n-k}) \quad (4.62)$$

Note que $W_{c_1, \dots, c_k}$ diminui com o crescimento do número de ciclos k , comportamento oposto ao de $V_{c_1, \dots, c_k}$

Em princípio, as relações de recorrência permitem calcular exatamente a média de qualquer função polinomial U . Contudo, o cálculo das funções recursivas para os cumulantes é bastante delicado e cresce em complexidade ao aumentarmos o número de termos no produto de matrizes unitárias. Como veremos, para ensembles circulares, haverá um número infinito de produtos de matrizes U para certas classes de problemas. Nesse contexto, surge uma ferramenta auxiliar a integração no grupo unitário, tema da próxima seção.

4.4 Técnica Diagramática

$$\begin{aligned} U_{ab} &= \bullet \cdots \cdots \circ \\ U_{\alpha\beta}^* &= \bullet \cdots \cdots \circ \\ A_{ij} &= \xrightarrow{A} \\ \delta_{ab} &= \text{—} \end{aligned}$$

Figura 4.3 Representação diagramática de (a.) matrizes unitárias U_{ab} e U_{ab}^* , (b.) eventual matriz fixa presente no argumento da média no ensemble de matrizes aleatórias e (c.) as funções δ_{ij} de Kronecker que contraem os índices das matrizes unitárias e fixam os tipos de permutação. Figura retirada da Ref.[72]

O método diagramático de integração no grupo unitário consiste em representar a Eq.(4.55) em termos de diagramas com topologias caracterizando as permutações possíveis. A contribuição de cada diagrama será dada pelas equações de recorrência apresentadas na seção anterior. O diagrama representará os seguintes elementos matemáticos: (a) As matrizes U_{ab} e $U_{\alpha\beta}^*$, (b) As funções δ_{ij} de contrações de índices e (c) Eventuais matrizes com entradas A_{ij} presentes em $f(U)$. A representação será como na Fig.(4.3)

Os diagramas representam os elementos das matrizes U_{ab} e $U_{\alpha\beta}^*$ por linhas pontilhadas na horizontal inferior e superior, respectivamente. Nos extremos de cada linha tracejada haverá dois pontos, um preto representando os primeiros índices (a e α), e um branco representando os segundos índices (b e β). A matriz fixa A_{ij} será representada por uma linha sólida orientada, apontando do primeiro para o segundo índice. As funções δ_{ij} serão representadas por linhas finas e contínuas conectando pontos da linha superior e inferior, ou seja, representarão as respectivas contrações do ponto i (na linha superior) com o ponto j (na linha inferior).

Seguindo a Ref.[72], consideremos o cálculo das médias das funções $f(U) = AUBU^\dagger$ e $g(U) = AUBU^\dagger CUDU^\dagger$ para ilustrar o método. Tais funções estão representadas diagramaticamente na Fig.(4.4). As médias dessas funções consistem em somar sobre todas as permutações P e P' . As permutações são geradas desenhando-se linhas finas ligando os pontos pretos de U e os pontos pretos de $U^\dagger$. Para encontrar as contribuições das permutações de P e P' em $\langle f(U) \rangle$, precisamos (a.) determinar a estrutura cíclica da permutação $P^{-1}P'$, e (b.) somar sobre todos os índices das matrizes fixas (não-aleatórias) A .

Vamos considerar explicitamente o cálculo da média de $f(U)$ como segue Ref.[32]:

$$\begin{aligned} \langle f(U) \rangle &= \langle \text{Tr}(AUBU^\dagger) \rangle \\ &= \sum_{i,j,k,l} A_{ij} B_{kl} \langle U_{jk} U_{il}^* \rangle \\ &= \sum_{i,j} A_{ii} B_{jj} V_1 = V_1 \text{Tr}(A) \text{Tr}(B) \end{aligned} \quad (4.63)$$

onde usamos as contrações para eliminar duas das quatro somas. Esse procedimento algébrico pode ser implementado via método diagramático considerando todas as combinações de pontos da mesma cor (contração de índices) na Fig.(4.4). Por exemplo, para a função $f(U)$, podemos mostrar que todas as possibilidades estão desenhadas na Fig.(4.5).

(a.) Um circuito k alternado entre linhas pontilhadas e linhas contínuas significa que houve combinação de índices gerando o produto das entradas correspondentes.

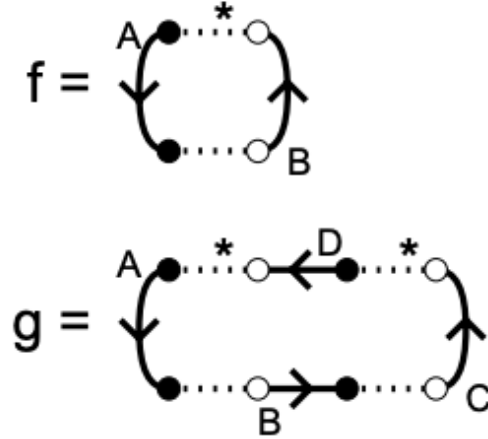


Figura 4.4 Representação diagramática de duas funções simples usadas para o cálculo de médias no ensemble unitário. Figura retirada da Ref.[72]

Todos os índices devem se combinar dessa forma gerando um produto final e a correspondente permutação $P^{-1}P'$. Um circuito k com dois pontos pretos e dois brancos tem comprimento $c_k = 1$. O aumento de pontos brancos e/ou pretos no ciclo indica o aumento no número de permutações. Tais ciclos são chamados, segundo a Ref.[72], de *ciclos-U* e o comprimento do ciclo c_k é dado por metade do número de linhas pontilhadas no ciclo. No único diagrama de $\langle f(U) \rangle$ da Fig.(4.5), existe apenas um *ciclo-U* de comprimento $c_1 = 1$. Portanto, o peso desse diagrama é dado por V_1 . No primeiro diagrama de $\langle g(U) \rangle$ da Fig.(4.5), existem dois *ciclos-U* ambos com comprimento $c_1 = 1$, ou seja, diagrama com peso $V_{1,1}$.

(b.) O traço sobre os elementos de A é feito por inspeção dos circuitos fechados no diagrama que consistem de linhas sólidas grossas e finas, alternadamente. Também seguindo a Ref.[72], chamaremos tais circuitos de *ciclos-T*. Um *ciclo-T* contendo matrizes $A^{(1)}, \dots, A^{(k)}$ nessa ordem, dará origem ao $\text{Tr} A^{(1)} \dots A^{(k)}$. Se a linha sólida orientada correspondente à matriz A é contabilizada na direção oposta, aquela deve ser contabilizada com a transposta, A^T . Por exemplo, o único diagrama de $\langle f(U) \rangle$ da Fig.(4.5) tem dois *ciclos-T* resultantes em $\text{Tr}(A) \text{Tr}(B)$. O segundo diagrama de $\langle g(U) \rangle$ da Fig.(4.5) tem um ciclo T, resultando em $\text{Tr}(ABCD)$.

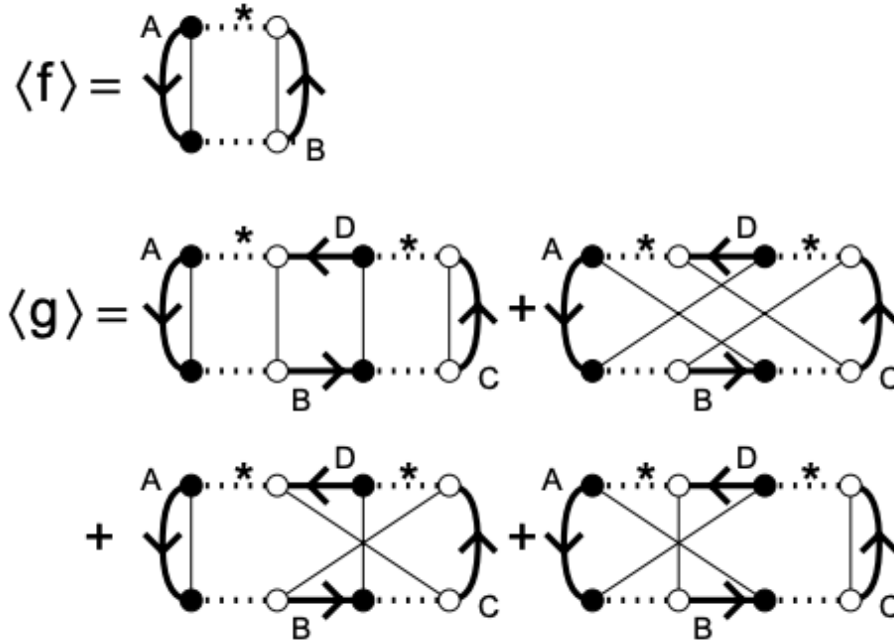


Figura 4.5 Todas as possíveis contrações de índices conforme a Eq.(4.55) aplicadas aos dois tipos especiais de funções de matrizes unitárias. Figura retirada da Ref.[72]

A combinação de ciclos U e de ciclos T nos diagramas resulta nas médias

$$\begin{aligned} \langle f(U) \rangle &= V_1 \text{Tr}(A) \text{Tr}(B) \\ \langle g(U) \rangle &= V_{1,1} [\text{Tr}(A) \text{Tr}(BD) \text{Tr}(C) + \text{Tr}(ADCB)] + V_2 [\text{Tr}(A) \text{Tr}(BDC) + \text{Tr}(ADB) \text{Tr}(C)] \end{aligned} \quad (4.64)$$

onde $V_1 = 1/N$, $V_{1,1} = 1/(N^2 - 1)$ e $V_2 = 1/[N(N^2 - 1)]$ (Apêndice A).

Os dois exemplos anteriores podem ser generalizados para um número arbitrariamente grande de diagramas, gerando as seguintes regras para o cálculo da função (4.55) no limite semiclássico:

1. A função geral que precede o cálculo das médias é desenhada conforme o diagrama da Fig.(4.3);
2. Para o cálculo das médias, emparelhe em pares todos os pontos pretos da linha superior com os da linha inferior e faça o mesmo para os pontos brancos;
3. Todos os circuitos com alternância entre linhas pontilhadas e linha contínuas finas corresponderão a ciclos U de comprimento c_k igual à metade do número

CAPÍTULO 4. MATRIZES ALEATÓRIAS E A TÉCNICA DIAGRAMÁTICA

de pontos no circuito. O número de circuitos é igual ao número de índices no coeficiente V e os seus comprimentos aparecerão explicitamente como $V_{c_1, \dots, c_k}$. Para fatorar o peso V em cumulantes, basta separar os ciclos U em grupos de comprimentos $c_1, c_2, \dots, c_p$ com respectivo peso em cumulantes dados por $W_{c_1, \dots, c_p}$;

4. Cada circuito com alternância entre linhas contínuas sólidas (com setas) e linhas contínuas finas forma um ciclo T com sentido anti-horário de traços sobre as matrizes A .

Considerando todas as possíveis combinações de diagramas ou, equivalentemente, de permutação na Eq.(4.55), tem-se a média exata de qualquer função de matrizes unitárias. No entanto, o número de diagramas pode crescer muito para funções arbitrárias e a expansão semiclássica (N grande) se faz necessária no sentido de reduzir o número de diagramas. Um diagrama que contenha l ciclos T e k ciclos U de comprimento total n particionados em g grupos tem uma ordem em N características. Cada traço desse diagrama tem ordem N e o peso W pode ser expandido no limite semiclássico de acordo com Eq.(4.62). Para esse diagrama arbitrário, a ordem em N é dada por $N^{2g+l-k-2n}$, ou seja, os diagramas que mais contribuem são os que tem $g = k$, considerando que o número de grupos é sempre menor que o número de ciclos k . Nesse caso, o número total de ciclos $k + l$ é máximo. Concluimos que, na expansão semiclássica, os diagramas são classificados conforme o número de ciclos. O número de ciclos estabelece um critério para a correspondente ordem da expansão em N^{-1} de forma que diagramas com mais ciclos determinam contribuições maiores para o cálculo perturbativo. Dessa forma, os que mais contribuem são os que determinam partições de ciclos U em grupos de um único ciclo, chamados de diagramas de escada ou difusons.

Concluimos essa seção com mais um exemplo simples, o qual é o cálculo da variância $f = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$ da função $f(U) = \text{Tr}(AUBU^\dagger)$. Diagramaticamente, calcula-se $\langle f^2 \rangle$ como na Fig.(4.6), resultando em:

$$\begin{aligned} \langle f^2 \rangle = V_{1,1} & \left[(\text{Tr}(A))^2 (\text{Tr}(B))^2 + \text{Tr}(A^2) \text{Tr}(B^2) \right] \\ & + W_2 \left[\text{Tr}(A^2) (\text{Tr}(B))^2 + (\text{Tr}(A))^2 \text{Tr}(B^2) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \implies \text{var } f = W_{1,1} & \left[(\text{Tr}(A))^2 (\text{Tr}(B))^2 + \text{Tr}(A^2) \text{Tr}(B^2) \right] \\ & + W_1^2 \text{Tr}(A^2) \text{Tr}(B^2) + W_2 \left[\text{Tr}(A^2) (\text{Tr}(B))^2 + (\text{Tr}(A))^2 \text{Tr}(B^2) \right] \end{aligned}$$

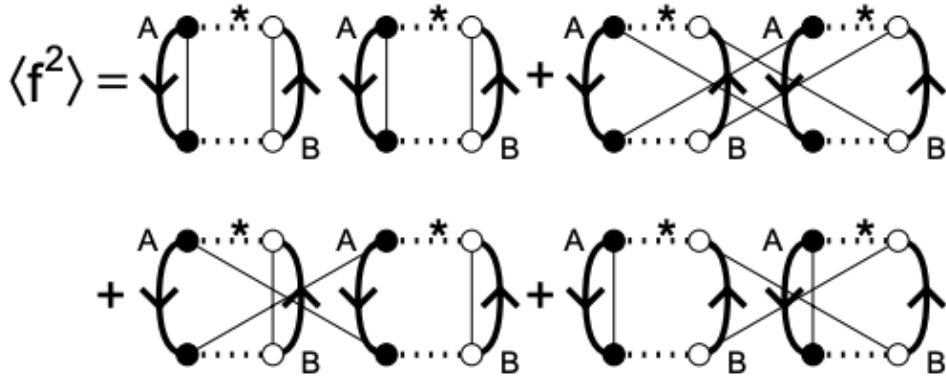


Figura 4.6 Representação diagramática de $\langle f^2 \rangle$. Figura retirada da Ref.[72]

Se considerarmos a ordem em N das várias contribuições, constataremos que os principais termos $\mathcal{O}(N^2)$ de $\langle f^2 \rangle$ ($l = 4$, $g=k=2$, correspondendo a 6 ciclos e a partição dos ciclos U em dois grupos de ciclos unitários), são cancelados por $\langle f \rangle^2$. Esse cancelamento exato é possível, pois a principal contribuição de $\langle f^2 \rangle$ é desconectado: cada ciclo T , e cada grupo de ciclos U pertencem inteiramente a um dos dois fatores $\text{Tr}(AUBU^\dagger)$ de f^2 . Apenas diagramas conectados contribuem para a variância de f . Os diagramas conectados são de ordem 1 ($k+l=4$ e $g=k$ ou $k+l=6$ e $g=k-1$). Eles resultam na variância

$$\begin{aligned} \text{var } f = & W_{1,1}(\text{Tr}(A))^2(\text{Tr}(B))^2 + W_1^2 \text{Tr}(A^2) \text{Tr}(B^2) \\ & + W_2 \left[\text{Tr}(A^2)(\text{Tr}(B))^2 + (\text{Tr}(A))^2 \text{Tr}(B^2) \right] + \mathcal{O}(N^{-1}). \end{aligned}$$

4.4.1 Integração de matrizes unitárias simétricas

Na presença de simetria de reversão temporal, a matriz de espalhamento S é, além de unitária, simétrica: $SS^\dagger = 1, S = S^T$. Tal vínculo adicional se traduz em regras diagramáticas sutilmente diferentes no que se refere aos tipos de contrações (ou linhas finas conectando os diagramas). O ensemble de matrizes unitárias e simétricas uniformemente distribuídas é conhecido como ensemble circular ortogonal (COE) [32, 72]. Médias de matrizes U unitárias e simetrias sobre o COE podem ser computadas de duas formas. Uma delas é substituindo $U = VV^T$, com a matriz V uniformemente distribuída sobre o grupo unitário, este modo tem a vantagem de permitir que usemos as mesmas fórmulas usadas para médias sobre o CUE, contudo, carrega a desvantagem do número de matrizes U ser dobrado. Outro modo, mais eficiente, é usar fórmulas específicas para o COE, como discutiremos a seguir.

76 CAPÍTULO 4. MATRIZES ALEATÓRIAS E A TÉCNICA DIAGRAMÁTICA

A média de funções polinomiais sobre o COE tem a seguinte estrutura:

$$\langle U_{a_1 a_2} \dots U_{a_{2n-1} a_{2n}} U_{\alpha_1 \alpha_2}^* \dots U_{\alpha_{2m-1} \alpha_{2m}}^* \rangle = \delta_{nm} \sum_P V_P \prod_{j=1}^{2n} \delta_{a_j \alpha_{P(j)}}. \quad (4.65)$$

A soma é sobre todas as permutações P dos números $1, \dots, 2n$. Pode-se decompor P como

$$P = \left(\prod_{j=1}^n T_j \right) P_e P_o \left(\prod_{j=1}^n T'_j \right) \quad (4.66)$$

onde T_j e T'_j permutam os números $2j-1$ e $2j$, e $P_e(P_o)$ permuta números n par (ímpar). Devido a $U_{ab} = U_{ba}$, o coeficiente do momento V_P depende apenas da estrutura cíclica da estrutura $c_1, \dots, c_k$ de $P_e^{-1} P_o$ Ref.[72], então, deve-se escrever $V_{c_1, \dots, c_k}$ ao invés de V_P .

Para o COE, os coeficientes de momento obedecem a seguinte relação de recursão:

$$(N + c_1) V_{c_1, \dots, c_k} + \sum_{p+q=c_1} V_{p, q, c_2, \dots, c_k} + 2 \sum_{j=2}^k c_j V_{c_1+c_j, c_2, \dots, c_{j-1}, c_{j+1}, \dots, c_k} = \delta_{c_1 1} V_{c_2, \dots, c_k} \quad (4.67)$$

com $V_0 \equiv 1$, como na relação de recursão para o CUE. A expansão semiclássica dos pesos é dada pela equação

$$V_{c_1, \dots, c_k} = \prod_{j=1}^k V_{c_j} + \mathcal{O}(N^{k-2n-2}) \quad (4.68)$$

$$V_c = \frac{1}{c} N^{1-2c} (-1)^{c-1} \binom{2c-2}{c-1} - N^{-2c} (-4)^{c-1} + \mathcal{O}(N^{-1-2c}) \quad (4.69)$$

Essa expansão dos pesos, V_c , tem um termo a mais de ordem N^{-2c} em relação à expansão para CUE devido à simetria. A relação de recursão para os coeficientes dos cumulantes W é

$$(N + c_1) W_{c_1, \dots, c_k} + \sum_{p+q=c_1} W_{p, q, c_2, \dots, c_k} + 2 \sum_{j=2}^k c_j W_{c_1+c_j, c_2, \dots, c_{j-1}, c_{j+1}, \dots, c_k} + \sum_{p+q=c_1} \sum_{l=1}^k \frac{1}{(l-1)!(k-l)!} \sum_P W_{p, c_{P(2)}, \dots, c_{P(l)}} W_{q, c_{P(l+1)}, c_{P(k)}} = 0. \quad (4.70)$$

Os coeficiente $V_{c_1, \dots, c_k}$ e $W_{c_1, \dots, c_k}$ estão listados no apêndice A.

Para a representação diagramática, usa-se novamente as regras de substituição da Fig.(4.3). Contudo, a segunda regra diagramática muda para o caso do COE,

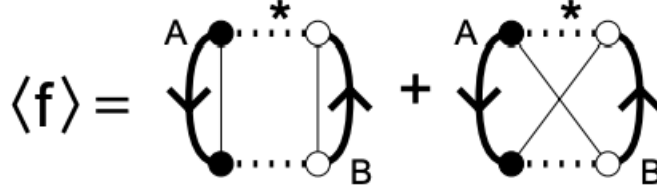


Figura 4.7 Representação diagramática de $\langle f(U) \rangle$, onde U é uma matriz unitária e simétrica. O segundo termo surge dos vínculos de simetria, Ref.[32]

considerando que agora pontos pretos podem se conectar a pontos brancos devido ao novo tipo de simetria presentes nas permutações da Eq.(4.65). Se U é uma matriz unitária e simétrica, usando as regras diagramáticas apresentadas na seção anterior, pode-se mostrar que um dos exemplos também lá apresentados, $f(U) = \text{Tr}(AUBU^\dagger)$, tem média dada pela seguinte fórmula exata:

$$\langle f(U) \rangle = V_1 [\text{Tr}(A) \text{Tr}(B) + \text{Tr}(A^T B)] \quad (4.71)$$

onde $V_1 = (N+1)^{-1}$, enquanto no CUE $V_1 = N^{-1}$. O mesmo pode ser feito para o $g(U)$ no COE. Nesse caso, como se pode combinar pontos pretos com pontos brancos, são 4! diagramas, enquanto no CUE consideramos $2! \times 2!$ desses diagramas,

$$\begin{aligned} \langle g(U) \rangle = & [(N+1)(N+3)]^{-1} (\text{Tr } A \text{Tr } BD \text{Tr } C + \text{Tr } AD^T B^T \text{Tr } C + \text{Tr } A \text{Tr } BC^T D \\ & + \text{Tr } AD^T CB^T + \text{Tr } ADCB + \text{Tr } AC^T D^T B + \text{Tr } ADB^T C^T + \text{Tr } AC^T \text{Tr } BD^T) \\ & - [(N(N+1)(N+3))]^{-1} (\text{Tr } A \text{Tr } BDC + \text{Tr } AC^T D^T B^T + \text{Tr } A \text{Tr } B^T C + \text{Tr } AC^T DB^T \\ & + \text{Tr } ADB \text{Tr } C + \text{Tr } AD^T B \text{Tr } C + \text{Tr } ADBC^T + \text{Tr } AD^T BC^T + \text{Tr } AD^T B^T C^T \\ & + \text{Tr } AC^T \text{Tr } BD + \text{Tr } AD^T CB + \text{Tr } AC^T DB + \text{Tr } A \text{Tr } BC^T D^T + \text{Tr } ADCB^T \\ & + \text{Tr } A \text{Tr } BD^T \text{Tr } C + \text{Tr } ADB^T \text{Tr } C) \quad (4.72) \end{aligned}$$

4.5 Bilhar de Schrödinger vs Bilhar de Dirac

As propriedades universais do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos são afetadas pelas simetrias de reversão temporal (TRS), rotação de spin (SRS), partícula-buraco (PHS) e quiral ou sub-rede (SLS). Essas simetrias dão origem a dez classes de simetria divididas em ensembles de Wigner-Dyson, Quiral e Altland-Zirnbauer. As três classes de Wigner-Dyson são conhecidas como ensemble circular ortogonal (COE), caracterizado pela presença de TRS e SRS ($\beta = 1$), ensemble

circular unitário (CUE), em cujo qual há quebra TRS por um campo magnético externo ($\beta = 2$), e ensemble circular simplético (CSE), caracterizado pela quebra de TRS e SRS devido à interação spin-órbita ($\beta = 4$). Os ensembles quirais também têm três classes com as mesmas simetrias de Wigner-Dyson: ensembles quirais circulares ortogonal (chCOE), unitário (chCUE) e simplético (chCSE). A diferença entre os ensembles de Wigner-Dyson e quirais é a validade da simetria de sub-rede nos últimos. Além disso, a ausência de um campo magnético externo mantém as simetrias partícula buraco tanto no chCOE quanto no chCSE. Por último, há quatro classes de Altland-Zinbauer, que descrevem dispositivos eletrônicos conectados a supercondutores, contudo, estes não serão explorados nesse trabalho.

Nesta seção apresentaremos uma descrição analítica da condutância no bilhar de Schrödinger e de Dirac. Utilizando o formalismo de TMA e o método diagramático é possível chegar-se a expressões exatas para a condutância e flutuações universais, no regime não interagente. Assumimos que o tempo de dephasing (τ_ϕ) e tempo de permanência na cavidade (τ_D) são muito maiores que o tempo de Ehrenfest, $\tau_\phi, \tau_D \gg \tau_E$, garantindo, dessa forma, o regime universal.

4.5.1 Condutância do Bilhar de Schrödinger

Consideremos um sistema composto por uma cavidade caótica conectada a dois guias ideais. A matriz de espalhamento $S(E)$, $M \times M$, pode ser decomposta em sub-blocos s_{ij} com dimensão $N_i \times N_j$,

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \quad (4.73)$$

Tais blocos descrevem o espalhamento do guia j para o guia i ($M = N_i + N_j$). E, a condutância G , como já descrito, é dada pela fórmula de Landauer,

$$\begin{aligned} G/G_0 &= \text{Tr } s_{12} s_{12}^\dagger \\ &= \text{Tr } C_1 S C_2 S^\dagger, \quad G_0 = 2e^2/h \end{aligned} \quad (4.74)$$

onde s_{12} e s_{21} são os blocos de transmissão, e as matrizes de projeção, C_1 e C_2 são definidas de tal forma que filtrem esses blocos de transmissão: $C_2 = 1 - C_1$, $(C_1)_{ij} = 1$ se $i = j \leq N_1$ e 0 caso contrário.

Na ausência de barreiras conectando a cavidade aos guias, S estará distribuída de acordo com o ensemble circular, com o índice $\beta \in 1, 2, 4$ distinguindo a classe de simetria. Considerando inicialmente uma cavidade caótica com um campo magnético quebrando a simetria de reversão temporal, a matriz S que descreverá um sistema pertencente ao ensemble unitário. Nesse caso, pode-se desenhar os

diagramas para a Eq.(4.74) escrita em termos dos projetores, esses diagramas serão da forma em que está posta na parte superior da Fig.(4.3), onde as seguintes substituições são feitas: $U \rightarrow S$, $U^\dagger \rightarrow S^\dagger$, $A_1 \rightarrow C_1$ e $A_2 \rightarrow C_2$. Então, a condutância pode ser calculada exatamente da seguinte forma, Ref.[32],

$$\begin{aligned}\langle g \rangle^{CUE} &= V_1^{CUE} \mathbf{Tr}(C_1) \mathbf{Tr}(C_2) \\ &= \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2}\end{aligned}\quad (4.75)$$

onde V_1^{CUE} é o peso para CUE. Esse resultado é válido mesmo no limite quântico extremo (N_1 e N_2 pequenos). Sabendo que a condutância é o inverso da resistência, tem-se:

$$R = \frac{1}{G} = \frac{1}{G_1} + \frac{1}{G_2} \rightarrow G = \frac{G_1 G_2}{G_1 + G_2} = R_1 + R_2 \quad (4.76)$$

Portanto, nota-se que a média da condutância na ausência da simetria de reversão temporal equivale ao caso de resistores em série.

Para o COE, a simetria de reversão temporal impõe a existência de um diagrama a mais para a Eq.(4.74), já que pontos brancos podem agora se conectar aos pontos pretos. Conforme a Eq.(4.71), o diagrama a mais gera um termo proporcional à $\mathbf{Tr}(C_1 C_1^T)$, que se anula devido à propriedade dos projetores. Dessa forma, a média da condutância para o COE tem apenas o peso diferente da expressão para a média no CUE. Assim,

$$\begin{aligned}\langle g \rangle^{COE} &= V_1^{COE} \mathbf{tr}(C_1) \mathbf{tr}(C_2) \\ &= \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2 + 1},\end{aligned}\quad (4.77)$$

onde $V_1^{COE} = (N + 1)^{-1}$ é o peso para o COE.

Utilizando um procedimento similar para o ensemble circular simplético, obtém-se uma fórmula exata para a condutância, no caso de contatos ideais, número arbitrário de canais e um índice de simetria também arbitrário. A fórmula está presente na referência Ref.[72] e pode ser escrita como

$$\langle g \rangle^\beta = \frac{\beta N_1 N_2}{\beta N + 2 - \beta} \quad (4.78)$$

No limite semiclássico, a equação anterior pode ser expandida em potências de $1/N$, gerando o seguinte resultado:

$$\langle g \rangle^\beta = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2} + \dots \quad (4.79)$$

O segundo termo do lado direito da equação anterior é a primeira contribuição quântica, conhecida como localização fraca. Note-se que no ensemble unitário, $\beta = 2$, a correção de localização fraca se anula, resultado amplamente conhecido na literatura. O primeiro termo do lado direito corresponde à lei de Ohm e não depende do ensemble.

4.5.2 Condutância do bilhar de Dirac

Bilhares de Dirac(BD) são pontos quânticos abertos que carregam intrinsecamente a simetria chiral/sub-rede, proeminentes exemplos desses sistemas são isolantes topológicos e estruturas de grafeno, Ref.[57]. Como descrito nessa dissertação, o hamiltoniano de Dirac com simetria quiral satisfaz a seguinte relação de anti-comutação:

$$\mathcal{H} = -\sigma_z \mathcal{H} \sigma_z, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_M & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_M \end{pmatrix} \quad (4.80)$$

A matriz $\mathcal{H}$ tem dimensão $2M \times 2M$ e $\mathbf{1}_M$ é uma matriz identidade $M \times M$. Pode-se interpretar o subíndice M dos 1 's e -1 's no σ_z como sendo o número de átomos em cada sub-rede, Ref.[57], em um total de $2M$ átomos no bilhar de Dirac caótico. O modelo hamiltoniano na matriz de espalhamento, S , pode ser escrito como

$$S(\epsilon) = \mathbf{1} - 2\pi i W^\dagger (\epsilon - \mathcal{H} + i\pi W W^\dagger)^{-1} W, \quad (4.81)$$

onde S tem dimensão $\bar{N}_T \times \bar{N}_T$, onde $\bar{N}_T = \bar{N}_1 + \bar{N}_2 + \dots + \bar{N}_m$ é o número total de canais abertos ou átomos no terminal m , que está conectado ao bilhar de Dirac caótico. O $\bar{N}_i = 2N_i$ é o número de canais abertos no i -ésimo terminal. Dessa forma, define-se cada sub-rede com N_i canais abertos e, como o sistema é composto por duas sub-redes, existem $2N_i$ canais abertos no i -ésimo terminal. A matriz W tem dimensão $2M \times \bar{N}_T$ e representa todas as interações das ressonâncias do ponto com os canais abertos dos terminais. A matriz S é unitária, $S^\dagger(\epsilon)S(\epsilon) = \mathbf{1}$, devido à conservação da carga elétrica. Das Eqs.(4.80) e (4.81), tem-se que a matriz S satisfaz a seguinte relação

$$S(\epsilon) = \Sigma_z S^\dagger(-\epsilon) \Sigma_z, \quad \Sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{N_t} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{N_t} \end{pmatrix} \quad (4.82)$$

onde $N_T = N_1 + \dots + N_m$. Assumimos que o transporte eletrônico através de um bilhar caótico de Dirac se dá com energia zero ou, equivalentemente, nos pontos de Dirac, $\epsilon = 0$. Assim, pode-se escrever

$$S = \Sigma_z S^\dagger \Sigma_z \quad (4.83)$$

O método diagramático de integração no grupo unitário (para sistemas com simetria de sub-rede) não pode ser usado diretamente para computar médias sobre

os chCUE, chCOE, e chCSE. A principal razão é que nesses sistemas há novos graus de liberdade resultantes da SLS incorporada na matriz S , Eq.(4.83), o que não foi previamente considerado nas regras diagramáticas apresentadas neste capítulo. A primeira solução encontrada para resolver tal problema é fundamentada na decomposição da matriz S Ref.[38] (Ver Tabela 4.2). Contudo, tal decomposição é insuficiente para a utilização direta do método diagramático sobre o grupo ortogonal, especificamente para as classes chCOE e chCSE. Pois, no caso circular, o COE não contém matrizes ortogonais (apesar do nome), mas sim matrizes unitárias e simétricas. No caso do chCOE existem matrizes ortogonais, de fato. Sendo assim, apresentamos aqui uma extensão do método diagramático que permitirá computar médias, variâncias da condutância e potência do ruído de disparo para bilhares de Dirac caóticos conectados a m terminais. Esse método é geral e permite o estudo de todas as classes quirais.

Simetria	β	U	S
chCOE	1	$\mathcal{O}(2N_T)$	$S = \Sigma_z U^T \Sigma_z U$
chCUE	2	$\mathcal{U}(2N_T)$	$S = \Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U$
chCSE	4	$\mathcal{S}_p(4N_T)$	$S = \Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U$

Tabela 4.2 A decomposição da matriz S como função de matrizes U , onde U é uma matriz ortogonal para o chCOE, unitária para o chCUE e simplética para o chCSE, como descrito na Ref.[38]

Por razões pedagógicas, começaremos analisando a relevante configuração de dois terminais ($m = 2$). Mais uma vez considerando a fórmula de Landauer para condutância, tem-se

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathbf{Tr}(tt^\dagger) = \frac{2e^2}{h} \text{tr}(C_1 S C_2 S^\dagger) \quad (4.84)$$

onde t é o bloco de transmissão da matriz de espalhamento e o fator 2 é usualmente relacionado à degenerescência de spin. As matrizes $C_{1,2}$ são, como anteriormente, os projetores sobre os respectivos terminais.

Substituímos na Eq.(4.84) a matriz de espalhamento característica para o chCOE, Eq.(4.83), obtemos

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathbf{Tr}(C_1 \Sigma_z U^T \Sigma_z U C_2 U^T \Sigma_z U \Sigma_z) = \frac{2e^2}{h} \mathbf{Tr}(C_1 U^T \Sigma_z U C_2 U^T \Sigma_z U) \quad (4.85)$$

onde a relação $\Sigma_z C_1 \Sigma_z = C_1$ foi utilizada a título simplificação. A matriz U é ortogonal, ou seja, as entradas são números reais.

Agora podemos aplicar o método diagramático de integração sobre o grupo ortogonal para calcular a média da Eq.(4.85). As regras são as mesmas utilizadas

82 APÍTULO 4. MATRIZES ALEATÓRIAS E A TÉCNICA DIAGRAMÁTICA

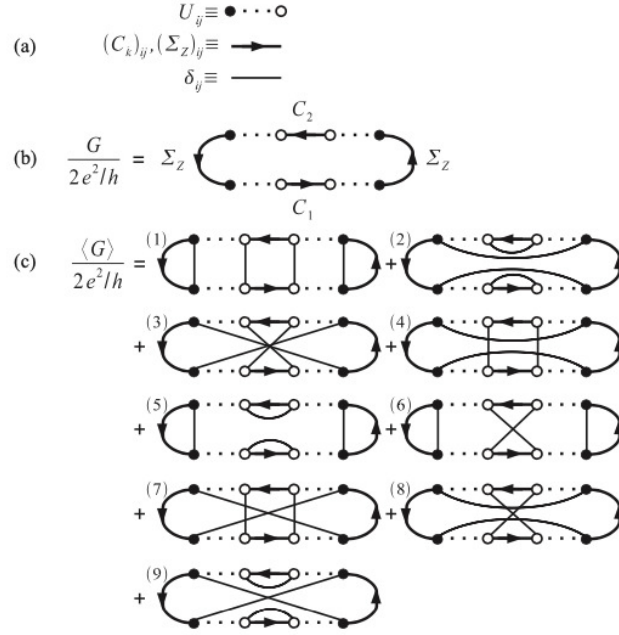


Figura 4.8 (a) Objetos básicos das regras diagramáticas: Elemento aleatório (U_{ij}) da matriz U , o projetor no espaço de canais (C_i) e, a delta Kronecker, representando a contração de índice (δ_{ij}). (b) Representação diagramática da Eq.(4.85). (c) Média da condutância, Eq.(4.86). Note que os diagramas 1,2 e 3 têm pesos V_{11} e, os diagramas 4-9 possuem peso V_2 . Os pesos estão nos apêndices A e B. Figura retirada da Ref.([57])

anteriormente, ou seja, faz-se necessário considerar todas as contrações de índices da matriz de espalhamento e, também como antes, o primeiro procedimento será representar $G/(2e^2/h)$ diagramaticamente como mostrado na Fig.(4.8), para o qual a matriz de espalhamento é representada por linhas pontilhadas com pontos pretos e brancos nas extremidades e as matrizes de projeção representadas por linhas sólidas orientadas. O segundo procedimento é conectar os pontos de mesma cor através de linhas finas em todos os modos topologicamente possíveis. Com isso, encontra-se nove diagramas, como pode ser visto na Fig.(4.8). Da leitura dos diagramas tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\langle G \rangle_{\beta=1}}{2e^2/h} = & V_{11} [\text{Tr}(C_1 C_2) \text{Tr}(\Sigma_z)^2 + \text{Tr}(C_1) \text{Tr}(C_2) \text{Tr}(\Sigma_z^2) + \text{Tr}(C_1 C_2 \text{Tr}(\Sigma_z^2))] \\ & + V_2 [\text{Tr}(C_1 C_2) \text{Tr}(\Sigma_z^2) + \text{Tr}(C_1) \text{Tr}(C_2) \text{Tr}(\Sigma_z)^2 + \text{Tr}(C_1 C_2) \text{Tr}(\Sigma_z^2) \\ & \text{Tr}(C_1 C_2) \text{Tr}(\Sigma_z^2) + \text{Tr}(C_1) \text{Tr}(C_2) \text{Tr}(\Sigma_z^2)] \quad (4.86) \end{aligned}$$

onde os diagramas indexados por 1,2 e 3 na Fig.(4.8) tem pesos $V_{11} = (2N_T + 1)[2N_T(2N_T - 1)(2N_T + 2)]^{-1}$ e os diagramas indexados por 4 e 9 têm pesos $V_2 = -[2N_T(2N_T - 1)(2N_T + 2)]^{-1}$. Os pesos são calculados na referência Ref.[59].

A identidade $\text{tr}(\Sigma_z) = \text{tr}(C_1 C_2) = 0$ determina que alguns diagramas têm contribuição nula. Os únicos diagramas que contribuem são o 2 e o 9. Usando a Eq.(4.86) obtém-se a seguinte média para o chCOE:

$$\langle G \rangle_{\beta=1} = \frac{2e^2}{h} \frac{4N_1 N_2 N_T}{(2N_T - 1)(N_T + 1)} \quad (4.87)$$

E, podemos obter a média da condutância para o chCSE também usando a Eq.(4.86) e usando as seguintes substituições: $\langle G \rangle_{\beta=4} = 2e^2/h(-1/2)[\dots]; N_T \rightarrow -2N_T; \text{tr} \rightarrow -2\text{tr}$. Performando esse procedimento, obtém-se

$$\langle G \rangle_{\beta=4} = \frac{2e^2}{h} \frac{16N_1 N_2 N_T}{(4N_T + 1)(2N_T - 1)} \quad (4.88)$$

Finalmente, percebe-se que na Eq.(4.85) a matriz U é unitária e as regras diagramáticas usuais podem ser aplicadas Ref.[72]. Para o chCUE, quatro diagramas contribuem para a média e podemos representar o resultado em uma equação compacta para os três ensembles quírais Ref.[57]:

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \frac{4\beta N_1 N_2 N_T}{(\beta N_T + 1)(2N_T - 1)} \quad (4.89)$$

A Eq.(4.89) pode ser usada para o estudo de alguns limites relevantes. A princípio, tomando o regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, as médias da condutância na escala $4e^2/h$, $\langle G \rangle/(4e^2/h)$, são 4/9 para o chCOE, 8/15 para o chCUE, e 16/27 para o chCSE, como podemos ver na Fig.(4.9). Tais resultados são significativamente distintos dos correspondentes para o Bilhar de Schrödinger em todas as classes de simetria, COE, CUE e CSE.

O limite semiclássico pode ser obtido expandindo-se a Eq.(4.89) em potências de N_T ,

$$\begin{aligned} \langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[2 \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta} \right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{\beta} + \frac{4}{\beta^2} \right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^3} + \dots \right] \quad (4.90) \end{aligned}$$

Tal equação, (4.90), pode ser escrita, de forma alternativa, como função de $\overline{N_i} = 2N_i$,

$$\begin{aligned} \langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[\frac{\overline{N_1 N_2}}{\overline{N_1} + \overline{N_2}} + \left(1 - \frac{2}{\beta} \right) \frac{\overline{N_1 N_2}}{(\overline{N_1} + \overline{N_2})^2} + \right. \\ \left. + \left(1 - \frac{2}{\beta} + \frac{4}{\beta^2} \right) \frac{\overline{N_1 N_2}}{(\overline{N_1} + \overline{N_2})^3} + \dots \right]. \quad (4.91) \end{aligned}$$

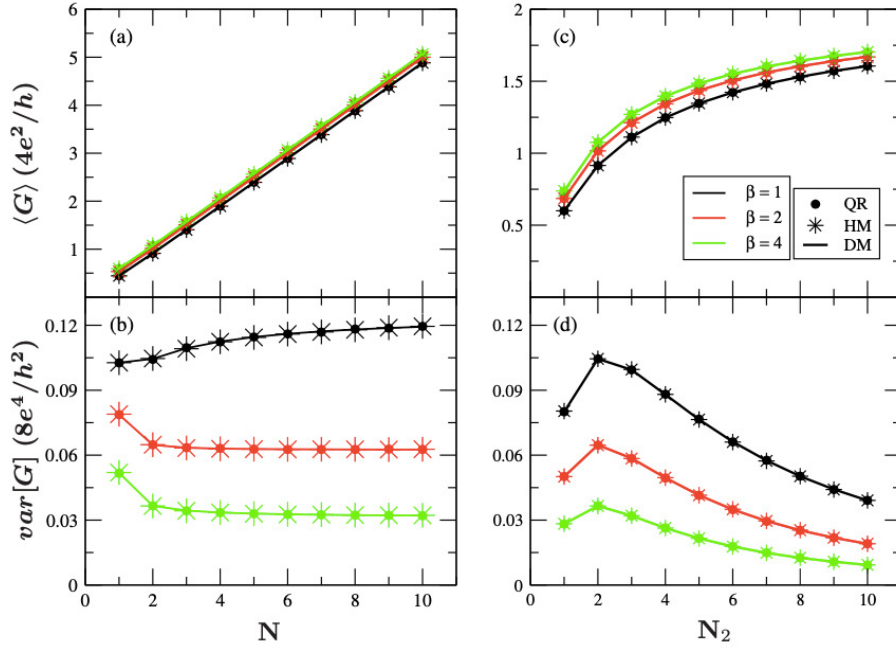


Figura 4.9 A média e a variância da condutância são plotados em unidades de $4e^2/h$ e $8e^4/h^2$, respectivamente. (a),(b) Caso de terminais simétricos, $N = N_1 = N_2$ e, (c),(d) caso de terminais assimétricos, com $N_1 = 2$. As linhas sólidas são os resultados exatos.

O primeiro termo na Eq.(4.91) é a lei de Ohm, como analisamos na seção anterior, e o segundo termo é conhecido como (anti)localização fraca $\beta = 1(\beta = 4)$. Esse termo é nulo para o caso de $\beta = 2$, diferentemente do terceiro termo, o qual é a manifestação dos efeitos de interferência quântica. Na configuração simétrica, $\bar{N} = \bar{N}_1 = \bar{N}_2$, os primeiros dois termos da Eq.(4.91) ficam dados de forma simplificada por $\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} [\bar{N}/2 + (1 - 2/\beta)1/4]$, o que concorda com a Ref.[58] para $\beta = (1, 2)$.

Outro ponto interessante é entender que, embora na Eq.(4.91) apresente um terceiro termo diferente para o caso do bilhar de Schrödinger, supostamente indicando um sinal de quiralidade, o fato é que detectar tal sinal experimentalmente é inviável por ser extremamente fraco, proporcional à N_T^{-2} . Sendo assim, como detectar a existência de quiralidade?

4.6 Conclusão

Nesse capítulo, apresentamos uma análise quantitativa detalhada, através do método diagramático de integração sobre o grupo unitário, da condutância para o Bilhar de Schrödinger e para o Bilhar de Dirac, estas constituem nanoestruturas universais que engendram simetrias das classes de Wigner-Dyson e Quiral, respectivamente. Os resultados analíticos aqui apresentados demonstram que a condutância para as duas classes de simetria são equivalentes, assim como os termos de correção de interferência quântica. Este fato evidencia que a simetria quiral/sub-rede não afeta quantitativamente a condutância, importante observável de transporte, no limite semiclássico, ou seja, quando o número de canais é suficientemente grande, $N \gg 1$, Ref.[57]. Argumentamos que esse fenômeno se deve à ausência de retroespalhamento e, conseqüentemente, à irrelevância da presença de duas sub-redes intrínsecas. Por essa razão, faz-se necessário investigar observáveis de transporte que evidenciem quantitativamente o sinal da quiralidade no limite semiclássico, uma vez que esse regime possui grande valor experimental.

Potência do Ruído de Disparo

Is all of scientific knowledge were to be destroyed, and only one sentence passed on to the next generations of creatures, it is: all things are made of atoms - *R. Feynman*

Todos os caminhos trilhados pelos filósofos da natureza os levaram à pergunta inexorável acerca da existência dos átomos. A fim de respondê-la, uma profusão de ideias surgiram, sobretudo a partir de meados do século *XIX* e, com elas, apenas duas respostas: existem átomos ou não. A aflição dos atomistas e anti-atomistas se tornou contundente e, embora ninguém sonhasse em ver um átomo, todos sabiam estarem debatendo uma questão da qual emergiria um novo paradigma científico.

O século *XIX* também foi marcado por grandes realizações científicas, tais como a termodinâmica e o eletromagnetismo. Em nenhuma dessas teorias o conceito de átomo precisava ser evocado. Apesar disso, foi nesse mesmo século que o debate atomista ganhou destaque, perdurando até o início do século *XX*, quando Einstein viu o instrumento para provar a existência dos átomos. Em 1905, ele “inventou” o ruído e desde então a física mudou rapidamente.

O ruído é visto como um obstáculo à detecção do sinal e que, portanto, deve ser eliminado. Assim sendo, por qual razão, em 1998, o físico Rolf Landauer, um dos fundadores da física mesoscópica, afirmou categoricamente que *O ruído é o sinal* [61]? No presente capítulo, nos propomos a responder essa questão através de uma revisão da literatura do ruído. Além disso, apresentamos os resultados originais desta dissertação, publicados na revista *Physical Review B* [62]. Tais resultados corroboram a afirmação do físico Landauer.

Nossa intenção neste capítulo é fornecer ao leitor elementos para a compreensão do ruído de disparo, cuja existência em dispositivos quírais é um dos resultados principais desta dissertação. Começamos discutindo alguns aspectos da teoria de processos estocásticos (seção 5.1), para em seguida discutir sobre os diferentes tipos de ruído associados aos circuitos eletrônicos (seção 5.2 e 5.3). Por fim, apresentamos os resultados originais deste trabalho (seção 5.4).

5.1 Conceitos básicos de processos estocásticos

A aleatoriedade é onipresente na Natureza. A retirada de uma carta de um baralho bem embaralhado, o resultado do lançamento de um dado não viciado, alguma característica genética observada em um indivíduo de uma população, o preço das ações em uma bolsa de valores, a transmissão de elétrons em um circuito, todos esses resultados são vistos como aleatórios. Tal aleatoriedade é bem descrita através da Teoria dos Processos Estocásticos, cuja pedra angular é a Teoria das Probabilidades.

Nesta seção, faremos uma breve revisão de processos estocásticos que será útil no estudo do ruído. Seguiremos a Ref.[63].

Um processo aleatório é uma função $x(t)$ da variável independente t (tempo). Seja $P(\dots)$ a probabilidade de ocorrer um dado evento, as funções de distribuição de primeira, segunda e n -ésima ordem para a variável aleatória $x(t)$ são definidas,

$$W_1(x_1, t_1) = P(x(t_1) \leq x_1)$$

$$W_2(x_1, t_1; x_2, t_2) = P(x(t_1) \leq x_1; x(t_2) \leq x_2) \quad (5.1)$$

$$\dots \quad (5.2)$$

$$W_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = P(x(t_1) \leq x_1; \dots; x(t_n) \leq x_n)$$

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

$$w_1(x_1, t_1) = \frac{\partial W_1(x_1, t_1)}{\partial x_1}$$

$$w_2(x_1, t_1; x_2, t_2) = \frac{\partial^2 W_2(x_1, t_1; x_2, t_2)}{\partial x_1 \partial x_2} \quad (5.3)$$

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

Processos aleatórios são estacionários se todas as funções de distribuição $w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ mantêm-se invariáveis sobre um desvio idêntico de todos os tempos pontuais $t_1, \dots, t_n$, isto é, $w_n(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) = w_n(x_1, t_1 + \epsilon; \dots; x_n, t_n + \epsilon)$ para todo ϵ . Isso significa que $w_1(x_1, t_1)$ não dependem do tempo, t_1 ,

$w_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$ depende somente da diferença $t_1 - t_2$ e assim por diante. Um processo estacionário não varia com o tempo. Um processo não-estacionário não segue o que foi exposto acima, nesse caso o conceito de média sobre um ensemble é válida, mas o de média temporal é falho.

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

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) dW_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, x w_1(x, t) \quad (5.4)$$

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

$$\langle (\delta x(t))^r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\delta x)^r w_1(x, t) \quad (5.5)$$

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

$$\langle \delta x(t_1) \dots \delta x(t_n) \rangle = \int dx_1 \dots dx_n \delta x_1 \dots \delta x_n w_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) \quad (5.6)$$

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

$$C_x(t_1, t_2) = \langle \delta x(t_1) \delta x(t_2) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta x_i(t_1) \delta x_i(t_2) \quad (5.7)$$

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

$$C_x(t_1 - t_2) = \overline{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} = \lim_{t_m \rightarrow \infty} \frac{1}{t_m} \int_{-t_m/2}^{t_m/2} dt \delta x(t_1 + t) \delta x(t_2 + t) \quad (5.8)$$

ambas as funções de correlação Eq.(5.7) e Eq.(5.8) coincidem se o sistema for ergódico.[64, 65].

Há várias representações equivalentes para descrever as propriedades de um sistema quântico, por exemplo, a representação de Heisenberg. Nesta, a função

de onda é independente do tempo e a completa dependência do tempo está no operador $X(t)$, o qual obedece à equação de Heisenberg [75]. Neste formalismo, a função de correlação é melhor expressa em termos dos operadores de Heisenberg das quantidades flutuantes, entretanto, a função de correlação é um observável físico e por isso deve ser real, para tal, a função de correlação deve ser hermitiana,

$$C_X(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle X(t_1)X(t_2) + X(t_2)X(t_1) \rangle \quad (5.9)$$

Além disso, é fácil ver que $C_X(t_1, t_2) = C_X(t_2, t_1)$.

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

$$C_{\alpha\beta}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle X_\alpha(t_1)X_\beta(t_2) + X_\beta(t_2)X_\alpha(t_1) \rangle \quad (5.10)$$

a qual os elementos satisfazem,

$$C_{\alpha\beta}(t_1, t_2) = C_{\beta\alpha}(t_2, t_1) \quad (5.11)$$

e se o sistema é estacionário,

$$C_{\alpha\beta}(t_1 - t_2) = C_{\beta\alpha}(t_2 - t_1) \quad (5.12)$$

Essas relações entre as funções de correlação, são apenas um pequeno esboço de relações mais profundas e menos óbvias entre as funções de correlação. As relações de Onsager dos coeficientes cinéticos para as simetrias da equação de evolução de qualquer sistema de partículas sobre a simetria de reversão temporal, e para a simetria com respeito ao campo magnético que o sistema está embebido, $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$.

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

$$C_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C_{\alpha\beta}(t) \quad (5.13)$$

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

A decomposição espectral das flutuações da quantidade $x(t)$ (ou da função de correlação associada a essa quantidade) é propriamente a quantidade que

chamamos de ruído (densidade espectral do ruído) $\mathbf{S}_x(f)$. O teorema de Wiener-Khintchine [65] estabelece a relação entre a densidade espectral do ruído e a transformada de Fourier da função de correlação,

$$\mathbf{S}_x(f) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C_x(t) = 2C_x(\omega) \quad (5.14)$$

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

$$S_{\alpha\beta}(f) = 2C_{\alpha\beta}(\omega) \quad (5.15)$$

dessa forma, a matriz densidade espectral do ruído obedece às mesmas relações de Onsager mostradas anteriormente para $C_{\alpha\beta}(\omega)$.

No caso de circuitos eletrônicos, a densidade espectral do ruído da corrente $S_I(\omega)$ e da voltagem $S_V(\omega)$ são,

$$S_I(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle I(t)I(0) + I(0)I(t) \rangle e^{i\omega t} dt \quad (5.16)$$

$$S_V(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle V(t)V(0) + V(0)V(t) \rangle e^{i\omega t} dt \quad (5.17)$$

5.2 Fundamentos do ruído

Quando R. Landauer disse que o ruído era o próprio sinal, ele quis dizer que flutuações no tempo de uma medição podem ser fonte de informação que não está presente na média temporal. Certamente alguns tipos de ruído são mais interessantes que outros. Um físico com acesso a equipamentos sensíveis para distinguir a granularidade de um sinal pode “deleitar-se” com o ruído. [6]

O ruído desempenha um papel crucial em fornecer informação adicionais quando consideramos a dualidade onda-partícula, por exemplo. Em 1909, A. Einstein percebeu que as flutuações eletromagnéticas variam dependendo se a energia é transportada por ondas ou partículas. A magnitude das flutuações da energia varia linearmente com a energia média para ondas clássicas, mas com a raiz quadrada para partículas clássicas. Como um fóton não é uma onda nem uma partícula clássica, as contribuições lineares e de raiz quadrada coexistem. Normalmente, a contribuição da raiz quadrada (partícula) domina nas frequências ópticas e a contribuição linear (da onda) assume as frequências de rádio. Se Isaac Newton pudesse medir o ruído e as flutuações dependentes do tempo, ele conseguiria resolver sua disputa com Christiaan Huygens sobre a natureza

corpuscular da luz, sem realmente precisar observar um fóton individual. Tal é o poder do ruído.

Os elétrons, assim como fótons, também manifestam a dualidade. Sendo assim, pode-se esperar que as flutuações na corrente elétrica desempenhem um “papel diagnóstico” semelhante para o caso dos fótons. As flutuações de corrente devido à discretização da carga elétrica são conhecidas como ruído de disparo, este ganhou destaque a partir do desenvolvimento de condutores mesoscópico, devido o mesmo conseguir revelar diversos detalhes sobre o transporte de cargas, como veremos as próximas seções.

5.2.1 Movimento Browniano

O movimento browniano surgiu originalmente em 1828 quando Robert Brown observou movimentos aleatórios de partículas de pólen suspensas em uma solução aquosa. Inúmeras tentativas foram realizadas para desvendar a natureza do movimento. Experimentos em laboratório mostraram que o movimento fica mais intenso quando se reduz a viscosidade do meio ou o tamanho das partículas brownianas, e também quando se eleva a temperatura da solução. Foi apenas em 1905 que A. Einstein explicou o comportamento de tais partículas do ponto de vista probabilístico, resultando em uma equação de movimento para a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula na posição x no tempo t .

A. Einstein resolveu o problema do movimento browniano com duas hipóteses: i) O movimento é causado pelos impactos do grão de pólen nas moléculas do líquido (Teoria Atômica). ii) O efeito dos impactos nos grãos de pólen é tão complexo que apenas uma descrição estatística é possível. Nesta descrição, os impactos são estatisticamente independentes (Processo estocástico).

Seja τ a menor escala de tempo do problema, de modo que nenhuma descrição da dinâmica em tempos menores que τ será apresentada. Na versão unidimensional do modelo, a cada intervalo de tempo τ a coordenada x da partícula sofre um incremento de Δ (positivo ou negativo). Seja N o número total de partículas no líquido e dN o número de partículas cujas coordenadas x sofrem um incremento entre Δ e $\Delta + d\Delta$.

Definindo $P_\tau(\Delta)d\Delta$ como a probabilidade de que a posição x de uma partícula sofra um incremento no intervalo $(\Delta, \Delta + d\Delta)$ no tempo τ . Fazemos então a seguinte hipótese frequencista:

$$P_\tau(\Delta)d\Delta = \frac{dN}{N} \quad (5.18)$$

cujas propriedades de $P_\tau(\Delta)$ são:

1. $P_\tau(\Delta) \geq 0$
2. $\int_{-\infty}^{\infty} P_\tau(\Delta) d\Delta = 1$
3. $P_\tau(\Delta) = P(-\Delta)_\tau$

Seja $n(x, t)$ a densidade de partículas, então $n(x, t)dx$ é igual ao número de partículas no intervalo $(x, x+dx)$ no tempo t . Por causa das hipóteses estatísticas podemos calcular $n(x, t+\tau)$ a partir de $n(x, t)$, ou seja

$$n(x, t+\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} n(x-\Delta, t) P_\tau(\Delta) d\Delta \quad (5.19)$$

Admitindo que τ é muito menor que o intervalo característico de observação podemos expandir

$$n(x, t+\tau) = n(x, t) + \tau \partial_t n(x, t) + \theta(\tau^2) \quad (5.20)$$

Expandindo o integrando temos

$$n(x-\Delta, t) = n(x, t) - \Delta \partial_x n(x, t) + \frac{1}{2} \Delta^2 \partial_x^2 n(x, t) + \dots \quad (5.21)$$

Aplicando a Eq.(5.20) e Eq.(5.21) em Eq.(5.19):

$$\begin{aligned} n(x, t) + \tau \partial_t n(x, t) + \theta(\tau^2) &= n(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} P_\tau(\Delta) d\Delta - \partial_x n(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Delta P_\tau(\Delta) d\Delta \\ &\quad + \frac{1}{2} \partial_x^2 n(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 P_\tau(\Delta) d\Delta + \dots \end{aligned} \quad (5.22)$$

Assumindo a hipótese fenomenológica

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 P_\tau(\Delta) d\Delta = 2D\tau \quad (5.23)$$

onde D é a constante de difusão. E

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^{2n} P_\tau(\Delta) d\Delta = 0; n > 1 \quad (5.24)$$

Tem-se,

$$\partial_t n(x, t) + \theta(\tau) = \partial_x^2 n(x, t) + \frac{1}{2\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 P_\tau(\Delta) d\Delta + \dots \quad (5.25)$$

Fazendo a contração completa da informação, i.e. tomando o limite $\tau \rightarrow 0$ obtemos a equação da difusão:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} \quad (5.26)$$

Finalmente, com a condição de que as partículas estão inicialmente localizadas na origem, ou seja, $n(x, t=0) = N\delta(x)$, a concentração pode ser escrita como

$$n(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp x^2/(4Dt) \quad (5.27)$$

O resultado acima nos mostra que as partículas se comportam como num processo gaussiano difusivo. A função $n(x, t)$ inicialmente representa uma delta centrada em torno da origem $x = 0$. No entanto, à medida que o tempo passa, a distribuição evolui como uma gaussiana de largura variável. onde $\sigma^2 = 2Dt$. Da Eq.5.27 vemos que

1. $\langle x(t) \rangle = 0$
2. $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt = \sigma^2$
3. $\Delta x(t) \equiv \sqrt{\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2} = \sqrt{2Dt} = \text{dispersão da partícula browniana.}$

O coeficiente de difusão D deve ser uma função da temperatura e da geometria das partículas. Einstein mostrou que para partículas esféricas de raio a , o coeficiente D pode ser calculado a partir da mobilidade b e da temperatura do meio no qual a partícula se encontra. O parâmetro b pode ser obtido da fluidodinâmica, mais precisamente a partir da lei de Stokes. Estas previsões foram confirmadas experimentalmente e contribuíram para a aceitação da teoria atômica.

O formalismo de Einstein é claramente fenomenológico e, portanto, não permite representar a constante de difusão D em termos dos parâmetros microscópicos. Diante disso, o físico Paul Langevin iniciou uma série de estudos tentando uma possível generalização do trabalho de Einstein.

Segundo Langevin, o movimento browniano de uma partícula na ausência de um campo de força conservativo pode ser entendido com base numa equação diferencial estocástica, agora conhecida como equação de Langevin. Partindo da segunda lei de Newton, tem-se

$$m \frac{dv}{dt} = F_T(t) \quad (5.28)$$

onde $F_T(t)$ é a força total instantânea sobre a partícula devido ao fluido. A força $F_T(t)$ é então dividida em duas partes $F_T(t) = -\zeta v(t) + f(t)$, uma determinística

e outra aleatória. Além disso, $\zeta = 6\pi\eta a$, onde η é o coeficiente de viscosidade do fluido e a o raio da partícula esférica. A parte determinística corresponde à lei de Stokes da hidrodinâmica e é responsável pela dissipação. A parte aleatória $f(t)$ é uma força flutuante que é uma característica básica de equações diferenciais estocásticas. Langevin definiu as propriedades dessa função em duas condições:

1. $\langle f(t) \rangle = 0$
2. $\langle f(t)x(t) \rangle = \langle x(t) \rangle \langle f(t) \rangle = 0$ (similar à condição $\tau \ll t$ de Einstein).

Substituindo $F_T(t)$ em Eq.(5.28), tem-se

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\zeta \frac{dx}{dt} + f(t) \quad (5.29)$$

Multiplicando a Eq.(5.29) por $x(t)$ obtemos

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} (x^2) - m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = -\frac{1}{2} \zeta \frac{d}{dt} (x^2) + f(t)x(t)$$

Fazendo uma média sobre um grande número de partículas obtemos

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{2} \zeta \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = m \langle v^2 \rangle \quad (5.30)$$

onde usamos a hipótese de ausência de correlação entre os valores instantâneos da posição da partícula $x(t)$ e a força aleatória $f(t)$. Admitindo que o sistema está em equilíbrio térmico com um banho a uma temperatura T obtemos $\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$ (teorema da equipartição). Substituindo tal resultando na Eq.(5.30) e após alguma álgebra, obtemos

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2k_B T}{\zeta} t + \langle x^2(0) \rangle \quad (5.31)$$

Da equação de difusão obtida por Einstein, tem-se

1. $\langle x^2(0) \rangle = 0$
2. $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$

Concluimos deste modo que

$$D = \frac{k_B T}{\zeta} = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}. \quad (5.32)$$

Portanto, o método de Langevin fornece uma expressão para a constante de difusão em termos de parâmetros microscópicos.

5.2.2 Ruído Térmico

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

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

$$L \frac{d\overline{I(t)}}{dt} = V(t). \quad (5.33)$$

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

$$L \frac{dI(t)}{dt} = V(t) + v(t) \approx -RI(t) + v(t) \quad (5.34)$$

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

$$\frac{dI(t)}{dt} + \gamma I(t) = \frac{1}{L} v(t) \quad (5.35)$$

Multiplicando a Eq.(5.35) por $e^{\gamma t}$ e rearranjando os termos,

$$\frac{d(e^{\gamma t}I(t))}{dt} = \frac{1}{L}e^{\gamma t}v(t) \quad (5.36)$$

Integrando a Eq.(5.36),

$$I(0) = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^0 e^{\gamma t} v(t) dt \quad (5.37)$$

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

$$\overline{I(0)^2} = \frac{1}{L^2} \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^0 e^{\gamma(t+t')} \overline{v(t-t')v(0)} dt dt'. \quad (5.38)$$

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

$$\overline{I(0)^2} = \frac{1}{2\gamma L^2} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{v(0)v(s')} ds' \quad (5.39)$$

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

$$R = \frac{1}{2k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{v(0)v(s')} ds' \quad (5.40)$$

A Eq.(5.40) diz que as correlações na voltagem devido ao movimento aleatório térmico dos elétrons são relacionadas a resistência no equilíbrio, que, é um termo dissipativo no circuito. Aplicando o teorema de Wiener-Khintchine,

$$S_v(\omega) = 4 \int_0^{\infty} \overline{v(0)v(t)} \cos(\omega t) dt \quad (5.41)$$

Como $v(0)$ e $v(t)$ são correlacionadas apenas na escala de tempo τ^* , pode-se aproximar $\omega\tau^* \ll 1$ e assim $\cos(\omega t) \approx 1$. Combinando as Eq.(5.40) e Eq.(5.41), finalmente obtemos a expressão para o ruído térmico,

$$S_v(\omega) \approx 2 \int_{-\infty}^{\infty} \overline{v(0)v(t)} dt$$

$$S_v(\omega) = 4k_B T R \quad (5.42)$$

É importante notar que a Eq.(5.42) é independente da frequência, indicando que o ruído térmico é um ruído branco, até uma certa frequência de corte pelo menos. Similarmente, o ruído de Nyquist-Johnson em termos da corrente pode ser derivada tal que teremos, $S_I(\omega) = 4k_B T G$, com G condutância. A maneira de diminuir o ruído térmico é através do resfriamento do resistor (desprezando os efeitos térmicos do cabeamento) o mais próximo possível do zero absoluto, e esse ruído irá ser suprimido linearmente com a temperatura.

5.2.3 Teorema da Flutuação-Dissipação

A mecânica estatística (ME) busca entender os fenômenos de muitos corpos e lida com incontáveis graus de liberdade desses sistemas [55]. Além dessa teoria descrever bem a termodinâmica dos fenômenos macroscópicos em equilíbrio, ela também pode descrever processos fora do equilíbrio.

Um importante resultado da ME é o teorema da flutuação-dissipação, este relaciona as propriedades não-equilíbrio com as de equilíbrio [66]. Mais precisamente, esse teorema estabelece uma relação geral entre a resposta do sistema a uma perturbação externa e as flutuações internas do sistema sem perturbação. A validade do teorema da flutuação-dissipação está dentro do regime da resposta linear, o que indica que a perturbação externa é fraca e o termo dominante é linear. A resposta do sistema é caracterizada por uma função resposta, a condutância, por exemplo. Por outro lado, as flutuações internas refletem as funções de correlação de quantidades físicas no equilíbrio térmico. De maneira simplista, o papel do teorema da flutuação-dissipação pode ser resumido como segue: (a) Prediz as flutuações características ou o ruído intrínseco a partir de propriedades conhecidas; (b) Estabelece uma fórmula básica para conhecermos propriedades como a resistência, a partir da análise das flutuações no sistema.

Para demonstrarmos o teorema da flutuação-dissipação, é considerado um sistema, interagindo fracamente com o ambiente (banho) a temperatura T e está em equilíbrio térmico com esse ambiente. Esse sistema é governado por um hamiltoniano, $\mathcal{H}\psi_m = E_m\psi_m$ e a probabilidade desse sistema ser encontrado no m -ésimo estado ψ_m é dado pela distribuição de Gibbs, $w_m = \exp((F - E_m)/k_B T)$, onde E_m é a energia do m -ésimo estado e F é a energia livre do sistema, com $\sum_m w_m = 1$. Conforme as Eq.(5.9) e Eq.(5.14), a densidade espectral das flutuações associadas a quantidade física (operador) $X(t)$ em equilíbrio,

$$\begin{aligned} S_X(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} d(t_1 - t_2) \text{Tr}(\rho(X(t_1)X(t_2) + X(t_2)X(t_1))) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d(t_1 - t_2) \sum_{mn} w_m (X_{mn}(t_1)X_{nm}(t_2) + X_{mn}(t_2)X_{nm}(t_1)) e^{i\omega(t_1 - t_2)} \end{aligned} \quad (5.43)$$

onde ρ é a matriz densidade do sistema ($\rho = \sum_{mn} w_{mn} |\psi_m\rangle\langle\psi_n|$ e $E_m - E_n = \hbar\omega_{mn}$), $\text{Tr}(\cdot)$ é o traço e $X_{mn}(t) = \langle\psi_m|X(t)|\psi_n\rangle$ é o elemento de matriz de Heisenberg do operador $X(t)$. Resolvendo a equação de Heisenberg para esse operador, $\partial X_{mn}(t)/dt = i\omega_{mn}X_{mn}(t)$, obtêm-se $X_{mn}(t) = e^{i\omega_{mn}t}X_{mn}(0)$, onde $X_{mn}(0) = X_{mn}$ é o operador na representação de Schrödinger. Assim, a Eq.(5.43) fica,

$$S_x(f) = 2\pi \sum_{mn} w_{mn} |X_{mn}|^2 (\delta(\omega_{nm} - \omega) + \delta(\omega_{nm} + \omega)) \quad (5.44)$$

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

$$S_X(f) = 2\pi \sum_{mn} w_m |X_{mn}|^2 (\delta(\omega_{nm} - \omega)) \quad (5.45)$$

No caso de um sistema em equilíbrio, a probabilidade de transição entre os estados m e n depende somente da diferença de energias, $w_n = \exp -\hbar\omega/k_B T w_m$. Dessa forma, a Eq.(5.45) fica,

$$S_X(f) = 2\pi(1 + e^{-\hbar f/k_B T}) \sum_{mn} w_m |X_{mn}|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega) \quad (5.46)$$

Objetivamos comparar a Eq.(5.46) com a equação para a resposta do sistema à perturbação causada pelo ambiente, dentro da teoria da resposta linear. Supondo a energia de interação entre a quantidade física X e um campo $F(t)$ como: $H_F = -XF$. Como exemplo, X pode representar um momento de dipolo elétrico imerso em um campo elétrico F . Supondo que F é uma perturbação periódica, com frequência $\omega = 2\pi f$ e a amplitude F_0 ,

$$F(t) = \frac{1}{2}(F_0 e^{-i\omega t} + F_0^* e^{i\omega t}) \quad (5.47)$$

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

$$W_{mn} = \frac{\pi}{2\hbar^2} |F_0|^2 |X_{mn}|^2 (\delta(\omega_{nm} + \omega) + \delta(\omega_{mn} - \omega)). \quad (5.48)$$

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

$$\overline{Q} = \sum_{mn} w_m W_{mn} \hbar\omega_{nm} \quad (5.49)$$

Substituindo a distribuição de Gibbs e Eq.(5.48) na Eq.(5.49), obtêm-se,

$$\overline{Q} = \frac{\pi\omega}{2\hbar} |F_0|^2 (1 - e^{\hbar f/k_B T}) \sum_{mn} w_m |X_{mn}|^2 \delta(\omega_{mn} - \omega) \quad (5.50)$$

De acordo com a teoria da resposta linear e considerando a Eq.(5.47), o valor esperado para a quantidade X será,

$$\langle X(t) \rangle = \frac{1}{2}(F_0 R(\omega) e^{i\omega t} + F_0^* R(-\omega) e^{i\omega t}) \quad (5.51)$$

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

$$\overline{Q} = \overline{\langle X(t) \rangle \frac{dF}{dt}} = \frac{1}{4} \overline{(-i\omega F_0 R(\omega) e^{-i\omega t} + i\omega F_0^* R^*(\omega) e^{i\omega t})(F_0 e^{-i\omega t} + F_0^* e^{i\omega t})} \quad (5.52)$$

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

$$\overline{Q} = \frac{1}{4} |F_0|^2 i\omega (R^*(\omega) - R(\omega)) = \frac{1}{2} |F_0|^2 \omega \text{Im}(R(\omega)) \quad (5.53)$$

Ao compararmos as Eqs.(5.46), (5.50) e (5.53), finalmente obtemos o teorema flutuação-dissipação:

$$S_X(f) = 2\hbar \coth\left(\frac{\hbar f}{2k_B T}\right) \text{Im}(R(\omega)) \quad (5.54)$$

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

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

$$S_I(f) = 2\hbar f \coth\left(\frac{\hbar f}{2k_B T}\right) \text{Re}(G(\omega)) \quad (5.55)$$

O movimento Browniano discutido na seção 4.2.1 é um protótipo para o teorema flutuação-dissipação, visto que apresenta uma relação entre a flutuação interna do sistema e a resposta (dissipação) desse sistema a perturbação externa.

5.2.4 Ruído 1/f

O ruído 1/f é a fonte dominante de ruído no regime de baixas frequências. Em um circuito, as seguintes igualdades são válidas, [55]

$$\frac{S_I(f)}{I^2} = \frac{S_V(f)}{V^2} = \frac{S_R(f)}{R^2} = \frac{S_G(f)}{G^2} = \frac{C_{1/f}}{f} \quad (5.56)$$

onde $C_{1/f}$ mede a intensidade do ruído. Experimentalmente, as quantidades $S_i(f)$ são proporcionais a f^α onde o grau medido $\alpha = -1.0 \pm 0.1$ [63]. A origem microscópica desse ruído não é clara e constitui uma significativa área de investigação tanto em ciência quanto em engenharia, devido a sua presença numa vasta gama de sistemas (semicondutores, metais, supercondutores, vidros de spins, etc). Das muitas especulações teóricas sobre a origem e existência de um *cutoff*, por exemplo, o fato é que o ruído telegráfico aleatório deve apresentar um espectro típico proporcional a $1/f$, um modelo simples consiste em associar esse ruído a centros de aprisionamento no sistema que capturam e liberam os elétrons ou buracos de maneira aleatória. No entanto, a questão de quais são os candidatos a serem esses centros de aprisionamento permanece, dentre os possíveis eleitos, defeitos na superfície ou interfaces fazem uma boa campanha.

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

$$\frac{-d\Delta x(t)}{dt} = \frac{\Delta x(t)}{\tau} \quad (5.57)$$

integrando essa equação temos,

$$\Delta x(t) = \Delta x(t_0)e^{-(t-t_0)/\tau} \quad (5.58)$$

A função de correlação de x é,

$$C_x(t) = \langle \Delta x(t_0)\Delta x(t+t_0) \rangle = \langle (\Delta x)^2 \rangle e^{-(t-t_0)/\tau} \quad (5.59)$$

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

$$S_x(f) = 4 \int_0^\infty C_x(t) \cos(2\pi ft) dt = 4 \langle (\Delta x)^2 \rangle \left(\frac{\tau}{1 + (2\pi ft)^2} \right) \quad (5.60)$$

A Eq.(5.60) apresenta um espectro tipicamente lorentziano, mostrando que essa relação apresenta característica de ruído branco (terminologia utilizada para ruído independente da frequência) quando $f\tau \ll 1$ e apresenta espectro proporcional a $1/f^2$ para $f\tau \gg 1$. Se há muitos espectros lorentzianos, o ruído total $S_x^{Tot}(f)$ é dado através da soma de processos independentes. Matematicamente, esse novo espectro pode ser obtido através da introdução de um fator $g(\tau)$ inversamente proporcional à τ , isso implica que o processo lorentziano possui um tempo de relaxação τ satisfazendo a desigualdade $\tau_1 < \tau < \tau_2$ e $g(\tau)$ pode ser expresso como $g(\tau)d\tau = [1/\tau \ln(\tau_2/\tau_1)]d\tau$. Assim,

$$S_x^{Tot}(f) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} g(\tau) \langle (\Delta x)^2 \rangle \left(\frac{4\tau}{1 + (2\pi f\tau)^2} \right) d\tau$$

$$S_x^{Tot}(f) = \frac{2}{\pi \ln(\tau_2/\tau_1)} \left(\frac{1}{f} \right) \langle (\Delta x)^2 \rangle (\tan^{-1}(2\pi f \tau_2) - \tan^{-1}(2\pi f \tau_1)) \quad (5.61)$$

É possível identificar três regimes na Eq.(5.61): (1) para $f < (1/2\pi\tau_2)$, temos $S_x^{Tot}(f) = 4\tau_2 \langle (\Delta x)^2 \rangle / \ln(\tau_2/\tau_1)$, a qual é independente da frequência; (2) para $1/2\pi\tau_2 < f < 1/2\pi\tau_1$, temos $S_x^{Tot}(f) = \langle (\Delta x)^2 \rangle / \ln(\tau_2/\tau_1) f$, a qual apresenta um espectro proporcional a $1/f$; (3) para $f > 1/2\pi\tau_1$, temos $S_x^{Tot}(f) = \langle (\Delta x)^2 \rangle / \pi^2 \tau_1 \ln(\tau_2/\tau_1) f^2$, a qual decai mais rápido com $1/f^2$. Contudo, essa abordagem teórica é bem sucedida, pois apresenta um espectro proporcional $1/f$ em concordância com os experimentos.

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

$$S_I(f) = C \frac{\bar{I}^2}{N_c f^\alpha} \quad (5.62)$$

$$S_v(f) = C \frac{\bar{V}^2}{N_c f^\alpha} \quad (5.63)$$

onde $\alpha \approx 1$, N_c é o número total de portadores de carga livres, $C + 2 \times 10^{-3}$ é um coeficiente universal (coeficiente de Hooge). Pelo fato haver nos metais mais portadores livres em relação aos semicondutores, a amplitude do ruído $1/f$ é menor em condutores metálicos do que em semicondutores [63].

5.2.5 Ruído de Disparo Clássico

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

Considerando que cada pulso é caracterizado pelo índice k , e t_k é o instante que corresponde a chegada do k -ésimo pulso do ânodo. Um pulso pode ser descrito

por uma função $F(t - t_k; a_k)$, a qual depende se os pulsos são idênticos ou não, que será escrito no parâmetro aleatório $a_k = (a_{k1}, \dots, a_{km})$, esse parâmetro inclui a amplitude do pulso, a duração, etc. A quantidade medida é,

$$x(t) = \sum_k F(t - t_k; a_k) \quad (5.64)$$

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

$$P(n) = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} \quad (5.65)$$

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

$$\phi_{xk}(u) = \overline{\exp(iux_k)} = \int da w_a(a) \int_{-t_m/2}^{t_m/2} \frac{dt_k}{t_m} e^{iuF(t-t_k;a)}$$

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

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

onde $\theta = t - t'$. A média e a variância de x , de acordo com Eq.(5.4) e Eq.(5.5), são

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x w(x) = n_1 \int da w_a(a) \int_{-\infty}^{\infty} d\theta F(\theta, a) \\ \langle (\delta x)^2 \rangle &= n_1 \int da w_a(a) \int_{-\infty}^{\infty} d\theta F^2(\theta, a) \end{aligned} \quad (5.66)$$

Lembrando que estamos considerando um processo estacionário, a função de correlação (Eq.(5.7) e Eq.(5.8)) pode ser obtida,

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

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

$$S_x(f) = 2n_1 \int da w_a(a) |F(\omega; a)|^2$$

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

$$S_x(0) = 2Q^2 n_1$$

com,

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

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

$$S_I(0) = 2eI \quad (5.67)$$

que é a bem conhecida fórmula para o ruído de disparo clássico. Medindo o ruído $S_I(0)$ e a corrente I simultaneamente, é possível determinar a carga dos portadores de corrente. Veremos na próxima seção que para condutores mesoscópicos, o ruído shot apresenta um novo comportamento não somente devido a discretização da carga, mas também devido à estatística (férmions e bósons) que essa carga pertence.

5.2.6 Densidade espectral das flutuações da corrente

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

$$\Delta I_\alpha(t) \equiv I_\alpha(t) - \langle I_\alpha \rangle. \quad (5.68)$$

A função de correlação corrente-corrente (uma característica não aleatória da cinética das flutuações ao acaso, a qual mostra como as flutuações evoluem o tempo em média) entre os reservatórios α e β , $\mathbf{F}_{\alpha\beta}(t - t')$, é definida:

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta}(t - t') \equiv \frac{1}{2} (\langle \Delta I_\alpha(t) \Delta I_\beta(t') \rangle + \langle \Delta I_\beta(t') \Delta I_\alpha(t) \rangle). \quad (5.69)$$

Há várias definições na literatura para a função de correlação corrente-corrente, que diferem por um fator numérico. Utilizaremos aqui a definição usada por Landau [ref31]. Para um sistema estacionário, isto é, na ausência de campos externos dependentes do tempo, a função de correlação corrente-corrente deve ser dependente apenas da diferença $t - t'$.

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

$$\delta(\omega + \omega') \mathbf{S}_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi} (\langle \Delta I_\alpha(\omega) \Delta I_\beta(\omega') \rangle + \langle \Delta I_\beta(\omega') \Delta I_\alpha(\omega) \rangle), \quad (5.70)$$

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

A densidade espectral do ruído, Eq.(5.70), depende do valor esperado do produto de quadro operadores $\hat{a}$. Esse valor esperado para um sistema em equilíbrio é dado por (teorema de Wick),

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{a}_{\beta l}(E_2) \hat{a}_{\gamma m}^\dagger(E_3) \hat{a}_{\delta n}(E_4) \rangle - \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{a}_{\beta l}(E_2) \rangle \langle \hat{a}_{\gamma m}^\dagger(E_3) \hat{a}_{\delta n}(E_4) \rangle = \\ \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{kn} \delta_{ml} \delta(E_1 - E_4) \delta(E_2 - E_3) f_\alpha(E_1) [1 \mp f_\beta(E_2)]. \end{aligned} \quad (5.71)$$

onde o sinal de cima, $-$, corresponde a estatística de Fermi-Dirac, e o sinal de baixo, $+$, a estatística de Bose-Einstein. Também, fica implícito que para férmions, $f_\alpha(E)$ é a função de distribuição de Fermi e para bósons, $f_\alpha(E)$ é a função de distribuição de Bose.

Portanto, substituindo a Eq.(2.70) e Eq.(5.71) em Eq.(5.70) e integrando sobre ω' , tem-se:

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\gamma\delta} \sum_{mn} \int dE A_{\gamma\delta}^{mn}(\alpha; E, E + \hbar\omega) A_{\delta\gamma}^{nm}(\beta; E + \hbar\omega, E) \times \\ f_\gamma(E) [1 \mp f_\delta(E + \hbar\omega)] f_\delta(E + \hbar\omega) [1 \mp f_\gamma(E)]. \end{aligned} \quad (5.72)$$

A Eq.(5.72) é a expressão mais geral que se pode obter com a abordagem da matriz de espalhamento para a densidade espectral do ruído, observamos a relação de simetria $S_{\alpha\beta}(\omega) = S_{\alpha\beta}(-\omega)$. Com frequência arbitrária e uma matriz de espalhamento S qualquer, a Eq.(5.72) não conserva corrente e não é invariante de gauge. Portanto, para obtermos um sentido físico dessa equação, é necessário considerações adicionais próprias de cada problema.

5.3 Ruído de Disparo Quântico

Objetivando relacionar alguns dos vários tipos de ruído, descritos nas seções anteriores, com a abordagem da matriz de espalhamento, para tratar o ruído em condutores mesoscópicos, mostraremos que para certos parâmetros, a Eq.(5.72) congrega alguns dos tipos de ruído descritos, com exceção do ruído 1/f.

No caso da densidade espectral do ruído com frequência nula ($eV = 0$ e $k_B T \gg \hbar\omega = 0$), obtemos a relação [48]:

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta} \equiv S_{\alpha\beta}(\omega = 0) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\gamma\delta} \sum_{mn} \int dE A_{\gamma\delta}^{mn}(\alpha; E, E) A_{\delta\gamma}^{nm}(\beta; E, E) \times \\ f_\gamma(E) [1 \mp f_\delta(E)] f_\delta(E) [1 \mp f_\gamma(E)]. \end{aligned} \quad (5.73)$$

A Eq.(5.73) conserva a corrente e é invariante de gauge. Caso o condutor esteja em equilíbrio térmico a temperatura T com os reservatórios, a função de distribuição em todos os reservatórios são iguais ($f(E)$). Através da relação $f(1 \mp f) = -k_B T \partial f / \partial E$ e como a matriz de espalhamento é unitária, temos $\sum_{\gamma\delta} \text{Tr}(S_{\alpha\gamma}^\dagger S_{\alpha\delta} S_{\beta\delta}^\dagger S_{\beta\gamma}) = \delta_{\alpha\beta} N_\alpha$, onde o traço é tomado sobre os índices dos canais, N_α é o número de canais abertos no reservatório α . Assim,

$$S_{\alpha\beta} = \frac{2e^2 k_B T}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (2N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - \text{Tr}(S_{\alpha\beta}^\dagger S_{\alpha\beta} + S_{\beta\alpha}^\dagger S_{\beta\alpha})) \quad (5.74)$$

Esse é o ruído térmico de equilíbrio ou também conhecido como ruído de Nyquist-Johnson, cuja origem é devido às flutuações térmicas do número de ocupação dos portadores de carga entre os reservatórios. Para obtermos a forma familiar do ruído térmico, basta substituir a Eq.(3.57) na Eq.(5.74),

$$S_{\alpha\beta} = 2k_B T (G_{\alpha\beta} + G_{\beta\alpha}) \quad (5.75)$$

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

$$S_{\alpha\beta} = 4k_B T G_{\alpha\beta} \quad (5.76)$$

a qual é a expressão obtida anteriormente para o ruído térmico.

No limite de temperatura nula e considerando apenas um sistema fermiônico, a função de distribuição de Fermi-Dirac será uma função de Heaviside, $f_\alpha(E) = 1 - \theta(\mu_\alpha - E)$, com isso, a Eq.(5.73) pode ser escrita,

$$S_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{h} \sum_{\gamma \neq \delta} \int dE \text{Tr}(S_{\alpha\gamma}^\dagger S_{\alpha\delta} S_{\beta\delta}^\dagger S_{\beta\gamma}) (f_\gamma(E)(1 - f_\delta(E)) + f_\delta(E)(1 - f_\gamma(E))) \quad (5.77)$$

No caso de um condutor mesoscópico conectado a apenas dois reservatórios, a temperatura nula e fora do equilíbrio, o ruído está associado exclusivamente a discretização da carga. Devido à conservação da corrente, temos $S = S_{LL} = S_{RR} = -S_{LR} = -S_{RL}$. Levando-se em consideração a forma da matriz de espalhamento e a unitariedade da matriz de espalhamento $S (rr^\dagger + t^\dagger t = 1)$, obtém-se,

$$S = \frac{2e^2}{h} e|V| \text{Tr}(r^\dagger r t^\dagger t) \quad (5.78)$$

onde $|V|$ é a voltagem de bias, a matriz de espalhamento é calculada no nível de Fermi, e o traço é a soma sobre k, l, m, n . Essa é a relação básica entre o ruído de disparo quântico e a matriz de espalhamento, é a expressão para o ruído quântico como fonte exclusiva de ruído no sistema. Como a condutância, o ruído de disparo na base de auto-canais pode ser escrita como,

$$S = \frac{2e^3 |V|}{h} \sum_n T_n (1 - T_n) \quad (5.79)$$

onde T_n e $R_n = 1 - T_n$ são os coeficientes de transmissão e reflexão, respectivamente. Enfatiza-se que o ruído de disparo puro ($e|V| \neq 0$ e $k_B T = \hbar\omega = 0$) é, primeiramente, um ruído exclusivamente de sistemas fora do equilíbrio, segundo, esse ruído apresenta a forma da Eq.(5.79) devido à estatística fermiônica dos portadores de corrente (para férmions, o número de ocupação de um determinado estado n é zero ou um, o que implica $n^2 = n$ e $\overline{\Delta n} = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = T_n(1 - T_n)$); terceiro, o ruído de disparo não depende apenas dos coeficientes de transmissão como ocorre no caso clássico, mas sim do produto dos coeficientes de transmissão e reflexão. O caso do ruído Schottky, clássico, é recuperado para condutores com baixa transmissão (estatística poissoniana) em todos os canais.

$$S_P = \frac{2e^3|V|}{h} \sum_n T = 2e\langle I \rangle \quad (5.80)$$

Comparando a Eq.(5.79) e a Eq.(5.80), percebe-se que o ruído de disparo quântico é geralmente sub-poissoniano [67], quando são desprezadas interações coulombianas. A distinção entre o ruído poissoniano e ruído de disparo quântico é destacada nos limites opaco, $T_n = 0$ e transparente, $T_n = 1$, posto que o ruído poissoniano será nulo e máximo nesses limites, respectivamente. De outro modo, a fórmula para o ruído de disparo quântico prevê a completa supressão desse ruído em ambos os casos. Sendo que picos de ruído de disparo quântico ocorrerão quando $T_n = 1/2$, justamente entre os platôs de condutância na teoria de Landauer.

No regime clássico, $T_n \ll 1$, medidas do ruído poissoniano não acrescentam informações do que aquelas contidas nas medidas da condutância. Medidas simultâneas do ruído e da condutância sondarão a carga dos portadores, mas sem obter informação alguma da dinâmica de tais cargas. No entanto, medidas do ruído de disparo quântico fornecerão informações além das obtidas pela condutância no mesmo regime, pois o ruído apresenta dependência quadrática em relação aos coeficientes de transmissão, isso porque esse tipo de ruído é sensível não apenas a granularidade da carga, mas também a estatística que essas cargas obedecem, mesmo desprezando interações coulombianas entre as cargas, ainda persistirá uma correlação fundamental devido à anti-simetria da função de onda global perante a troca de duas partículas fermiônicas (princípio da exclusão de Pauli). Essa supressão do ruído de disparo abaixo do valor poissoniano, dado pela Eq.(5.79), foi um dos aspectos relevantes da teoria do ruído em sistemas mesoscópicos.

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

$$F = \frac{S_{LL}}{S_P} = \frac{\sum_n T_n(1 - T_n)}{\sum_n T_n} \quad (5.81)$$

o fator de Fano pode assumir valores entre zero (regime de ruído de disparo

quântico dominante) e um (domínio do ruído poissoniano). Em particular, no caso de apenas um canal, temos, $F = 1 - T$. Para alguns sistemas, o fator de Fano apresenta um valor universal: para condutores metálicos difusivos quase-1d ($L \gg l$) o fator de Fano é $1/3l$; em cavidades caóticas o fator Fano é $1/4$.

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

$$S(\omega = 0, T, V) = \frac{2e^2}{h} \sum_n \int dE (T_n(E) (f_L(1 \mp f_L) + f_R(1 \mp f_R)) \pm T_n(E)(1 - T_n(E))(f_L - f_R)^2) \quad (5.82)$$

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

$$S(\omega = 0, T, V) = \frac{2e^2}{h} \left(2k_B T \sum_n T_n^2 + e|V| \coth \left(\frac{e|V|}{2k_B T} \right) \sum_n T_n(1 - T_n) \right) \quad (5.83)$$

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

Quando a frequência não é nula ($\omega \neq 0$), teremos uma densidade espectral do ruído dependente da frequência. No caso de dois terminais e considerando que a matriz de espalhamento seja independente da energia, a Eq.(5.72) fornecerá:

$$S_{LL}(\omega, T, V) = \frac{e^2}{h} \left[\sum_n T_n^2 \int dE (f_{LL}(E, \omega) + f_{RR}(E, \omega)) + \sum_n T_n(1 - T_n) \int dE (f_{LR}(E, \omega) + f_{RL}(E, \omega)) \right] \quad (5.84)$$

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

$$S_{LL}(\omega, T, V) = \frac{e^2}{h} \left[2\hbar\omega \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \sum_n T_n^2 + \left[(\hbar\omega + eV) \coth \left(\frac{\hbar\omega + eV}{2k_B T} \right) + (\hbar\omega - eV) \coth \left(\frac{\hbar\omega - eV}{2k_B T} \right) \right] \sum_n T_n(1 - T_n) \right] \quad (5.85)$$

Na Eq.(5.85) há a coexistência de diversos tipos de ruído devido à frequência, temperatura e voltagem, e é um resultado geral, válido para coeficientes de transmissão calculados no nível de Fermi. Dela, pode-se extrair os outros tipos de ruído já estudados. Quando $\omega = 0$, temos a coexistência do ruído térmico e de disparo, Eq.(5.83). No regime de equilíbrio ($eV = 0$),

$$S_{LL}(\omega, T, V = 0) = \frac{e^2 \omega}{\pi} \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \sum_n T_n \quad (5.86)$$

o qual é a mesma relação para o teorema flutuação-dissipação da Eq.(5.55). Quando a temperatura é nula e $\hbar \omega > eV$, a Eq.(5.85) fornece um ruído dependente da frequência chamado ruído quântico (flutuação quântica de vácuo), o qual é o tipo de ruído dominante na região de altas frequências,

$$S_{LL}(\omega, T = V = 0) = \frac{e^2}{\pi} |\omega| \sum_n T_n = 2\hbar |\omega| G \quad (5.87)$$

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

$$S_{LL}(\omega, T = 0, V) = \frac{e^2}{\pi \hbar} \left(\hbar |\omega| \sum_n T_n^2 + eV \sum_n T_n (1 - T_n) \right) \quad (5.88)$$

o ruído quântico apresenta dependência linear com a frequência, com frequência nula é recuperado o espectro do ruído de disparo quântico puro, Eq.(5.79). Um *crossover* ocorre quando $\hbar \omega = \pm eV$.

5.3.1 Classificação do ruído

Pode-se classificar os vários tipos de ruídos estudados em função da frequência, como mostra a ilustração na Fig.(5.1). Na qual identificamos três regimes: 1. Em baixa frequência, onde o ruído $1/f$ é o dominante; 2. Frequências intermediárias, onde os ruídos térmico e shot (ruídos brancos) são as fontes majoritárias; 3. Alta frequência, onde o ruído quântica é o dominante.

5.4 Ruído de Disparo em Dispositivos Quirais

Essa seção é devotada a reportar os resultados originais dessa dissertação, produto do trabalho de Ivana Carneiro de Lucena, Marília Santos, Jorge Gabriel Ramos.

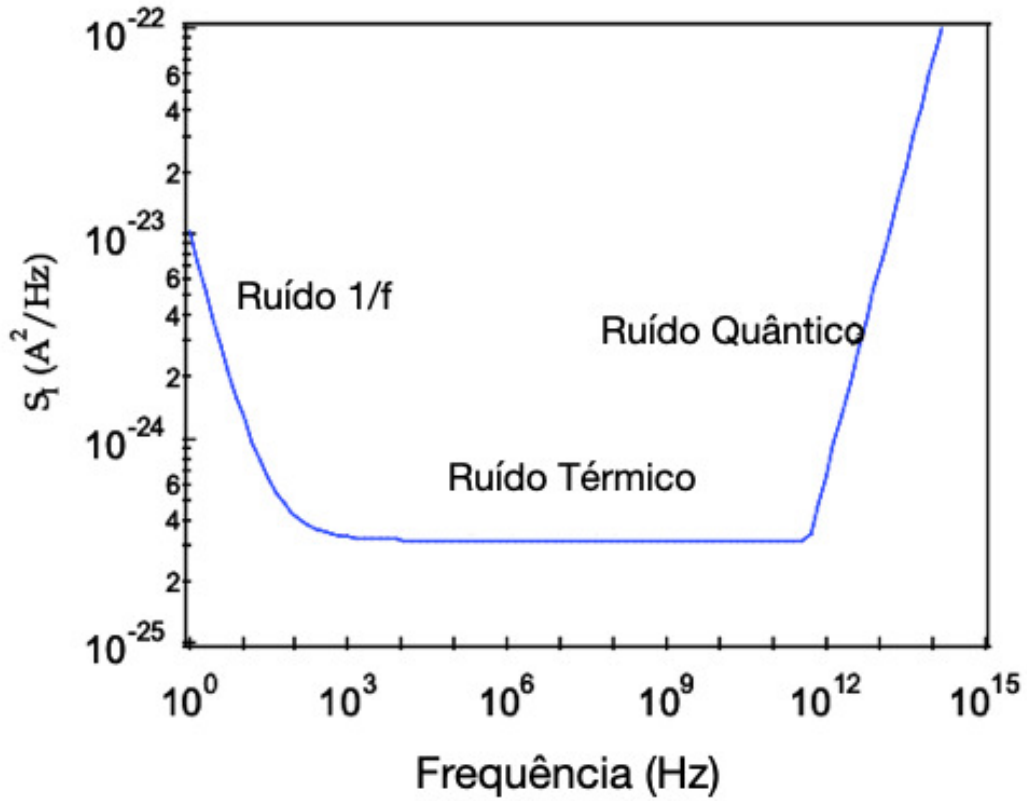


Figura 5.1 Classificação do ruído em função da frequência. Figura retirada da referência [4]

Apesar de grandes esforços, sinais quânticos dos graus de liberdade quântica são dificilmente encontrados no transporte eletrônico quântico [78]. A principal razão é que o aumento da largura dos terminais conectados à amostra cria mais canais que eliminam facilmente as correções de interferência quântica da condutância [83, 76]. Em particular, os resultados analíticos conhecidos mostram que a correção é insignificante quando comparada ao principal termo ôhmico. Como principal motivo para essa contribuição incipiente, podemos indicar que a condutância não é significativamente afetada pela retroespalhamento [81, 80]. De fato, pelo formalismo de Landauer, a condutância depende basicamente de probabilidades de tunelamento [47, 79]. Uma maneira de introduzir mecanismos de retroespalhamento seria a introdução de contatos não ideais, que ligam os terminais ideais ao ponto quântico do grafeno. No entanto, os contatos podem competir facilmente com os graus de liberdade sublattice, o que torna esse método pouco esclarecedor ou impróprio.

Neste contexto, propomos um conjunto de possibilidades para a medição direta

dos efeitos do transporte quântico da simetria quiral/sub-rede em bilhares de Dirac, usando a potência do ruído de disparo. O ruído de disparo, como vimos em seções anteriores, ocorre mesmo na temperatura nula, basicamente como efeito da discretização da matéria e como extensão espacial da função da onda de elétrons [48, 47]. Nossa ideia é baseada no fato de que a potência do ruído de disparo carrega os termos de retroespalhamento na formulação de Landauer-Büttiker, mesmo com contatos ideais. No caso específico de uma estrutura quiral, devemos lembrar não haver uma maneira matemática de descrever toda a rede Bravais com um par de vetores. Isso sugere a criação de uma base que, induz naturalmente a formação de sub-redes. A necessidade de usar uma base forma picos de Bragg associados à retroespalhamento; isto é, a potência do ruído de disparo deve oferecer fortes sinais quânticos da estrutura quiral, em oposição à condutância. Portanto, nosso estudo revelará sinais quânticos fortemente mensuráveis associados à simetria do sub-rede e ao transporte de neutrinos relativísticos sem massa..

5.4.1 Universalidade: Potência do Ruído de disparo

Nessa seção, investigamos em detalhe como a simetria quiral afeta de maneira não-trivial o termo principal da correção de interferência quântica do ruído de disparo, este se faz presente mesmo a temperatura nula. Para tal, seguindo a formulação de Landauer-Büttiker, tem-se:

$$P = \frac{4e^3|V|}{h} \mathbf{Tr}[tt^\dagger(1 - tt^\dagger)]. \quad (5.89)$$

Nota-se, através dessa formulação, que a potência do ruído de disparo contempla os termos de transmissão, $tt^\dagger$ e, termos de reflexão (retroespalhamento), $rr^\dagger = (1 - tt^\dagger)$.

Primeiramente, para efetuarmos o cálculo utilizando a técnica diagramática, reescrevemos a potência do ruído de disparo, Eq.(5.89), como função da matriz de espalhamento, para tal, substituímos a Eq.(4.82) em Eq.(5.89) como segue:

$$p = \mathbf{Tr}(C_1 S C_2 S^\dagger) - \mathbf{Tr}[(C_1 S C_2 S^\dagger)^2] \quad (5.90)$$

$$= g - \mathbf{Tr}[(C_1 U^\dagger \Sigma_z U C_2 U^\dagger \Sigma_z U)^2], \quad (5.91)$$

onde $p = P/(4e^3|V|/h)$ é a potência do ruído de disparo adimensional e g é a condutância adimensional, calculada no capítulo anterior, Eq.(4.86). A média da Eq.(5.90) pode ser calculada desenvolvendo a seguinte integral:

$$\langle p \rangle = \langle g \rangle - \int d\mu \mathbf{Tr}[(C_1 U^\dagger \Sigma_z U C_2 U^\dagger \Sigma_z U)^2], \quad (5.92)$$

onde o último termo é composto por oito matrizes U .

Para desenvolver a integral da Eq.(5.92), também usamos o método diagramático [72]. Depois de um extensivo cálculo, identificamos 11024 diagramas que contribuem para a média da Eq.(5.92). A proliferação de diagramas se deve a simetria quiral, esta faz com que o número de matrizes unitárias dobre no traço da potência do ruído de disparo. Se a matriz U da Eq.(5.90) for unitária, vão existir 2000 diagramas, enquanto para o caso ortogonal e simplético vão existir 11024 diagramas. A soma desses diagramas resulta na seguinte média:

$$\langle p \rangle_{\beta=1} = \frac{4N_1N_2N_T[4(N_1^2N_2 + N_1N_2^2) + 2N_T^2 - 3(N_T - 1)]}{(2N_T - 3)(2N_T - 1)(N_T + 3)(N_T + 1)(2N_T + 1)}, \quad (5.93)$$

$$\langle p \rangle_{\beta=2} = \frac{16N_1N_2N_T(2N_1N_2 - 1)}{(2N_T + 3)(2N_T - 3)(2N_T + 1)(2N_T - 1)}, \quad (5.94)$$

$$\langle p \rangle_{\beta=4} = \frac{16N_1N_2N_T[32(N_1^2N_2 + N_1N_2^2) - 8N_T^2 - 3(2N_T - 1)]}{(4N_T + 3)(4N_T + 1)(2N_T - 3)(2N_T - 1)(4N_T - 1)}. \quad (5.95)$$

As Eqs.(5.93)-(5.95) configuram os primeiros resultados totalmente originais dessa dissertação. Tomando o limite $N_T \gg 1$, o qual é mais facilmente atingido experimentalmente, expandimos as Eqs.(5.93)-(5.95) em função de N_T , o que nos leva ao seguinte expressão:

$$\langle p \rangle = 2 \frac{N_1^2 N_2^2}{N_T^3} + \left(\frac{2}{\beta} - 1 \right) \frac{N_1 N_2 (N_1 - N_2)^2}{N_T^4} - \left(\frac{2}{\beta} - 1 \right) \frac{N_1^2 N_2^2}{N_T^4} + \mathcal{O}(N_T^{-1}) \quad (5.96)$$

Desse resultado, percebe-se que o termo principal de correção de interferência quântica do ruído, obtido para os ensembles de Wigner-Dyson, tem semelhanças até o segundo termo da Eq.(5.96)[19]. Um experimento central da distribuição completa de valores aleatórios da potência do ruído de disparo e, conseqüentemente, do termo principal de correção de interferência quântica para as classes de simetria de Wigner-Dyson (representado por semicondutores usuais) foi realizado na Ref.[11]. Sendo assim, conclui-se que no último termo da Eq.(5.96) emerge uma contribuição não trivial da simetria de sub-rede. Doravante, devido sua importância, denominaremos a contribuição exclusiva da simetria quiral/sub-rede, presente em materiais como o grafeno, de **termo quiral**(TQ), $p_{wl}^{CT} = -(2/\beta - 1)N_1^2 N_2^2 / N_T^4$. Esse termo de correção quântica para o ruído de disparo é particularmente relevante quando os terminais são simétricos (possuem um igual número de canais), tendo em vista que, nesse regime, para o Bilhar de Schrödinger não contribuem termos de interferência quântica.

Tomando o caso simétrico, $N_1 = N_2 = N$, na Eq.(5.96), o termo de correção da interferência quântica fica escrito do seguinte modo,

$$\langle \delta p \rangle = p_{wl}^{CT} = \left(1 - \frac{2}{\beta} \right) \frac{1}{16}. \quad (5.97)$$

A Eq.(5.97) mostra que o termo principal de correção de interferência quântica da potência do ruído de disparo para dispositivos quirais é finito, fato este que contrasta com o termo correspondente para bilhar de Schrödinger, onde o termo de correção é nulo na configuração simétrica [19]. Diferentemente do caso da correção quântica na condutância, o termo de principal de correção da interferência quântica da potência do ruído de disparo carrega informação sobre a simetria de sub-rede que pode ser acessada experimentalmente.

5.4.2 Simulação Numérica

Objetivando confirmar os resultados das Eqs.(5.93)-(5.95), desenvolvemos uma simulação numérica através da formulação de Mahaux-Weidenmüller [39]. A matriz de espalhamento da Eq.(4.82) fica escrita em função da energia de Fermi (E_F) e do hamiltoniano (H) que descreve os estados ressonantes dentro do ponto quântico:

$$S = \mathbf{1} - 2i\pi W^\dagger (E_F - H + i\pi W W^\dagger)^{-1} W. \quad (5.98)$$

O acoplamento dos estados ressonantes com os modos propagantes dos dois terminais é representado pela matriz determinística $W = (W_1, W_2)$. Além disso, essa matriz determinística não considera processos diretos, ou seja, a condição de ortogonalidade $W_i^\dagger W_j = 1/\pi \delta_{i,j}$ é mantida para evitar processos cujos elétrons não entram no ponto quântico.

Na abordagem da TMA, o hamiltoniano de Dirac, que descreve o grafeno, é membro do ensemble gaussiano(EG)[40]. Ademais, suas entradas têm distribuição gaussiana dada por

$$P(H) \propto \exp \left[-\frac{M}{\lambda^2} \text{Tr}(H^\dagger H) \right] \quad (5.99)$$

onde $\lambda = M\Delta/\pi$ é a variância relacionada ao espaçamento de níveis eletrônicos, Δ , enquanto M é a dimensão da matriz H e o número de ressonâncias suportadas pelo dispositivo quiral. Para garantir o regime caótico e consequentemente a universalidade dos observáveis em estudo, o número de ressonâncias dentro do ponto é muito grande ($M \gg N_T$) [5].

Usando as Eqs.(3.61),(5.89) e (4.82), nós desenvolvemos uma simulação numérica para os dispositivos quirais: Na Fig.(5.2) mostramos o caso simétrico ($N_i = N$) e na Fig.(5.3) o caso assimétrico está representado ($N_1 = 1$ e um N_2 arbitrário). Estes gráficos foram obtidos através de 2.5×10^4 realizações com $M = 300$. Os círculos representam a média numérica dos observáveis enquanto as linhas sólidas representam os resultados analíticos, Eqs.(5.93)-(5.95). As simulações numéricas apresentam grande concordância com os resultados analíticos obtidos via método diagramático.

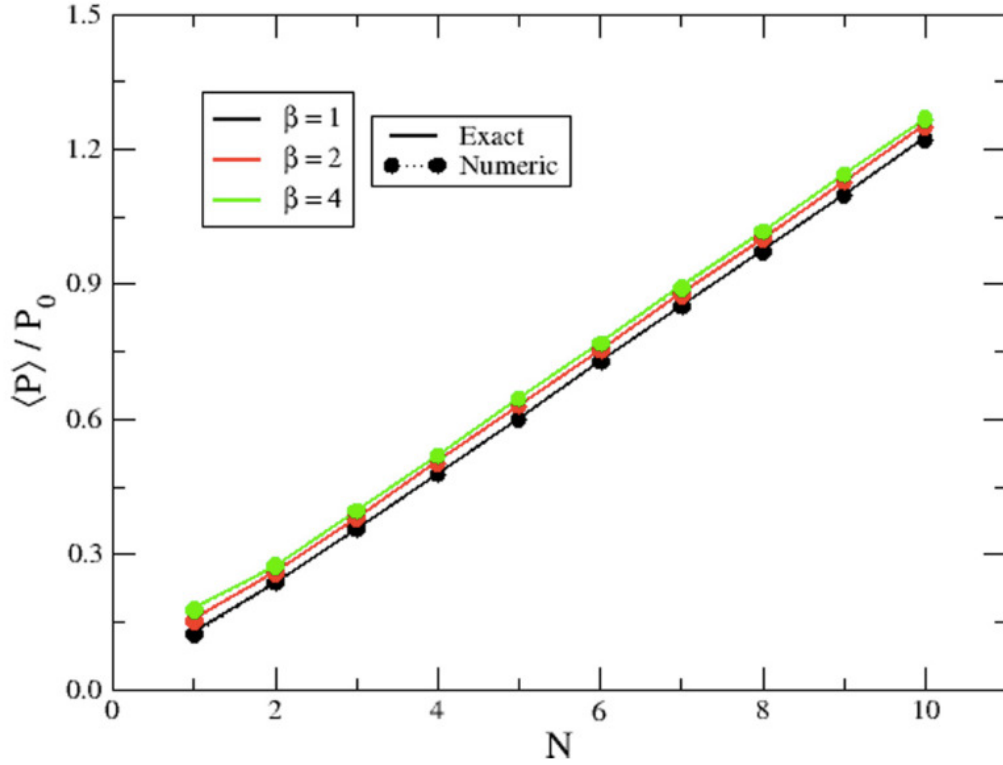


Figura 5.2 Média da potência do ruído de disparo realizada sobre o ensemble de matrizes S para um ponto quântico de grafeno com contatos simétricos. Os círculos são os resultados numéricos, enquanto as linhas representam os resultados analíticos. Nota-se a separação explícita entre as linhas que representam os três ensembles, essa separação é causada apenas pelo termo de interferência quântica da simetria de sub-rede, o termo quirais (TQ).

De acordo com a Fig.(5.3), existe um claro distanciamento entre as curvas características de cada ensemble universal. A implicação imediata é a existência de um termo distinto de correção da interferência quântica para cada ensemble universal. Contudo, de um modo muito peculiar, as curvas representadas na Fig.(5.2) mostram que a interferência quântica em dispositivos quirais origina a separação entre as curvas mesmo no caso simétrico, uma característica inexistente nos semicondutores comuns. Essa separação é precisamente o termo p_{wl}^{CT} presente na Eq.(5.96). O nosso resultado é uma impressão digital do transporte eletrônico em dispositivos quirais.

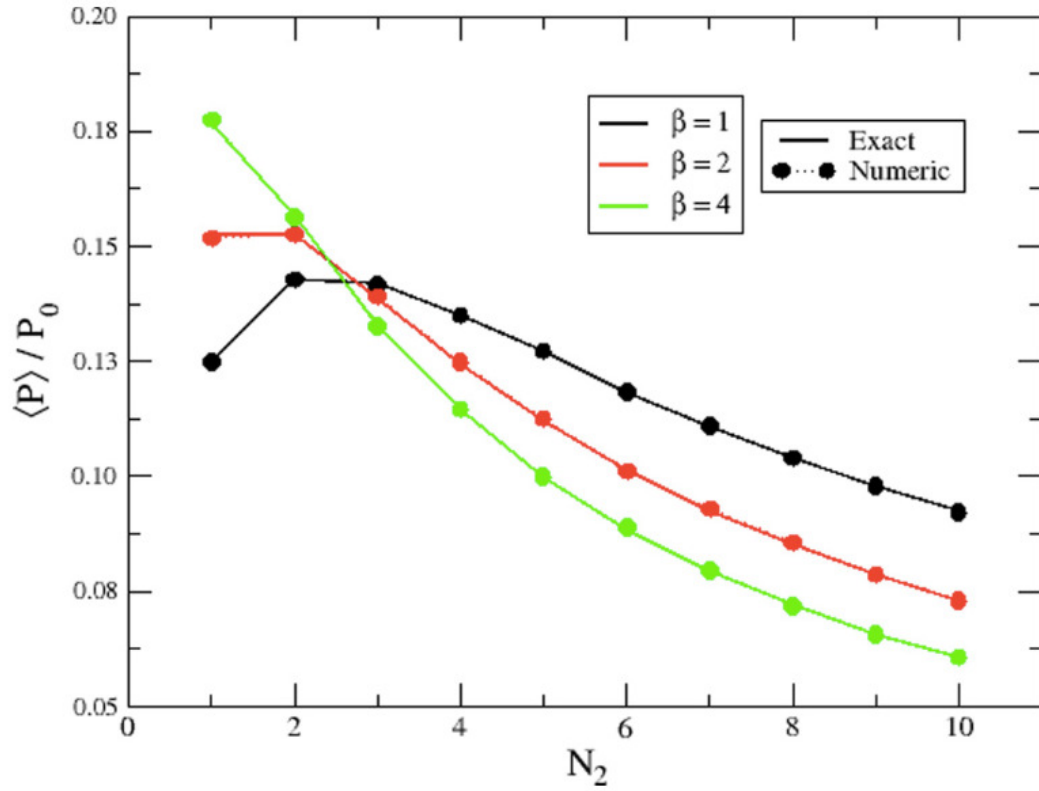


Figura 5.3 Média da potência do ruído de disparo realizada sobre o ensemble de matrizes S para um ponto quântico de grafeno com contatos assimétricos. Os círculos são os resultados numéricos, enquanto as linhas representam os resultados analíticos. Observa-se que as curvas para os três ensembles universais são separadas devido às correções de interferência quântica.

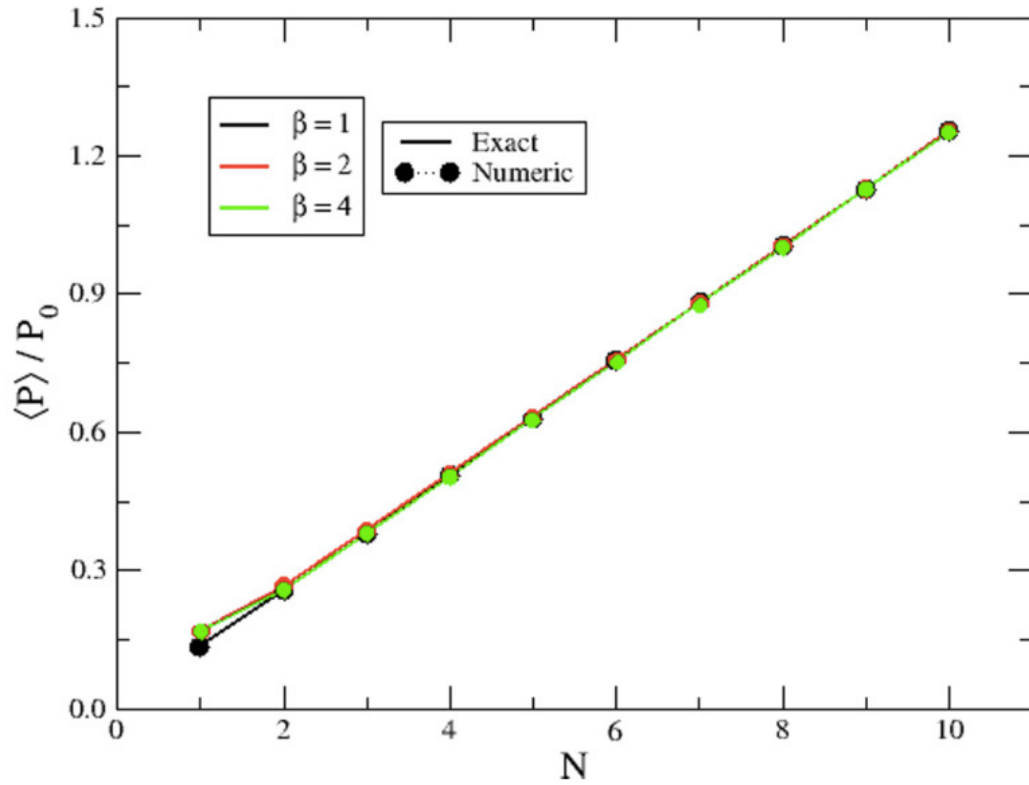


Figura 5.4 Média da potência do ruído de disparo realizada sobre o ensemble de matrizes S para um bilhar de Schrödinger com contatos simétricos. Os círculos são os resultados numéricos, enquanto as linhas representam os resultados analíticos. Nota-se, nesse caso, que não existe separação entre as curvas, caracterizando a ausência do termo de interferência quântica no caso de contatos simétricos.

Conclusões e Perspectivas

O objetivo desta dissertação foi compreender os efeitos da estrutura de sub-rede intrínseca no transporte de elétrons através de Pontos Quânticos de Dirac, nanoestruturas de grafeno. Para isto, fizemos um estudo detalhado dos dois principais observáveis de transporte, a condutância e a potência do ruído de disparo. No caso da condutância, quando o número de canais $N_T \gg 1$, o termo principal de correção de interferência quântica para a classe de universalidade quiral é idêntico ao da classe de Wigner-Dyson. Dessa forma, percebemos que a condutância não é afetada pela estrutura de sub-rede no limite semiclássico. Conforme a nossa interpretação, essa ausência de sinal da quiralidade se deve a inexistência de termos de retroespalhamento na condutância e, conseqüentemente, a irrelevância da estrutura de sub-rede. Sendo assim, nos questionamos acerca de como detectar o sinal da simetria quiral.

Nosso tratamento consistiu em estudar a potência do ruído de disparo, uma vez que este observável contempla o produto de termos de transmissão, $tt^\dagger$, e dos termos de retroespalhamento, $rr^\dagger$. Realizamos um cálculo analítico exato nas classes de simetria universal quiral e mostramos o surgimento de um termo que sinaliza o transporte quântico através de sub-redes. Este termo é uma impressão digital da quiralidade e pode ser medido para qualquer número de canais abertos com a nossa expressão analítica, tornando nosso resultado muito mais atraente se comparada à pletora de demais resultados existentes na literatura. É interessante destacar que medidas da estrutura de banda do grafeno indicam que a simetria de sub-rede é quebrada em uma escala de energia de aproximadamente 0.1 eV, o que é uma escala muito grande para a manifestação de efeitos mesoscópicos. Para resolver tal problema, nós estudamos um ponto quântico de grafeno grande o suficiente para conter muitas ressonâncias acopladas a guias finíssimos, desse forma, mesmo em escalas de baixas energias existirá pelo menos um canal aberto. Nesse regime, as flutuações mesoscópicas ocorrerão no espalhamento isoenergético e podemos considerar estruturas em qualquer escala de energia.

Além disso, os resultados analíticos foram testados e confirmados através de uma simulação numérica. Também simulamos os Bilhares de Schrödinger (semicondutores comuns) e mostramos que a média da potência do ruído de

disparo coincide para os três ensambles da simetria de Wigner-Dyson, no caso de contatos simétricos. Observamos que o mesmo não acontece para sistemas que carregam a simetria quiral, como o grafeno.

Nossos resultados elucidam de forma inédita e clara o papel desempenhado pela simetria quiral no transporte de elétrons através de nanoestruturas de grafeno. Esta metodologia de detecção do sinal quiral poderá ter impacto no desenvolvimento de novas tecnologias, principalmente na computação quântica topológica. Nossas análises possibilitam acessar mais facilmente o grau de liberdade de Valley e, conseqüentemente, têm um grande impacto na valleytrônica.

Um passo natural em direção à continuidade deste trabalho será estudar como esse novo grau de liberdade consequente da simetria quiral pode ser usado no processamento de informação quântica. Além disso, pretendemos estender nossas investigações para incluir efeitos de decoerência, objetivando entender os efeitos do ambiente no sistema.

APÊNDICE A

Pesos dos diagramas para o ensemble de Wigner-Dyson

Os pesos obedecem a certas relações recursivas, estas relações são específicas para cada ensemble,

- Classe Unitária ($\beta = 2$):

$$V_1 = \frac{1}{N}, \quad (\text{A.1})$$

$$V_{1,1} = \frac{N}{N(N^2 - 1)}, \quad (\text{A.2})$$

$$V_{1,1,1} = \frac{-2 + N^2}{N(N^2 - 1)(N^2 - 4)}, \quad (\text{A.3})$$

$$V_2 = \frac{-1}{N(N^2 - 1)}, \quad (\text{A.4})$$

$$V_{2,1} = \frac{-N}{N(N^2 - 1)(N^2 - 4)}, \quad (\text{A.5})$$

$$V_3 = \frac{2}{N(N^2 - 1)(N^2 - 4)}, \quad (\text{A.6})$$

$$V_{1,1,1,1} = \frac{6 - 8N^2 + N^4}{N^2(N^2 - 1)(N^2 - 4)(N^2 - 9)}, \quad (\text{A.7})$$

$$V_{2,1,1} = \frac{4N - N^3}{N^2(N^2 - 1)(N^2 - 4)(N^2 - 9)}, \quad (\text{A.8})$$

$$V_{2,2} = \frac{6 + N^2}{N^2(N^2 - 1)(N^2 - 4)(N^2 - 9)}, \quad (\text{A.9})$$

$$V_{3,1} = \frac{-3 + 2N^2}{N^2(N^2 - 1)(N^2 - 4)(N^2 - 9)}, \quad (\text{A.10})$$

$$V_4 = \frac{-5N}{N^2(N^2 - 1)(N^2 - 4)(N^2 - 9)}. \quad (\text{A.11})$$

- Classe Simplética ($\beta = 4$):

$$V_{1,1} = \frac{1 - 2N}{2N(2N - 1)(2N - 3)}, \quad (\text{A.12})$$

$$V_2 = \frac{1}{2N(-2N + 1)(-2N + 3)}. \quad (\text{A.13})$$

- Classe Ortogonal ($\beta = 1$):

$$V_1 = \frac{1}{N + 1}, \quad (\text{A.14})$$

$$V_{1,1} = \frac{2 + N}{N(N + 1)(N + 3)}, \quad (\text{A.15})$$

$$V_{1,1,1} = \frac{2 + 5N + N^2}{N(N - 1)(N + 1)(N + 3)(N + 5)}, \quad (\text{A.16})$$

$$V_2 = \frac{-1}{N(N + 1)(N + 3)}, \quad (\text{A.17})$$

$$V_{2,1} = \frac{-3 - N}{N(N - 1)(N + 1)(N + 3)(N + 5)}, \quad (\text{A.18})$$

$$V_3 = \frac{2}{N(N - 1)(N + 1)(N + 3)(N + 5)}, \quad (\text{A.19})$$

$$V_{1,1,1,1} = \frac{-32 - 8N + 28N^2 + 11N^3 + N^4}{N(N - 2)(N - 1)(N + 1)(N + 2)(N + 3)}, \quad (\text{A.20})$$

$$V_{2,1,1} = \frac{-4 - 18N - 9N^2 - N^3}{N(N - 2)(N - 1)(N + 1)(N + 2)(N + 3)}, \quad (\text{A.21})$$

$$V_{2,2} = \frac{24 + 7N + N^2}{N(N - 2)(N - 1)(N + 1)(N + 2)(N + 3)}, \quad (\text{A.22})$$

$$V_{3,1} = \frac{10 + 12N + 2N^2}{N(N - 2)(N - 1)(N + 1)(N + 2)(N + 3)}, \quad (\text{A.23})$$

$$V_4 = \frac{-11 - 5N}{N(N - 2)(N - 1)(N + 1)(N + 2)(N + 3)}. \quad (\text{A.24})$$

APÊNDICE B

Pesos dos diagramas para os ensembles com simetria quirai

Os pesos obedecem a certas relações recursivas:

- Classe Unitária ($\beta = 2$):

$$V_1 = \frac{1}{N}, \quad (\text{B.1})$$

$$V_{1,1} = \frac{N+1}{N(N-1)(N+2)}, \quad (\text{B.2})$$

$$V_2 = \frac{-1}{N(N-1)(N+2)}, \quad (\text{B.3})$$

$$V_{2,1} = \frac{-1}{N(N-1)(N-2)(N+4)}, \quad (\text{B.4})$$

$$V_3 = \frac{2}{N(N-1)(N-2)(N+2)(N+4)}, \quad (\text{B.5})$$

$$V_4 = \frac{-5N+6}{N(N+1)(N+2)(N+4)(N+6)(N-1)(N-2)(N-3)}, \quad (\text{B.6})$$

$$V_{3,1} = \frac{2N+8}{N(N+1)(N+2)(N+4)(N+6)(N-1)(N-2)(N-3)}, \quad (\text{B.7})$$

$$V_{2,2} = \frac{N^2+5N+18}{N(N+1)(N+2)(N+4)(N+6)(N-1)(N-2)(N-3)}, \quad (\text{B.8})$$

$$V_{2,1,1} = \frac{N^3-6N^2-3N+6}{N(N+1)(N+2)(N+4)(N+6)(N-1)(N-2)(N-3)}, \quad (\text{B.9})$$

$$V_{1,1,1,1} = \frac{N^4+7N^3+N^2-35N-6}{N(N+1)(N+2)(N+4)(N+6)(N-1)(N-2)(N-3)}. \quad (\text{B.10})$$

- Classe Ortogonal ($\beta = 1$):

$$V_{1,1} = \frac{2N+1}{(2N-1)(2N+2)}, \quad (\text{B.11})$$

$$V_2 = \frac{1}{2N(2N-1)(2N+2)}. \quad (\text{B.12})$$

- Classe Simplética ($\beta = 4$):

$$V_{1,1} = \frac{1}{(2N-1)(2N+1)}, \quad (\text{B.13})$$

$$V_2 = \frac{-1}{2N(2N-1)(2N+1)}. \quad (\text{B.14})$$

Referências Bibliográficas

- [1] DAS SARMA *et al.* **Valley-Based Noise-Resistant Quantum Computation Using Si Quantum Dots.** *Phys. Rev. Lett.* 108:126804, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.126804>
- [2] LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. **Quantum computation with quantum dots.** *Phys. Rev. A.* 57:120, 1998. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.57.120>
- [3] TRAUZETTEL, B. *et al.* **Spin qubits in graphene quantum dots.** *Nature Phys.* 3, p.192–196, 2007. <https://doi.org/10.1038/nphys544>
- [4] KIM, Y. N. **Correlated Electron Transport in One dimensional Mesoscopic Conductores.** Tese, Stanford University, 2006
- [5] RAMOS, J. G. G. S.; BARBOSA, A. L. R.; BAZEIA, D.; HUSSEIN, M. S.; LEWENKOPF, C. H. **Generalized correlation functions for conductance fluctuations and the mesoscopic spin Hall effect.** v.86, pp. 235112, 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.235112>
- [6] BEENAKKER, C. **Quantum Shot Noise.** *Physics Today.* v.56, 5, 37, 2003. <https://doi.org/10.1063/1.1583532>
- [7] LIN, J.; MARCOLLI, M.; OOGURI, H.; STOICA, B. **Locality of Gravitational Systems from Entanglement of Conformal Field Theories.** *Phys. Rev. Lett.* 114:221601, 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.221601>
- [8] ZU, C. *et al.* **Experimental realization of universal geometric quantum gates with solid-state spins.** *Nature.* 514, 72–75, 2014. <https://doi.org/10.1038/nature13729>
- [9] NAZAROV, Y.; BLANTER, Y. **Quantum Transport: Introduction to Nanoscience.** Cambridge: Cambridge University Press, 2009. <https://doi.org/10.1017/CB09780511626906>

- [10] DATTA, S. **Electronic Transport in Mesoscopic Systems**. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. <https://doi.org/10.1017/CB09780511805776>
- [11] GUSTAVSSON, S. *et al* **Counting Statistics of Single Electron Transport in a Quantum Dot**. *Phys. Rev. Lett.* 96:076605, 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.076605>
- [12] TOUZALIN, A. *et al*. **Quantum Manifesto**. 2016. Disponível em: http://qurope.eu/system/files/u7/93056_Quantum%20Manifesto_WEB.pdf.
- [13] LOBKIS, O. I.; ROZHKOV, I. S.; WEAVER, R. L. **Nonexponential Dissipation in a Lossy Elastodynamic Billiard: Comparison with Porter-Thomas and Random Matrix Predictions**. *Phys. Rev. Lett.* v.91, p.194101, n. 4, 2003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.194101>
- [14] HEMMADY, S. *et al*. **Universal statistics of the scattering coefficient of chaotic microwave cavities**. *Phys. Rev. E* 71:056215, 2005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.056215>
- [15] STÖCKMANN, H. **Quantum Chaos: An Introduction**. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. <https://doi.org/10.1017/CB09780511524622>
- [16] KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. New York: Wiley and Sons, 2012. ISBN:9780471415268
- [17] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. Orlando: Cengage Learning, 1976. ISBN: 8131500527, 9788131500521
- [18] ANDERSON, P. W. **More Is Different**. *Science*. v. 177, i. 4047, pp. 393-396, 1972. <https://doi.org/10.1126/science.177.4047.393>
- [19] BEENAKKER, C. W. J. **Random-matrix theory of quantum transport**. *Rev. Mod. Phys.* v.69, 731, 1997. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.69.731>
- [20] ALHASSID, Y. **The statistical theory of quantum dots**. *Rev. Mod. Phys.* 72, 895, 2000. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.72.895>
- [21] BÜTTIKER, M.; PRÊTRE, A.; THOMAS, H. **Dynamic conductance and the scattering matrix of small conductors**. *Phys. Rev. Lett.* 70:4114, 1993. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.4114>
- [22] RITTER, K.; LYDING, J. **The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons**. *Nature Mater* v.8, p.235–242, 2009. <https://doi.org/10.1038/nmat2378>

- [23] GÜÇLÜ, A. D.; POTASZ, P.; HAWRYLAK, P. **Electric-field controlled spin in bilayer triangular graphene quantum dots.** *Phys. Rev. B* 84, 035425, 2011. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.035425>
- [24] CASTRO NETO, A. H. et al. **The electronic properties of graphene.** *Rev. Mod. Phys.* v.81, p.109-162, 2009. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [25] DAS SARMA, S.; SHAFFIQUE, A.; HWANG, E. H.; ROSSI, E. **Electronic transport in two-dimensional graphene** *Rev. Mod. Phys.* v.83, p.407-470, 2011. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.407>
- [26] SZE, M. S.; KWOK, K. NG. **Physics of Semiconductor Devices.** John Wiley and Sons, 2007. DOI:10.1002/0470068329
- [27] CHIQUITO, A. J. **Pontos quânticos: átomos artificiais e transistores atômicos** *Rev. Bras. de Ens. Fis.* v.21, p. 514, 1999. <https://doi.org/10.1590/S1806-11172001000200004>
- [28] EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas.** Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979. ISBN: 8570013094, 9788570013095
- [29] CHALLIS, L. J. **Physics in less than three dimensions.** *Contemporary Physics.* v.33, p.111, 1992. <https://doi.org/10.1080/00107519208219535>
- [30] HOLCOMB, D. F. **Quantum electrical transport in samples of limited dimensions** *Am. J. Phys.* v.67, p.278, 1999. <https://doi.org/10.1119/1.19251>
- [31] JACAK, L. **Semiconductor quantum dots - towards a new generation of semiconductor devices** *Eur. J. Phys.* v.21, p.487, 2000. <https://doi.org/10.1088/0143-0807/21/6/301>
- [32] RAMOS, J. G. G. S. **Modelo Sigma Não-linear supersimétrico: Aplicações em nanoestruturas caóticas.** Tese, UFPE, 2010. Disponível em: <<https://repositorio.ufpe.br/handle/123456789/6611>>
- [33] JANSSEN, M. **Fluctuations and Localization in Mesoscopic Electron Systems.** Germany: World Scientific Publishing Company, 2001. <https://doi.org/10.1142/4335>
- [34] AKKERMANS, E.; MONTAMBAUX, G. **Mesoscopic Physics of Electrons and Photons.** Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN-10: 0521349478

- [35] GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**, (2nd ed.), Prentice Hall, 2004. ISBN 0-13-111892-7.
- [36] LANDAUER, R. **Conductance from transmission: common sense**. *Phys. Scr.*, v.110, 1992. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/1992/T42/020>
- [37] IMRY, Y. **Directions in Condensed Matter Physics**, World Scientific, pp.10, 1986. https://doi.org/10.1142/9789814415309_0004
- [38] NISHIGAKI, S. M. *et al.* **Correlation functions of the BC Calogero–Sutherland model**. *J. Phys. A: Math. Gen.* v.36, pp.3137, 2003. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/12/316>
- [39] MAHAUX, C.; WEIDENMÜLLER, H. A. **Shell Model Approach to Nuclear Reactions**. North-Holland, Amsterdam, 1969.
- [40] MEHTA, M. L. **Random Matrices**. New York: Academic Press, 1991.
- [41] GALECZKI, G.; NIMTZ, G. **Electron quantum valve device—A new type of FIR-detector**. *Infrared Phys.* 31, 85, 1991. [https://doi.org/10.1016/0020-0891\(91\)90044-G](https://doi.org/10.1016/0020-0891(91)90044-G)
- [42] STANIA, G.; WALTHER, H. **Quantum Chaotic Scattering in Atomic Physics: Ericson Fluctuations in Photoionization**. *Phys. Rev. Lett.* v.95:194101, 2005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.194101>
- [43] LAX, M. **Multiple Scattering of Waves**. *Rev. Mod. Phys.* v.23, pp.287, 1951. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.23.287>
- [44] NEWTON, R. G. **Scattering Theory of Waves and Particles**. Springer Science and Business Media, 27 de nov. de 2013. ISBN: 3642881289, 9783642881282.
- [45] LANDAUER, R. **Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction**. *IBM Journal of Research and Development*. vol. 1, no. 3, pp. 223-231, 1957. <https://doi.org/10.1147/rd.13.0223>
- [46] LANDAUER, R. **Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices**. *Phil. Mag.*, v.21, pp.863, 1970. <https://doi.org/10.1080/14786437008238472>
- [47] BÜTTIKER, M. **Four- Terminal Phase Coherent Conductance**. *Phys. Rev. Lett.*, 57(14):1761, 1986. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.1761>

- [48] BLANTER, Y.; BÜTTIKER, M. **Shot noise in mesoscopic conductors.** *Phys. Rep.* v. 336, i. 1–2, 2000. [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(99\)00123-4](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(99)00123-4)
- [49] MELLO, P. A.; PEREYRA, P.; KUMAR, N. **Macroscopic approach to multichannel disordered conductors.** *Annals of Physics*, 181:290, 1988. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(88\)90169-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(88)90169-8)
- [50] MELLO, P. A.; BARANGER, H. U. **Interference Phenomena in Electronic Transport Through Chaotic Cavities: An Information-Theoretic Approach.** *AIP Conference Proceedings*. 464, 281, 1999. <https://arxiv.org/abs/cond-mat/9812225>
- [51] BARANGER, H. U.; MELLO, P. A. **Mesoscopic transport through chaotic cavities: A random S-matrix theory approach.** *Phys. Rev. Lett.* 73:142, 1994. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.142>
- [52] JALABERT, R. A. *et al.* **Universal Quantum Signatures of Chaos in Ballistic Transport.** *Europhysics Letters*. 27:255, 1994. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/27/4/001>
- [53] DYSON, F. J. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I.** *J. Math. Phys.*, 3(1):140-156, 1962. <https://doi.org/10.1063/1.1703773>
- [54] FYODOROV, Y. V.; SOMMERS, H. J. **Statistics of resonance poles, phase shifts and time delays in quantum chaotic scattering: Random matrix approach for systems with broken time-reversal invariance.** *J. Math. Phys.*, 38(4):191, 1997. <https://doi.org/10.1063/1.531919>
- [55] REICHL, L. E. **The Transition to Chaos: Conservative Classical Systems and Quantum Manifestations.** Second Edition, Springer, 2004.
- [56] ZINN-JUSTIN, J. **Quantum Field Theory and Critical Phenomena.** Oxford: Clarendon Press, 1996.
- [57] BARROS, M. S. M. *et al.* **Open chaotic Dirac billiards: Weak(anti) localization, conductance fluctuations and decoherence.** *Phys. Rev. B*. v.88:245133 2013. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.245133>
- [58] RICHTER, K. *et al.* **Symmetry Classes in Graphene Quantum Dots: Universal Spectral Statistics, Weak Localization, and Conductance Fluctuations.** *Phys. Rev. Lett.* 102:056806 2009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.056806>

- [59] COLLINS, B.; SNIADY, P. **Integration with Respect to the Haar Measure on Unitary, Orthogonal and Symplectic Group.** *Commun. Math. Phys.* v.264, p.773, 2006. <https://doi.org/10.1007/s00220-006-1554-3>
- [60] FEYNMANN, R. **The Feynman Lectures on Physics, boxed set: The New Millennium Edition.** Basic Books: New Millennium, 2011.
- [61] LANDAUER, R. **Condensed-matter physics: The noise is the signal.** *Nature*, v. 392, p.658-659, 1998. <https://doi.org/10.1038/33551>
- [62] LUCENA, I. R. A. C. *et al.* **Shot noise on chaotic chiral devices.** *Phys. Rev. B*, v. 99, n. 8, p.195131, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.195131>
- [63] GARDINER, C.; ZOLLER, P. **Quantum Noise: A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics.** Berlin: Springer-Verlag, 2004. ISBN: 978-3-540-22301-6
- [64] WAX, N. **Selected Papers on Noise and Stochastic Processes.** Dover Publications, 1954.
- [65] KUBO, R.; TODA, M.; HASHITSUME, N. **Statistical Physics I.** Berlin:Springer-Verlag, 1985.
- [66] KUBO, R. **The fluctuation-dissipation theorem.** *Rep. Prog. Phys.* v.29, pp.255, 1966. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/29/1/306>
- [67] LESOVIK, G. B. **Excess quantum noise in 2D ballistic point contacts.** *Sov. Phys. JETP.* v.49, pp.592, 1989. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1989JETPL..49..592L>
- [68] WIGNER, E. P. **Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra.** Academic Press Inc., New York, 1959. ISBN-10: 0127505504.
- [69] BOHIGAS, O.; GIANNONI, M. J.; SCHMIT, C. **Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws.** *Phys. Rev. Lett.*, 52, 1, 1984. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.1>
- [70] GUHR, T.; MUELLER-GROELING, A.; WEIDENMÜELLER, H. A. **Random Matrix Theories in Quantum Physics: Common Concepts.** *Phys.Rept.* 299:189-425, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(97\)00088-4](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(97)00088-4)

- [71] J. D. Jackson. **Classical Electrodynamics**. John Wiley and Sons, third edition, 1999.
- [72] BEENAKKER, C. W. J.; BROUWER, P. W. **Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems**. *J. Math. Phys.* 37,4904, 1996. <https://arxiv.org/abs/cond-mat/9604059>
- [73] COMTET, L. **Advanced Combinatorics: The Art of Finite and Infinite Expansions**. Dordrecht, Netherlands, 1974.
- [74] SAMUEL, S. **$U(N)$ Integrals, $1/N$, and the De Wit–’t Hooft anomalies**. *J. Math. Phys.* v.21, pp.2695, 1980. <https://doi.org/10.1063/1.524386>
- [75] NAPOLITANO, J.; SAKURAI, J.J. **Mecânica Quântica Moderna**, tradução técnica: Sílvio Renato Dahmen, 2ed, Porto Alegre, 2013.
- [76] CANEVA, S.; GEHRING, P.; GARCIA-SUAREZ, V. M. *et al.* **Mechanically controlled quantum interference in graphene break junctions**. *Nature Nanotech*, v. 13, pp.1126–1131, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41565-018-0258-0>
- [77] GEHRING, P. *et al.* **Quantum Interference in Graphene Nanoconstrictions** *Nano Lett.* v.16, pp.4210–4216, 2016. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01104>
- [78] WALLBANK, J. R. *et al.* **Tuning the valley and chiral quantum state of Dirac electrons in van der Waals heterostructures**. *Science*, v.353, pp.575–579, 2016. <https://doi.org/10.1126/science.aaf4621>
- [79] DIETZ, B. *et al.* **Gaussian orthogonal ensemble statistics in graphene billiards with the shape of classically integrable billiards**. *Phys. Rev. E* v.94, pp.062214, 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.94.062214>
- [80] RICHTER, K. *et al.* **Edge effects in graphene nanostructures: From multiple reflection expansion to density of states**. *Phys. Rev. B* v.84, pp.075468, 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.075468>
- [81] WURM, J. *et al.* **Symmetry Classes in Graphene Quantum Dots: Universal Spectral Statistics, Weak Localization, and Conductance Fluctuations** *Phys. Rev. Lett.* v.102, pp.056806, 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.056806>

- [82] RAMOS, J. G. G. S.; HUSSEIN, M. S.; BARBOSA, A. L. R. **Fluctuation phenomena in chaotic Dirac quantum dots: Artificial atoms on graphene flakes.** *Phys. Rev. B*, v.93, pp.125136, 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.125136>
- [83] MUEED, M. A. *et al.* **Realization of a Valley Superlattice.** *Phys. Rev. Lett.* v.121, pp.036802, 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.036802>

Shot noise on chaotic chiral devices

M. S. M. Barros,¹ I. R. A. C. Lucena,¹ A. F. M. R. Silva,¹ A. L. R. Barbosa,² and J. G. G. S. Ramos¹¹*Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, 58297-000 João Pessoa, Paraíba, Brazil*²*Departamento de Física, Universidade Federal Rural de Pernambuco, 52171-900 Recife, Pernambuco, Brazil*

(Received 7 January 2019; published 17 May 2019)

We investigate both the conductance and the shot-noise power of a confined chiral device that engenders subtle embedded backscattering mechanisms. We present analytical results and the correspondent numerical confirmation of the chiral electronic sublattice signal. Examples of quantum dots generating chiral symmetries include graphene sheets and topological insulators. The analytical results are universal and exhibit a robust and peculiar signal for an arbitrary number of open scattering channels. We also demonstrate a tunable mechanism of the valleytronics shot-noise power signal through perpendicular magnetic fields and/or the device symmetry edges. The results also indicate a “Fano factor” associated with the main quantum interference term with a universal value of $1/4$ for a quantum dot with symmetric contacts, regardless of external fields and the number of open channels.

DOI: [10.1103/PhysRevB.99.195131](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.195131)

I. INTRODUCTION

Solid-state physics constitutes one of the main scenarios for the development of new theories [1,2]. Since the pioneer studies of Bragg in 1913, many developments were established, from electromagnetism to quantum mechanics. The consolidation of atomic theory and the possibility of stable long-range arrangement in bulk materials decomposed into microscopically periodic substructures guaranteed the formation of emerging symmetries [3] and the nontrivial properties of matter [4–9].

More recently, with the experimental control of graphene flakes connected to a macroscopic source and drain [10,11], electronic transport gains strong impact at the quantum level. Graphene is a periodic structure of carbon atoms arranged in a hexagonal lattice [12,13]. In the Fermi energy level, its electrons can be described with a linear dispersion relationship leading to an effective physics of massless particles traversing the nanostructure in a “relativistic” way or, in other words, the electronic transport at the Fermi velocity can be seen as massless neutrinos described by the Dirac equation [14]. In this scenario, there is the formation of a spinorial structure which, in the case of graphene, is interpreted as new degrees of freedom associated with the sublattice structure. Other structures with sublattice symmetry include the topological insulators whose electrons also satisfy the Dirac equation generating chirality with both experimental and theoretical relevance [12,15–18]. We henceforth use “chiral devices” or “Dirac devices” to designate two-dimensional graphene sheets without impurities, topological insulators, and all structures with sublattice symmetry.

However, despite great efforts, quantum signals of the chiral degrees of freedom are hardly found in quantum electronic transport [15]. The main reason is that the width increase of the terminals connected to the sample creates more channels that easily eliminate the quantum interference corrections from the conductance [19–21]. In particular, the analytical

results known show that the correction is insignificant when compared to the main “Ohmic” term. As the main reason for this incipient contribution, we can indicate the fact that conductance is not an observable one that is significantly affected by backscattering [22–24]. In fact, by the formalism of Landauer, the conductance depends basically on tunneling probabilities [25,26]. A manner to introduce backscattering mechanisms would be to introduce nonideal contacts, which link the ideal terminals to the graphene quantum dot. However, contacts can easily compete with sublattice degrees of freedom, which makes this design little enlightening or improper.

Against this backdrop, we propose a set of possibilities for the direct measurement of the quantum transport effects of chiral (sublattice) symmetry in Dirac devices using the shot-noise power as a prominent observable. The shot-noise power occurs even at the null temperature basically as an effect of the discretization of matter and as the spatial extension of the electron wave function [6,27]. Our idea is based on the fact that the shot-noise power carries the terms of backscattering in Landauer-Büttiker’s formulation, even with ideal contacts. In the specific case of a chiral structure, we must remember that there is no mathematical way of describing the entire Bravais lattice with a pair of vectors. This suggests the creation of a base that, in turn, naturally induces the formation of sublattices. The necessity of using a base forms Bragg peaks associated with backscattering; i.e., the shot-noise power must offer strong quantum signals of the chiral structure, as opposed to conductance. Therefore, our study will reveal strongly measurable quantum signals associated to the sublattice symmetry and to the transport of relativistic neutrinos without mass.

The work is organized in the following manner: In Sec. II, the scattering formalism needed for the study of graphene and the expressions of Landauer and Büttiker in terms of S -matrix elements is introduced and developed. In Sec. III, the diagrammatic method for the integration over the unitary group on pure ensembles is introduced and we obtain results

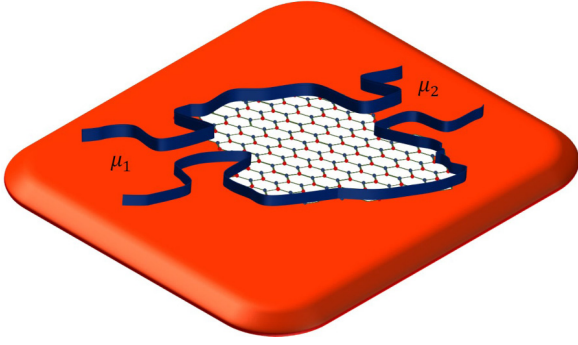


FIG. 1. The quantum dot of graphene connected to two electrochemical potentials through electronic terminals: an example of a chiral or Dirac device. The confinement generates a chaotic effect due to the random edges.

not only for the conductance but also for the shot-noise power, and a numerical simulation is performed to confirm our analytical findings. In Sec. IV, the calculus of crossover between pure ensemble for finite fields is performed. Finally, in Sec. V, the final conclusions are presented.

II. SCATTERING MATRIX FORMALISM

We introduce the scattering model for a chaotic chiral device connected by ideal contacts to two terminals, as shown in Fig. 1. We investigate a quantum dot of graphene large enough to support many resonances coupled to very thin leads, in such a way that a low energy may comprise at least one open channel. In this regime, the mesoscopic fluctuations occur properly in the isospectral (universal) scattering. In graphene flakes, the sublattice symmetry can be broken. The breaking of sublattice symmetry takes place both on the level of the band structure by, e.g., next-nearest-neighbor hopping terms, and by a random potential. Measurement of the band-structure effect indicates a sublattice-symmetry-breaking energy scale of more than 0.1 eV [28]. The electronic universal transport in chiral devices can be described by the scattering matrix

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (1)$$

where t (t') and r (r') are transmission and reflection matrix blocks, respectively. Furthermore, the scattering matrix has dimension $2N_T \times 2N_T$, where $N_T = N_1 + N_2$ is the sum of electronic wave propagation modes (channels) (N_i) in each terminal.

Following the Landauer-Büttiker approach [6,29–31], the conductance and the shot-noise power are calculated from the transmission matrix block as

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(tt^\dagger), \quad (2)$$

and

$$P = \frac{4e^3|V|}{h} \text{Tr}[tt^\dagger(1 - tt^\dagger)]. \quad (3)$$

In the framework of random matrix theory (RMT), the scattering matrix, Eq. (1), associated with the *bi-partite lattice* (as two-dimensional square and hexago-

nal lattices) is classified by chiral class [32], which is divided into three ensembles: the chiral circular orthogonal ensemble $\beta = 1$ (chCOE), which has time-reversal symmetry (TRS), spin-rotation symmetry (SRS), and sublattice/mirror/chiral symmetry (SLS) preserved; the chiral circular unitary ensemble $\beta = 2$ (chCUE), which has TRS broken; and the chiral circular symplectic ensemble $\beta = 4$ (chCSE), which has SRS broken. Furthermore, the scattering matrix can be decomposed as a function of unitary U , and orthogonal and symplectic matrices as in the following [33]:

$$S = \Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U, \quad \Sigma_z \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{N_T} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{N_T} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Equation (4) will enable us to use the diagrammatic method developed in Refs. [34,35] to calculate the ensemble averages of Eqs. (2) and (3) in the next sections.

III. UNIVERSAL CONDUCTANCE AND SHOT-NOISE POWER

The transmission matrix blocks are not symmetric, and therefore the ensemble average of Eqs. (2) and (3) is prohibitive. However, through the use of projectors, we can write these equations in terms of the S matrices and, consequently, in terms of the unitary matrices U . This way, it will be possible to develop an integration over the unitary group with the corresponding Haar measure through the diagrammatic method.

A. Mean conductance

We begin with the calculation of the conductance average of the chiral device. Equation (2) can be rewritten as a function of the U -matrix, replacing Eq. (4) within Eq. (2) as in the following:

$$g = \text{Tr}(C_1 S C_2 S^\dagger) = \text{Tr}(C_1 U^\dagger \Sigma_z U C_2 U^\dagger \Sigma_z U), \quad (5)$$

where $g = G/(2e^2/h)$ is the dimensionless conductance and the (projectors) matrices C_i are defined as

$$C_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{N_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_{N_2} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$\mathbf{1}_{N_i}$ being a unity matrix with dimension $N_i \times N_i$.

The ensemble average of Eq. (5) can be calculated by developing the following integral:

$$\langle g \rangle = \int d\mu \text{Tr}(C_1 U^\dagger \Sigma_z U C_2 U^\dagger \Sigma_z U), \quad (7)$$

where $d\mu$ is the invariant measure (Haar measure) on a unitary group. One way to calculate the integral is through the diagrammatic method which was developed in Refs. [34,35]. The diagrammatic method is based on the sum of all possible element permutations of the unitary matrix U of the similarity transformations that characterize the chaotic dynamics [36–38].

As we are interested in the chiral device with SLS preserved, we must use the diagrammatic method of Ref. [35] to develop the average over Eq. (5). If the U matrix of Eq. (5) is

unitary, there are four diagrams, while if one is orthogonal or symplectic, there are nine diagrams. The sum of all diagrams gives rise to the following (compact expression) average of conductance:

$$\langle g \rangle = \frac{4\beta N_1 N_2 N_T}{(\beta N_T + 1)(2N_T - 1)}. \quad (8)$$

This result was first obtained in Ref. [35].

A relevant experimental regime happens when the wave propagation number of modes (channels) is large ($N_T \gg 1$). Expanding Eq. (8) in a function of N_T , we have

$$\langle g \rangle = 2 \frac{N_1 N_2}{N_T} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{N_T^2} + \mathcal{O}(N_T^{-1}). \quad (9)$$

The first term is the Ohm conductance while the second is known as the localization (main quantum interference correction). The factor 2 in the Ohm term comes from sublattice degenerescence. Furthermore, we take the symmetric terminal case ($N_1 = N_2 = N$) in Eq. (9), and the conductance main quantum interference correction term simplifies to

$$\langle \delta g \rangle = \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{1}{4}. \quad (10)$$

The conductance main quantum interference correction term, Eq. (10), for a chiral device is equivalent to that of the standard quantum dot (QD) described by Wigner-Dyson ensembles [4]. It means that the SLS does not affect the conductance main quantum interference correction in this limit. According to the introduction of the discussion, this fact is due to the absence of backscattering and, consequently, the irrelevance in the semiclassical limit of the double structure of the chiral sublattice. For this reason, it is necessary to study an observable that carries this information even in the semiclassical

limit. The shot-noise power, as can be noticed in Eq. (3), contemplates the product of terms of transmission, $tt^\dagger$, and terms of reflection (backscattering), $rr^\dagger = (1 - tt^\dagger)$.

B. Universal shot-noise power

In this section, we investigate in detail how the chiral symmetry affects in a nontrivial way the shot-noise power main quantum interference correction term. Hence, we calculate the average of the shot-noise power, Eq. (3).

First, we rewrite the shot-noise power in a function of a scattering matrix, replacing Eq. (4) within Eq. (3) as follows:

$$p = \text{Tr}(\mathcal{C}_1 \mathcal{S} \mathcal{C}_2 \mathcal{S}^\dagger) - \text{Tr}[(\mathcal{C}_1 \mathcal{S} \mathcal{C}_2 \mathcal{S}^\dagger)^2] \\ = g - \text{Tr}[(\mathcal{C}_1 U^\dagger \Sigma_z U \mathcal{C}_2 U^\dagger \Sigma_z U)^2], \quad (11)$$

where $p = P/(4e^3|V|/h)$ is the dimensionless shot-noise power and g is the dimensionless conductance which was calculated above in Eq. (8). The average of Eq. (11) can be calculated by developing the following integral:

$$\langle p \rangle = \langle g \rangle - \int d\mu \text{Tr}[(\mathcal{C}_1 U^\dagger \Sigma_z U \mathcal{C}_2 U^\dagger \Sigma_z U)^2], \quad (12)$$

where the last term is composed of eight U matrices.

To develop the integral of Eq. (12), we also use the diagrammatic method [35]. After an extensive algebraic calculation, we identify the 11 024 diagrams that contribute to the average of Eq. (12). The proliferation of diagrams is due to chiral symmetry that doubles the number of unitary matrices in the trace of the shot-noise power whose average is a combinatorial problem. If the U matrix of Eq. (11) is unitary, there are 2 000 diagrams, while if one is orthogonal or symplectic, there are 11 024 diagrams. The sum of these diagrams gives rise to the following average of shot-noise power:

$$\langle p \rangle_{\beta=1} = \frac{4N_1 N_2 N_T [4(N_1^2 N_2 + N_1 N_2^2) + 2N_T^2 - 3(N_T - 1)]}{(2N_T - 3)(2N_T - 1)(N_T + 3)(N_T + 1)(2N_T + 1)}, \quad (13)$$

$$\langle p \rangle_{\beta=2} = \frac{16N_1 N_2 N_T (2N_1 N_2 - 1)}{(2N_T + 3)(2N_T - 3)(2N_T + 1)(2N_T - 1)}, \quad (14)$$

$$\langle p \rangle_{\beta=4} = \frac{16N_1 N_2 N_T [32(N_1^2 N_2 + N_1 N_2^2) - 8N_T^2 - 3(2N_T - 1)]}{(4N_T + 3)(4N_T + 1)(2N_T - 3)(2N_T - 1)(4N_T - 1)}, \quad (15)$$

Equations (13)–(15) are the first results of this work. Focusing on the experimental regime limit ($N_T \gg 1$), we expand Eqs. (13)–(15) in a function of N_T , obtaining the following result:

$$\langle p \rangle = 2 \frac{N_1^2 N_2^2}{N_T^3} + \left(\frac{2}{\beta} - 1\right) \frac{N_1 N_2 (N_1 - N_2)^2}{N_T^4} \\ - \left(\frac{2}{\beta} - 1\right) \frac{N_1^2 N_2^2}{N_T^4} + \mathcal{O}(N_T^{-1}). \quad (16)$$

Notice that the shot-noise power main quantum interference correction obtained from Wigner-Dyson ensembles is only given by the second term of Eq. (16) [4,39]. A central experiment of the full distribution of random values of the shot-noise power and, consequently, of the main quantum

interference correction for Wigner-Dyson symmetries (usual semiconductors) was performed in Ref. [40] and further measurements. Hence, we can conclude that the last one is a nontrivial contribution of SLS. We henceforth denominate the exclusive contribution of the graphene as a chiral term (CT), $p_{wl}^{CT} = -(2/\beta - 1)N_1^2 N_2^2 / N_T^4$. This main quantum interference correction for the shot-noise power is particularly important when the terminals are symmetric (equal number of channels), considering that Schrödinger billiards do not generate interference contributions in this regime.

Taking the symmetric terminal case ($N_1 = N_2 = N$) in Eq. (16), the shot-noise power interference correction simplifies to

$$\langle \delta p \rangle = p_{wl}^{CT} = \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{1}{16}. \quad (17)$$

Equation (17) shows that the shot-noise power main quantum interference correction term of the chiral device is finite in contrast to one of the standard QD for which the main quantum interference correction term is null in the symmetric configuration [4]. Differently from the conductance main quantum interference correction, Eq. (9), the shot-noise power main quantum interference correction carries information about SLS that could be accessed experimentally.

C. Numerical simulation

In order to confirm Eqs. (13)–(15), we develop a numerical simulation through the Mahaux-Weidenmüller formulation [41]. The scattering matrix of Eq. (4) is written as a function of electronic Fermi energy (ϵ) and the Hamiltonian ($\mathcal{H}$) which describe the resonance states inside the ballistic chaotic quantum dot as follows:

$$S = \mathbf{1} - 2i\pi\mathcal{W}^\dagger(\epsilon - \mathcal{H} + i\pi\mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger)^{-1}\mathcal{W}. \quad (18)$$

The coupling of the resonance states with the propagating modes in the two terminals is carried out by means of the deterministic matrix $\mathcal{W} = (\mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2)$. Moreover, this deterministic matrix does not satisfy direct processes; i.e., the orthogonality condition $\mathcal{W}_i^\dagger \mathcal{W}_j = \frac{1}{\pi} \delta_{i,j}$ is maintained to avoid processes whose electrons do not pass through the quantum dot before scattering.

In the framework of RMT, the Dirac Hamiltonian, which describes the graphene, is a member of the Gaussian ensemble (GE) [42]. Furthermore, its entries have the Gaussian distribution given by

$$\mathcal{P}(\mathcal{H}) \propto \exp \left\{ -\frac{M}{\lambda^2} \text{Tr}(\mathcal{H}^\dagger \mathcal{H}) \right\},$$

where $\lambda = M\Delta/\pi$ is the variance related to the electronic single-particle level spacing, Δ , whereas M is the dimension of the $\mathcal{H}$ -matrix and number of resonance states supported by the chiral device. To ensure the chaotic regime and consequently the universality of the observables, the number of resonances inside the quantum dot is taken to be large ($M \gg N_T$) [43]. The massless Dirac Hamiltonian satisfies the following anticommutation relation [44]:

$$\mathcal{H} = -\lambda_z \mathcal{H} \lambda_z, \quad \lambda_z = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{2M} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{2M} \end{bmatrix},$$

where we interpret the $2M$ of 1's and -1 's as the number of atoms in the sublattices A and B of a chaotic graphene quantum dot. The anticommutation relation above implies that the Dirac Hamiltonian is

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathcal{T} \\ \mathcal{T}^\dagger & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

In the framework of RMT, the massless Dirac Hamiltonian which describes the symmetries of a large chiral device is a member of the chiral Gaussian unitary, orthogonal, or symplectic ensemble [44]. Furthermore, the $\mathcal{T}$ -matrix entries have a Gaussian distribution given by

$$P(\mathcal{T}) \propto \exp \left\{ -\frac{2M}{\lambda^2} \text{Tr}(\mathcal{T}^\dagger \mathcal{T}) \right\},$$

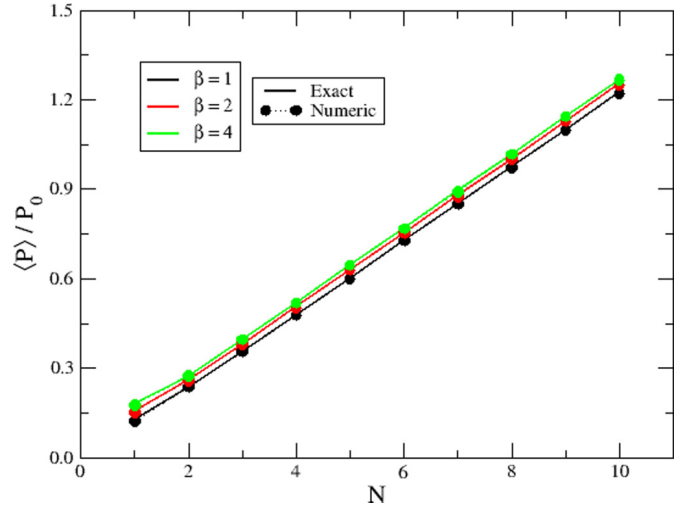


FIG. 2. The ensemble average of the shot-noise power for a quantum graphene dot with symmetric contacts. The symbols are the numerical results data while the lines are the analytical results. Notice a separation between the lines in the three sets of data caused solely by the quantum interference term due to the sublattice symmetry.

where $\lambda = 2M\Delta/\pi$. Using Eqs. (2)–(4), (18), and (19), we developed the numerical simulations for the chiral device that appear in Fig. 2 for full symmetric open channels ($N_1 = N$) and in Fig. 3 for asymmetric open channels ($N_1 = 1$ and arbitrary N_2), which was obtained through 2.5×10^4 realizations and with $M = 300$. The circle symbols are the average of the observables whereas the lines represent the analytical results, Eqs. (13)–(15). The numeric simulations are in great accord with the analytical results.

According to Fig. 3, there is a clear distancing between the characteristic curves of each universal symmetry. The immediate implication is the existence of a distinct quantum interference correction for each universal symmetry. However,

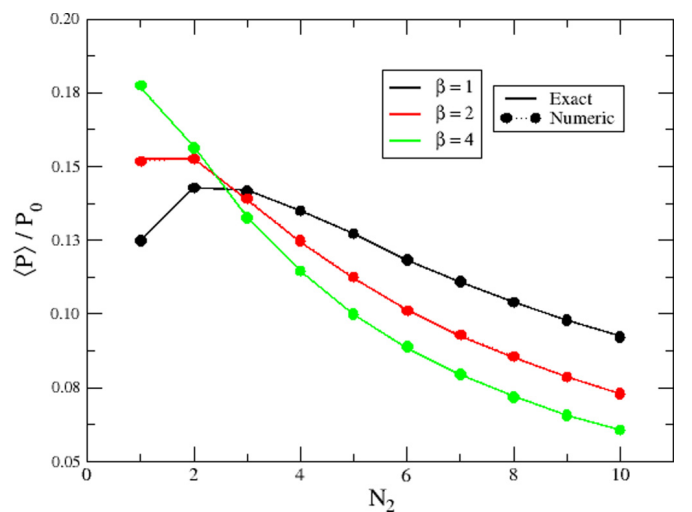


FIG. 3. The ensemble average of the shot-noise power for a quantum graphene dot with asymmetric contacts. The symbols are the numerical results data while the lines are the analytical results. Observe that the curves of the three universal ensembles are separated due to the quantum interference corrections.

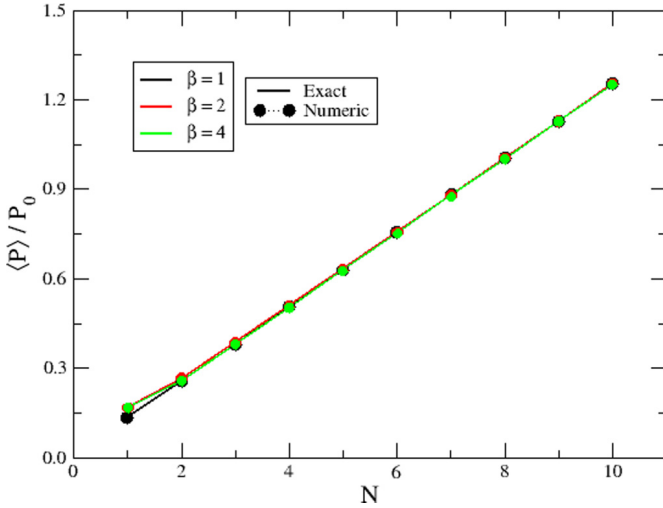


FIG. 4. The ensemble average of the shot-noise power for Schrödinger billiards with symmetric contacts. The symbols are the numerical results data while the lines are the analytical results. Observe that there is no separation between the curves, which characterizes that the quantum interference term disappears when the contacts are symmetrical.

in a more peculiar way, in the curves represented in Fig. 2 the quantum interference in a chiral device gives rise to a separation between the curves even in the symmetric case, a nonexistent feature in the two-dimensional gas of usual semiconductors. This separation is precisely the term p_{wl}^{CT} foreseen in our analytical result. This signal is a fingerprint of an electronic quantum transport in the chiral devices. We executed a simulation of the Wigner-Dyson universal symmetries associated with Schrödinger billiards, i.e., eliminating the Hamiltonian sublattice symmetry. The results for Schrödinger's semiconductors are exhibited in Fig. 4 for full symmetric open channels ($N_i = N$) and Fig. 5 for asymmetric

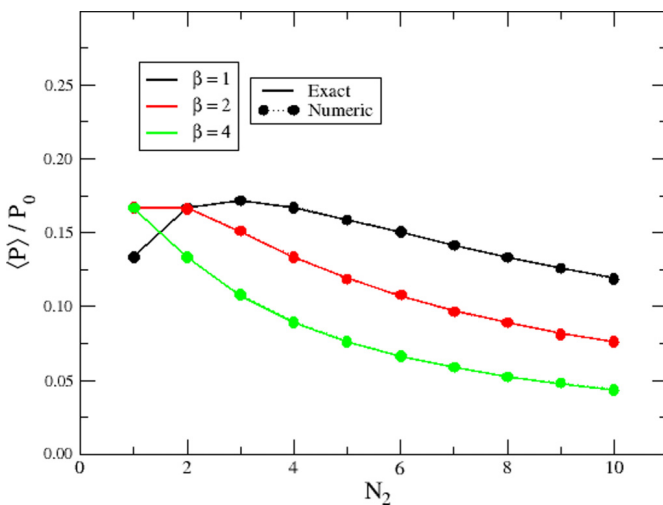


FIG. 5. The ensemble average of the shot-noise power for Schrödinger billiards with asymmetric contacts. The symbols are the numerical results data while the lines are the analytical results. Observe that the curves of the three Wigner-Dyson universal ensembles are separated due to the quantum interference corrections.

open channels ($N_1 = N$ and $N_2 = N_3 = 1$), which was obtained through 2.5×10^4 realizations and with $M = 300$.

IV. CROSSOVER REGIME AND INTERVALLEY SCATTERING

In this section, we investigate how the shot-noise power main quantum interference correction term, Eq. (16), could be affected by external parameters such as magnetic fields, edges, and intervalley scattering of graphene. Therefore, we introduce the stub model [45,46], whose the scattering matrix can be written as

$$S = P(1 - Q^\dagger R Q U)^{-1} U P^\dagger, \quad (20)$$

where P and Q are projection matrices of dimensions $4N_T \times M$ and $(M - 4N_T) \times M$, respectively. The U matrix is an $M \times M$ random orthogonal matrix taken from chiral ensembles that describes the chiral device. The R matrix has dimension $(M - 4N_T) \times (M - 4N_T)$ and is parametrized as [24,47,48]

$$R = \exp \left[\frac{i}{M} \left(2\pi \frac{\epsilon}{\Delta} \sigma_0 \otimes \tau_0 - \mathcal{H} \right) \right]. \quad (21)$$

The $\mathcal{H}$ matrix is obtained from the effective Dirac Hamiltonian preserving its intrinsic symmetries and considering its amplitudes as members of a Gaussian distribution. We consider the additional degrees of freedom residing in the elements of matrices $\mathcal{H}$ which are all proportional to $\sigma_i \otimes \tau_j$, with σ_i and τ_j denoting Pauli matrices ($i, j = x, y, z$) in each subspace of the Dirac Hamiltonian. To perform averages of S , one expands in powers of U ($M \gg 4N_T$) and uses diagrammatic techniques developed in Ref. [24].

A. Conductance localization main quantum interference correction

Applying Eq. (20) in Eq. (2) and using the diagrammatic method [24], we are able to identify the maximally crossed diagram (Cooperons diagram) that gives rise to the conductance main quantum interference correction,

$$\langle \delta g \rangle = -\frac{N_1 N_2}{N_T} \sum_{\rho, \sigma} [\text{Tr}(\mathcal{T} \mathcal{C} \mathcal{T})]_{\rho\sigma; \rho\sigma}, \quad (22)$$

where $\mathcal{T} = \sigma_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_y \otimes \tau_0$, and

$$\mathcal{C} = M \sigma_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_0 \otimes \tau_0 - \text{Tr}(\mathcal{R} \otimes \mathcal{R}^*), \quad (23)$$

where $*$ is the complex conjugation. Equation (22) was first obtained in Ref. [24] by applying the framework to a chiral device subjected to a perpendicular magnetic field and massive boundary.

The valleys correspond to the two inequivalent Fermi points of the graphene band structure [49–51] and constitute relevant implications for the quantum transport, opening applications in the so-called valleytronics. As an application of this method, consider the effective Hamiltonian of a graphene sheet for low energies and long length scales without spin degree freedom given by [22,23,52]

$$H = v[\mathbf{p} - e\mathbf{A}] \cdot \sigma \otimes \tau_0 + u(\mathbf{r})\sigma_0 \otimes \tau_0 + u'(\mathbf{r})\sigma_x \otimes \tau_z + w_{ac}(\mathbf{r})\sigma_z \otimes \tau_y + w_{zc}(\mathbf{r})\sigma_z \otimes \tau_z,$$

where the Pauli matrices σ_i and τ_i act on the sublattice and valley degrees of freedom, respectively. The potential vector

$\mathbf{A} = (A_x, 0, 0)$ carries information about the external electromagnetic fields and has no role in coupling the two valleys. The u and u' terms are the long-range impurity potential that induces intervalley scattering; it means that the range of the impurity potential is much larger than the lattice constant [52]. The boundary of the chiral device is described by two physically relevant boundary types, which are known as confinement by the armchair edges term (w_{ac}), and confinement by the zigzag edges term (w_{zz}).

The central property responsible for the simplified random matrix framework in the presence of finite fields is the fact that all relevant time scales are much longer than the electron transit time τ_{erg} ; thus, $\tau_B, \tau_u, \tau_{ac}, \tau_{zz}, \tau_{u'} \gg \tau_{erg}$ (the time τ_B is associated with the perpendicular magnetic field and, henceforth, with $\mathbf{A}$). In fact, for a graphene flake in the transition from classical to quantum regimes, the trajectories can be influenced in distinct ways by the presence of the magnetic field. In the universal regime, however, when many energy levels are available (10^3), all phase space is explored with no preference to some specific trajectories, as long as the dwell time τ_{dwell} is greater than the ergodic time τ_{erg} . In the approach described in the current paper, in the universal regime, $\tau_{dwell} \gg \tau_{erg}$, the results are not affected by special trajectories.

The relevance of the finite fields is guaranteed by the requirement that τ 's are of the order of the inverse mean level spacing in the chaotic graphene quantum dot. We may thus introduce the following dimensionless parameters to characterize the intensity of symmetry breaking in the system:

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{2\pi\hbar}{\Delta\tau_B}, & u^2 &= \frac{2\pi\hbar}{\Delta\tau_u}, & u'^2 &= \frac{2\pi\hbar}{\Delta\tau_{u'}}, \\ w_{ac} &= \frac{2\pi\hbar}{\Delta\tau_{ac}}, & w_{zz} &= \frac{2\pi\hbar}{\Delta\tau_{zz}}, \end{aligned} \quad (24)$$

where Δ is the mean level spacing.

From the effective Hamiltonian, we can obtain the following expression of the $\mathcal{H}$ matrix [20]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= ixX\sigma_x \otimes \tau_0 + iuA_1\sigma_0 \otimes \tau_0 + iu'A_2\sigma_x \otimes \tau_z \\ &\quad + iw_{ac}A_3\sigma_z \otimes \tau_y + iw_{zz}A_4\sigma_z \otimes \tau_z. \end{aligned}$$

As usual, we assume $\mathcal{H}$ is Hermitian and, consequently, the matrix A_i and X are real antisymmetric and statistically independent with $\langle \text{Tr}(A_i A_j^T) \rangle = \delta_{ij} M^2$ and $\langle \text{Tr}(XX^T) \rangle = M^2$. The parameters x, u, u' , and $w_{ac,zz}$ are dimensionless. We replace $\mathcal{H}$ in Eq. (23) and obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= (N_T + x^2 + u^2 + u'^2 + w_{ac}^2 + w_{zz}^2) \sigma_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_0 \otimes \tau_0 \\ &\quad - x^2 \sigma_x \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x \otimes \tau_0 \\ &\quad - u'^2 \sigma_x \otimes \tau_z \otimes \sigma_x \otimes \tau_z \\ &\quad - w_{ac}^2 \sigma_z \otimes \tau_y \otimes \sigma_z \otimes \tau_y \\ &\quad - w_{zz}^2 \sigma_z \otimes \tau_z \otimes \sigma_z \otimes \tau_z. \end{aligned} \quad (25)$$

Finally, through substitution of Eq. (25) into Eq. (22), we obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &\equiv \sum_{\rho, \sigma} [\text{Tr}(\mathcal{TCT})]_{\rho\sigma; \rho\sigma} \\ &= \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2} - \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2 + 2w_{ac}^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2 + 2u'^2 + 2w_{zz}^2} \\ &+ \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2 + 2u'^2 + 2w_{ac}^2 + 2w_{zz}^2}. \end{aligned} \quad (26)$$

If $u = u' = 0$, we recover the result of Ref. [24]. At this point, considering the zigzag edges, i.e., $w_{zz} \rightarrow \infty$, Eq. (26) simplifies to

$$\mathcal{K} = \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2} - \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2 + 2w_{ac}^2}, \quad (27)$$

which is independent of u' . This indicates that long-range impurities do not induce the intervalley scattering for zigzag nanoribbons as in Ref. [52], which means the quantum interference correction is not affected by intervalley scattering. However, if we take the limit $w_{ac} \rightarrow \infty$,

$$\mathcal{K} = \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2} + \frac{2}{1 + 2x^2 + 2u^2 + 2u'^2 + 2w_{zz}^2}, \quad (28)$$

which is dependent of u' . This means that the intervalley scattering does not vanish even in the case of long-range impurities in the armchair nanoribbons [52], which means the quantum interference correction is affected by intervalley scattering.

B. Shot-noise power main quantum interference correction

We use the RMT/stub framework for the similar calculation of the universal crossover on the shot-noise power. We replace Eq. (20) with Eq. (3). From the 11 024 diagrams used to obtain Eq. (13), we were able to obtain the 45 maximally crossed diagrams (Cooperons diagrams) that contribute to the main quantum interference correction term. After an extensive algebraic calculation we found that the shot-noise power main quantum interference correction is given by

$$\langle \delta p \rangle = \left[\frac{N_1 N_2 (N_1 - N_2)^2}{N_T^3} - \frac{N_1^2 N_2^2}{N_T^3} \right] \mathcal{K}. \quad (29)$$

Equation (29) is the second result of this work. Comparing the conductance main quantum interference correction, Eq. (22), and the shot-noise power main quantum interference correction, Eq. (29), we could realize that both are similarly affected by external parameters.

From Eqs. (22) and (29), we can define a universal (“Fano factor”) parameter that is unaffected by external perturbation as follows:

$$\frac{\langle \delta p \rangle}{\langle \delta g \rangle} = - \left(\frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2} \right)^2 + \frac{N_1 N_2}{N_T^2}. \quad (30)$$

The ratio between the shot-noise and conductance is generically known as Fano factor. In the same way, this relation between their quantum portions defines a parameter first studied in Ref. [39] for a standard QD, whose the result is given by only the first term of Eq. (30). The second one is a contribution of the chiral symmetry in the chiral device. Taking the relevant experimental regime, for which the terminals are symmetrical ($N_1 = N_2$), the first term of Eq. (30) vanishes

while the SLS contribution goes to

$$\frac{\langle \delta p \rangle}{\langle \delta g \rangle} = \frac{1}{4}. \quad (31)$$

The factor $1/4$ is sufficiently large to be accessed experimentally in a chiral device, proving that the chiral symmetry affects in a nontrivial way the shot-noise power main quantum interference correction, which does not happen with the conductance main quantum interference correction.

V. CONCLUSIONS

In this work, we executed a detailed study on the shot-noise power of chiral structures, which has as its main realizations the graphene and topological insulators. The sublattice structure of chiral devices generates additional symmetry that has a strong influence on the backscattering mechanism. We performed an exact analytical calculation in the universal chiral symmetry classes and we showed the emergence of a term that signals the electronic sublattice quantum transport. This term is a fingerprint and can be measured for any number of open channels.

The analytical results were tested through a numerical simulation and were nicely confirmed. We also simulated Schrödinger's billiards and showed that the ensemble average of the shot-noise power coincides in the three ensembles of Wigner-Dyson symmetry (usual semiconductors features) for

symmetric contacts. The same does not happen with materials composed of graphene.

Finally, we showed that the Fano factor associated with the main quantum interference correction, which is the reason for the quantum interference correction of the shot-noise power and the conductance interference, generates a universal number $1/4$ for symmetric contacts. The result is robust and does not depend on the “tuning” of graphene edges samples, the applied perpendicular field, or other fields. Despite the dependence (tuning) and even possible suppression of quantum interference regarding such fields, the result $1/4$ occurs in a universal way for all pure ensembles and crossovers between chiral classes. We hope our results contribute for the more general scenario of electronic valley signals. Also, forthcoming investigations in the perspective of sublattice symmetries include chiral ensembles characterized by a topological integer ν , which is the difference of the number of sites on each of the two sublattices [53]. The calculation in the present paper is for $\nu = 0$, but generalizations of the results for $\nu \neq 0$ can indicate several other signals of chirality in mesoscopic devices.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by Brazilian agencies Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), and Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia de Pernambuco (FACEPE).

-
- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. (Wiley, New York, 2012).
 - [2] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Harcourt, Orlando, FL, 1976).
 - [3] P. W. Anderson, *Science* **177**, 393 (1972).
 - [4] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).
 - [5] Y. Alhassid, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 895 (2000).
 - [6] Ya. M. Blanter and M. Büttiker, *Phys. Rep.* **336**, 1 (2000).
 - [7] M. Büttiker, A. Prêtre, and H. Thomas, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 4114 (1993).
 - [8] Yu. V. Nazarov and Ya. M. Blanter, *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2009).
 - [9] E. Akkermans and G. Montambaux, *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2007).
 - [10] K. A. Ritter and J. W. Lyding, *Nat. Mater.* **8**, 235 (2009).
 - [11] A. D. Güçlü, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **84**, 035425 (2011).
 - [12] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
 - [13] S. Das Sarma, Shaffique Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
 - [14] M. O. Goerbig, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1193 (2011).
 - [15] J. R. Wallbank, D. Ghazaryan, A. Misra, Y. Cao, J. S. Tu, B. A. Piot, M. Potemski, S. Pezzini, S. Wiedmann, U. Zeitler, T. L. M. Lane, S. V. Morozov, M. T. Greenaway, L. Eaves, A. K. Geim, V. I. Fal'ko, K. S. Novoselov, and A. Mishchenko, *Science* **353**, 575 (2016).
 - [16] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature (London)* **438**, 197 (2005).
 - [17] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature (London)* **438**, 201 (2005).
 - [18] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, and W. A. de Heer, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266405 (2006).
 - [19] M. A. Mueed, Md. Shafayat Hossain, I. Jo, L. N. Pfeiffer, K. W. West, K. W. Baldwin, and M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 036802 (2018).
 - [20] S. Caneva, P. Gehring, V. M. García-Suárez, A. García-Fuente, D. Stefani, I. J. Olavarria-Contreras, J. Ferrer, C. Dekker, and H. S. van der Zant, *Nat. Nanotechnol.* **13**, 1126 (2018).
 - [21] P. Gehring, H. Sadeghi, S. Sangtarash, C. S. Lau, J. Liu, A. Ardavan, J. H. Warner, C. J. Lambert, G. Andrew D. Briggs, and J. A. Mol, *Nano Lett.* **16**, 4210 (2016).
 - [22] J. Wurm, K. Richter, and I. Adagideli, *Phys. Rev. B* **84**, 075468 (2011); J. Wurm, M. Wimmer, and K. Richter, *ibid.* **85**, 245418 (2012).
 - [23] J. Wurm, A. Rycerz, I. Adagideli, M. Wimmer, K. Richter, and H. U. Baranger, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056806 (2009).
 - [24] J. G. G. S. Ramos, M. S. Hussein, and A. L. R. Barbosa, *Phys. Rev. B* **93**, 125136 (2016).
 - [25] Pe Yu, Zi-Yuan Li, Hong-Ya Xu, Liang Huang, Barbara Dietz, Celso Grebogi, and Ying-Cheng Lai, *Phys. Rev. E* **94**, 062214 (2016).
 - [26] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).
 - [27] C. W. J. Beenakker and C. Schonenberger, *Phys. Today* **56**(5), 37 (2003).

- [28] A. Kretinin, G. L. Yu, R. Jalil, Y. Cao, F. Withers, A. Mishchenko, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **88**, 165427 (2013).
- [29] L. S. Levitov, in *Quantum Noise in Mesoscopic Systems*, edited by Yu. V. Nazarov (Kluwer, Dordrecht, 2003).
- [30] Ying-Cheng Lai, Hong-Ya Xu, L. Huang, and C. Grebogi, *Chaos* **28**, 052101 (2018).
- [31] C. H. Lewenkopf, E. R. Mucciolo, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **77**, 081410(R) (2008).
- [32] P. Jacquod, R. S. Whitney, J. Meair, and M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **86**, 155118 (2012).
- [33] S. M. Nishigaki, D. M. Gangardt, and A. Kamenev, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 3137 (2003).
- [34] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker, *J. Math. Phys.* **37**, 4904 (1996).
- [35] M. S. M. Barros, A. J. Nascimento Júnior, A. F. Macedo-Junior, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa, *Phys. Rev. B* **88**, 245133 (2013).
- [36] T. Guhr, A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller, *Phys. Rep.* **299**, 189 (1998).
- [37] P. Braun, S. Heusler, S. Müller, and F. Haake, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, L159 (2006).
- [38] I. Hagymási, P. Vancsó, A. Pálinkás, and Z. Osváth, *Phys. Rev. B* **95**, 075123 (2017).
- [39] B. Béri and J. Cserti, *Phys. Rev. B* **75**, 041308(R) (2007).
- [40] S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simović, R. Schleser, T. Ihn, P. Studerus, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 076605 (2006).
- [41] C. Mahaux and H. A. Weidenmüller, *Shell Model Approach to Nuclear Reactions* (North-Holland, Amsterdam, 1969).
- [42] M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic Press, New York, 1991).
- [43] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, D. Bazeia, M. S. Hussein, and C. H. Lewenkopf, *Phys. Rev. B* **86**, 235112 (2012).
- [44] E. V. Shuryak and J. J. M. Verbaarschot, *Nucl. Phys. A* **560**, 306 (1993); J. Verbaarschot, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2531 (1994).
- [45] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, and A. M. S. Macêdo, *Phys. Rev. B* **78**, 235305 (2008); *J. Phys. A: Math. Gen.* **43**, 075101 (2010).
- [46] P. W. Brouwer, J. N. H. J. Cremers, and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **65**, 081302(R) (2002).
- [47] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, and A. M. S. Macêdo, *Phys. Rev. B* **84**, 035453 (2011).
- [48] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, D. Bazeia, and M. S. Hussein, *Phys. Rev. B* **85**, 115123 (2012).
- [49] D. Culcer, A. L. Saraiva, B. Koiller, X. Hu, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 126804 (2012).
- [50] O. Gunawan, B. Habib, E. P. De Poortere, and M. Shayegan, *Phys. Rev. B* **74**, 155436 (2006).
- [51] K. Behnia, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 488 (2012).
- [52] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, *New J. Phys.* **11**, 095016 (2009).
- [53] I. C. Fulga, F. Hassler, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **83**, 155429 (2011).