

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Física

Yoshiyuki Sugawara Miranda

**Transporte em um Ponto Quântico Aberto: Estudo de
Autocorrelações da Condutância e do Emaranhamento**

João Pessoa

8 de Junho de 2017

Yoshiyuki Sugawara Miranda

Transporte em um Ponto Quântico Aberto: Estudo de Autocorrelações da Condutância e do Emaranhamento

Dissertação de mestrado apresentada ao departamento de física da Universidade Federal da Paraíba para obtenção do título de mestre em física.

Área de concentração: Matéria Condensada.

Orientador: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos.

João Pessoa

8 de Junho de 2017

M672t Miranda, Yoshiyuki Sugawara.
Transporte em um ponto quântico aberto: estudo de
autocorrelações da condutância e do emaranhamento /
Yoshiyuki Sugawara Miranda. - João Pessoa, 2017.
73 f.: il. -

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

1. Física. 2. Sistemas Mesoscópicos. 3. Transporte
Quântico. 4. Condutância. 5. Emaranhamento. I. Título.

UFPB/BC

CDU: 33(043)



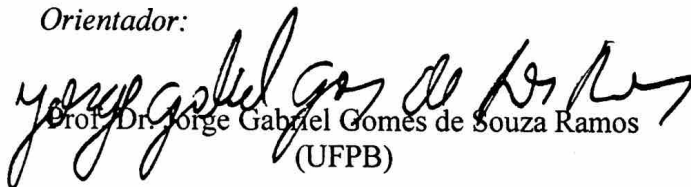
Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

DECLARAÇÃO DE TITULAÇÃO
Mestrado

A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 23 de fevereiro de 2017, na Sala de Reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, APROVA **Yoshiyuki Sugawara Miranda** na defesa de sua dissertação intitulada “*Transporte em um ponto quântico aberto: estudo de auto-correlações da condutância e do emaranhamento*”.

João Pessoa, 23 de fevereiro de 2017.

Orientador:


Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
(UFPB)

1º Examinador:


Prof. Dr. Dionísio Bazeia Filho
(UFPB)

2º Examinador:


Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
(UFRPE)

Dedicatória

Dedico este trabalho a Toshiko Sugawara.

Resumo

Uma realização importante da mecânica quântica é o transporte de elétrons através de nanoestruturas. Neste trabalho o transporte quântico será explorado através do formalismo estatístico de matrizes de espalhamento aleatórias, que, por sua vez, será detalhadamente explorado. Este formalismo será então adequado a algumas formulações para a obtenção de resultados de interesse através de simulação computacional. Será estudada a formulação de Landauer para a condutância à baixas temperaturas adaptada para matrizes de espalhamento. Através desta formulação, serão obtidas curvas de condutância, curvas de autocorrelação da condutância e, por fim, será feita uma análise da largura das curvas de autocorrelação para diferentes ressonâncias. Será estudado também um processo específico de criação de emaranhamento de formação definido por Wootters, seguindo um modelo criado por Beenakker. Igualmente, será utilizado o formalismo de matrizes de espalhamento para obtenção de curvas de autocorrelação do emaranhamento e da concorrência. No caso do emaranhamento e da concorrência serão apresentados alguns resultados inéditos através de gráficos e histogramas de probabilidade de emaranhamento e concorrência para energias de interesse. Os resultados serão obtidos através de sistemas similares, tratando de um ponto quântico aberto com dois guias e quatro canais, estudados de acordo com a necessidade de cada formulação.

Palavras Chave: Transporte Quântico; Sistemas Mesoscópicos; Condutância; Emaranhamento.

Abstract

The transport of electrons through nanostructures is an important achievement of quantum mechanics. In this dissertation, quantum transport will be explored through the statistic formalism of random scattering matrices, wich will be thoroughly explored in its own chapter. This formalism will then be adequated to be used in computer simulation to achieve some interesting results. We will study Landauer's formulation for the conductance at low temperatures adapted to scattering matrices. Through this formulation, we will obtain conductance curves, autocorrelation curves, and finally we will analyze the width of the autocorrelation curves for different resonances. We will also study a specific process of generation of entanglement of formation, as defined by Wootters, following a model created by Beenakker. Following the same methodology used for the conductance, we will use the scattering matrices formalism to obtain autocorrelation curves for entanglement and conductance. Exclusively for entanglement and concurrence, some new results will be presented through graphs and histograms of probability of entanglement and concurrence for some energies of interest. The results for both the conductance and the entanglement will be obtained through similar systems, consisting of an open quantum dot with two leads and four channels, studied according to the necessity of each formulation.

Key Words: Quantum Transport; Mesoscopic Systems; Conductance; Entanglement.

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Gráfico da condutância e da corrente em função da energia para um sistema clássico onde σ se mantém constante. | 5 |
| 1.2 | Gráfico da condutância em função da energia para um sistema mesoscópico . . . | 6 |
| 1.3 | Curvas de emaranhamento (ε) em função da energia (E) para pontos quânticos diferentes. | 9 |
| 2.1 | Região desordenada conectada a reservatório de elétrons através de guias ideais. A matriz de espalhamento S relaciona as amplitudes a^+, b^- das ondas incidentes às amplitudes a^-, b^+ das ondas transmitidas. | 15 |
| 2.2 | Cavidade caótica (ponto quântico) acoplado a dois reservatórios via guias estreitos contendo barreiras de potencial. A distribuição da matriz de espalhamento é dado pelo núcleo de Poisson devido às barreiras. Caso removamos as barreiras, as matrizes de espalhamento serão dadas pelo ensemble circular. | 18 |
| 2.3 | Espalhamento de modos propagantes em um guia semi-infinito causado na região de interação | 24 |
| 3.1 | Um condutor ideal está ligando dois contatos que por sua vez estão ligados a reservatório de elétrons. Aos contatos são impostas a condição de não reflexão, ou seja, a probabilidade de reflexão nas transições contato-condutor são negligenciáveis. | 36 |
| 3.2 | A) Um condutor com uma probabilidade de transmissão T está conectado a dois contatos através de dois guias. B) Pelo fato do sistema se encontrar à temperatura zero, a distribuição das energias assume uma forma que impede que haja corrente nos dois sentidos. | 38 |
| 3.3 | A) Um condutor está ligado a dois contatos através de dois guias ideais. A probabilidade de transição do guia 1 para o guia 2 é dado por T e a probabilidade de transição do guia 2 para o guia 1 é dado por T' . B) Devido ao fato de não estarmos mais em um regime de temperatura zero, temos agora distribuições de energia um pouco mais suaves que permitem corrente nos dois sentidos. | 42 |

| | | |
|-----|--|----|
| 3.4 | A) Temos a função $\tilde{T}(E)$ que varia bastante com a energia. B) Temos a função $F_T(E)$ que serve como filtro para a função $\tilde{T}(E)$ dentro da operação de convolução. C) A função $\tilde{G}(E)$ formada pela convolução de $\tilde{T}(E)$ e $F_T(E)$ se torna uma função suave, e pode ser considerada constante em intervalos pequenos de energia | 47 |
| 3.5 | Diferentes curvas de condutância obtidas através de hamiltonianos aleatórios. | 48 |
| 3.6 | Curvas de correlação para dois valores diferentes das ressonâncias da cavidade caótica. | 49 |
| 3.7 | Gráfico das larguras das curvas de autocorrelação da condutância à altura média em função das ressonâncias para o ensemble ortogonal | 50 |
| 3.8 | Gráfico das larguras das curvas de autocorrelação da condutância à altura média em função das ressonâncias para o ensemble unitário | 51 |
| 4.1 | Modelo do ponto quântico utilizado para gerar emaranhamento retirado da referência [46]. Os guias superiores ($L1, R1$) representam o estado $ 1\rangle$ e os guias inferiores ($L2, R2$) representam o estado $ 0\rangle$ ou vice-versa, desta maneira podemos entender um elétron que sai do sistema pela direita ou pela esquerda como um qubit. | 55 |
| 4.2 | Gráfico do emaranhamento médio (esquerda) e da concorrência média (direita) | 57 |
| 4.3 | Gráfico da correlação do emaranhamento (esquerda) e da correlação da concorrência (direita) para $\beta = 1, 2, 4$ fittados por funções similares a lorentzianas porém com expoente global diferente de 1 | 57 |
| 4.4 | Histogramas do emaranhamento (esquerda) e da concorrência (direita) para valores de interesse nas curvas da figura (4.2) para o ensemble ortogonal | 58 |
| 4.5 | Histogramas do emaranhamento (esquerda) e da concorrência (direita) para valores de interesse nas curvas da figura (4.2) para o ensemble unitário | 58 |
| 4.6 | Histogramas do emaranhamento (esquerda) e da concorrência (direita) para valores de interesse nas curvas da figura (4.2) para o ensemble simplético | 59 |

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 1.1 | Sistemas Mesoscópicos | 1 |
| 1.2 | Corrente e Condutância | 2 |
| 1.3 | Emaranhamento Quântico | 7 |
| 2 | Teoria de Matrizes Aleatórias para Transporte Quântico em um Ponto Quântico | 10 |
| 2.1 | Breve Introdução à Teoria de Matrizes Aleatórias | 10 |
| 2.2 | Teoria Estatística de Níveis de Energia | 11 |
| 2.2.1 | Ensemble de Wigner-Dyson | 11 |
| 2.2.2 | Correlações Geométricas | 14 |
| 2.3 | Teoria Estatística de Autovalores de Transmissão | 14 |
| 2.3.1 | Matriz de Espalhamento | 15 |
| 2.3.2 | Correlações Geométricas para Autovalores de Transmissão | 16 |
| 2.4 | Ponto Quântico | 18 |
| 2.4.1 | Ensemble Circular de Matrizes de Espalhamento | 19 |
| 2.5 | Núcleo de Poisson | 20 |
| 2.6 | Ensemble Gaussiano | 21 |
| 2.6.1 | O Modelo Estocástico de VWZ | 22 |
| 2.6.2 | Dedução da Matriz de Espalhamento de Mahaux-Weidenmüller | 23 |
| 2.7 | Equivalência Entre Ensembles | 31 |
| 2.7.1 | Ensemble Gaussiano e Ensemble Lorentziano | 32 |
| 2.7.2 | Ensemble Lorentziano e Ensemble Circular | 32 |
| 3 | Condutância | 35 |
| 3.1 | Descrição Geral do Problema | 35 |
| 3.2 | Cálculo da Corrente | 36 |
| 3.3 | Fórmula de Landauer para a Condutância | 38 |
| 3.4 | Formulação de Matriz de Espalhamento para a Fórmula de Landauer | 39 |
| 3.5 | Considerações Sobre um Sistema Menos Idealizado | 41 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.6 | Resultados Obtidos Através de Simulação | 48 |
| 4 | Geração de Emaranhamento em um Ponto Quântico Caótico | 52 |
| 4.1 | Definição de Emaranhamento e Concorrência | 52 |
| 4.1.1 | Emaranhamento e Concorrência em um Ensemble Puro | 53 |
| 4.1.2 | Emaranhamento e Concorrência em um Ensemble Misto | 54 |
| 4.2 | Modelo Para Produção de Emaranhamento em um Ponto Quântico Caótico . . . | 55 |
| 4.3 | Resultados Obtidos Através de Simulação | 56 |
| 5 | Conclusão e Perspectivas | 60 |
| | Bibliografia | 61 |

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo, iremos fazer uma breve introdução, de maneira simples e objetiva, dos principais conceitos levantados nesta dissertação. O objetivo principal deste capítulo é revisar os conceitos ou até mesmo criar uma base conceitual suficientemente sólida para que não seja necessário um conhecimento profundo da área para se poder acompanhar de maneira satisfatória os desenvolvimentos realizados nos próximos capítulos.

1.1 Sistemas Mesoscópicos

A terminologia “Mesoscópica”, aplicada para física, apareceu pela primeira vez em um artigo de 1976 [1]. Desde então, esse termo vem sendo utilizado para descrever sistemas que se encontram no limite entre sistemas clássicos e quânticos.

Durante a maior parte da história, a mecânica clássica foi capaz de descrever com sucesso os fenômenos observados na natureza. Esses problemas eram relacionados ao mundo macroscópico. No entanto, com o passar do tempo, foram observados fenômenos que não mais obedeciam as regras da mecânica clássica. Estes fenômenos só seriam explicados satisfatoriamente através de um formalismo próprio. Foi então desenvolvida a mecânica quântica. Enquanto a mecânica clássica descreve os fenômenos do mundo macroscópico, a mecânica quântica descreve os fenômenos do mundo microscópico. Com essa diferenciação entre as mecânicas clássica e quântica, cabe uma diferenciação entre o mundo macroscópico e o mundo microscópico.

Quando nos referimos ao mundo microscópico, a idéia inicial é de que seja um sistema que não podemos observar a olho nu. No entanto, essa definição não é boa o suficiente para discriminar sistemas quânticos de sistemas clássicos. Tomando a mecânica quântica como o formalismo que descreve melhor as regras do mundo ao nosso redor e a mecânica clássica como uma aproximação, podemos chamar de mundo macroscópico todos os sistemas onde essa aproximação é satisfatória. Seguindo essa lógica, podemos chamar de mundo microscópico os

sistemas onde esta aproximação já não é satisfatória. Neste caso, a região limite entre esses dois sistemas pode ser chamado de mundo mesoscópico.

O mundo mesoscópico com suas peculiaridades tem sido observado geralmente em estruturas em nanoescala, ao ponto de se chamar tais estruturas de sistemas mesoscópicos. Podemos definir o mundo mesoscópico como sistemas que se encontrem entre 1 micrômetro e 1 nanômetro.

O que mais se espera tecnologicamente da área de física mesoscópica é o desenvolvimento de aparelhos que se utilizem dos fenômenos obtidos através de circuitos em escala nanométrica. Sendo uma área que visa a aplicação de tecnologia à curto prazo, pode-se categorizar a área de física mesoscópica como uma área prática e promissora.

Neste trabalho, iremos estudar um sistema mesoscópico de dois ângulos diferentes. Iremos estudar tal sistema observando a autocorrelação da condutância e em um outro momento a autocorrelação do emaranhamento gerado pelo sistema. Esta discussão foi baseada em [2].

1.2 Corrente e Condutância

Podemos definir Corrente elétrica como cargas se movendo de uma região do espaço para outra. Caso as cargas se movam em um *loop* fechado, podemos dizer que o caminho é um circuito elétrico.

Quando partículas carregadas se movem em um circuito, energia potencial elétrica é transferida de uma fonte para um aparato no qual energia é estocada ou convertida em outra forma (som, calor, luz, etc.). Essa característica traz uma grande importância aos circuitos elétricos. Por isso, há necessidade de estudar esses sistemas tanto em um regime clássico quanto em um regime mesoscópico (o que será feito no capítulo 3).

Vamos fazer o desenvolvimento teórico supondo situações envolvendo um fio condutor. Primeiro vamos supor que o campo elétrico é nulo dentro do condutor, e devido a esse fato, teremos corrente nula. Na estrutura interna do condutor, teremos elétrons livres circulando em direções aleatórias resultando em um movimento total nulo.

Vamos supor agora que seja aplicado um campo elétrico constante \vec{E} dentro do fio condutor. Os elétrons livres que estavam dentro do condutor estarão agora sujeitos a uma força dada por

$$\vec{F} = e\vec{E} \quad (1.1)$$

No entanto, dentro do condutor os elétrons estarão sujeitos a colisões com os íons do condutor. Cada colisão resulta em uma mudança aleatória de direção de movimento do elétron. Taremos como efeito da aplicação do campo elétrico \vec{E} , levando em conta as colisões aleatórias, o movimento dos elétrons como um grupo à uma velocidade de deriva \vec{v}_d na direção da força \vec{F}

gerando corrente no condutor.

A direção da corrente I é dada pelo sentido do fluxo de carga positiva ou o sentido contrário do fluxo de cargas negativas. Mais detalhadamente podemos dizer que a corrente que atravessa a seção transversal de um condutor de área A é o fluxo total de carga atravessando tal área por unidade de tempo, teremos então

$$I = \frac{dQ}{dt} = nev_d A, \quad (1.2)$$

onde n é a quantidade de partículas que atravessam a seção A em um tempo dt , e é a carga de uma partícula e dQ é a carga que atravessa a seção A em um tempo dt . Diretamente de (1.2) podemos definir que a densidade de corrente será dada pela corrente dividida pela seção transversal do condutor

$$J = \frac{I}{A}, \quad (1.3)$$

onde podemos ainda escrever a densidade de corrente como um vetor \vec{J} que aponta no sentido da velocidade de deriva. O vetor densidade de corrente \vec{J} terá então de depender do campo elétrico \vec{E} e das propriedades do material, o que pode ser bastante complicado. Entretanto, para alguns materiais, em especial os metais, \vec{J} é quase diretamente proporcional a \vec{E} , e a proporção entre as magnitudes de E e J é constante para uma temperatura constante. Esta regra se aplica para sistemas idealizados e é conhecida como a lei de Ohm. Para esta introdução, esta regra é suficientemente válida. Esta proporção constante pode ser definida como resistividade

$$\rho = \frac{E}{J} \quad (1.4)$$

ou condutividade

$$\sigma = \frac{J}{E} \quad (1.5)$$

onde obviamente $\sigma = 1/\rho$. A resistividade é a característica de um material, que obedece a lei de Ohm, que define a resistência que o material tem em relação ao fluxo de cargas. Quanto maior a resistividade, maior a magnitude do campo necessário para gerar tal corrente, enquanto a condutividade é o exato oposto e trata da permissividade do material.

Estudamos o circuito através de expressões para a densidade de corrente \vec{J} e do campo elétrico \vec{E} . No entanto, muitas vezes é mais interessante trabalhar com a corrente total I e a diferença de potencial V . Já temos uma relação entre a corrente e a densidade de corrente da equação (1.3). Precisamos então encontrar uma relação entre a diferença de potencial e o campo elétrico.

Caso o nosso fio tenha comprimento L , seção transversal A e seja aplicada uma diferença de potencial V entre as pontas do fio, teremos como consequência um fluxo de cargas fluindo do maior potencial para o menor. Quanto maior a diferença de potencial, maior a corrente, e conseqüentemente, maior o campo elétrico. Por sua vez, a corrente provinda da ponta com

maior potencial irá perder potencial devido às colisões com os íons do condutor ao longo do fio. Podemos inferir que o campo elétrico \vec{E} está então relacionado à diferença de potencial através do comprimento L do fio de maneira que quanto maior o comprimento menor o campo, ou seja

$$E = \frac{V}{L} \quad (1.6)$$

teremos a partir das equações (1.3),(1.4) e (1.6)

$$V = \frac{\rho LI}{A} \quad (1.7)$$

onde a proporção entre a diferença de potencial e a corrente é definida como resistência

$$R = \frac{V}{I} = \frac{\rho L}{A} \quad (1.8)$$

ou condutância

$$G \equiv \frac{1}{R} = \frac{\sigma A}{L} \quad (1.9)$$

A equação (1.8) nos mostra que a resistência de um condutor de seção transversal uniforme é diretamente proporcional ao seu comprimento e resistividade do seu material enquanto é inversamente proporcional a sua seção transversal. Já a equação (1.9) nos diz que a condutância age como o inverso da resistência.

Resistência e condutância servem ao mesmo propósito dos seus análogos intrínsecos resistividade e condutividade. No entanto resistência e condutância se aplicam para o sistema como um todo, levando em conta sua geometria e não só características intrínsecas do material como no caso da resistividade e condutividade.

No entanto, nós iremos aplicar estas relações para sistemas mesoscópicos, onde tomaremos um condutor com tais dimensões que podem estar fora do intervalo de validade das relações obtidas. Cabe aqui um questionamento sobre o comportamento da condutividade em sistemas mesoscópicos. Para este questionamento, vamos estudar um outro sistema.

Consideremos um condutor homogêneo achatado em “duas dimensões” com comprimento L e largura W entre dois contatos que estão ligados a reservatórios de elétrons com uma certa diferença de potencial $\mu_1 - \mu_2$ à temperatura $T = 0$.

À $T = 0$, os elétrons abaixo do potencial μ_2 não contribuem para o fluxo de carga e serão ignorados. Podemos então focar o problema para o intervalo de energia $\mu_1 > E > \mu_2$. Neste intervalo teremos uma densidade de elétrons no contato 1 dada por $N_s(\mu_1 - \mu_2)$, onde $N_s \equiv m/\pi\hbar^2$ e nenhum elétron no contato 2, de maneira que teremos um gradiente de concentração de elétrons do contato 1 para o contato 2. Este fato implica em uma corrente de difusão que

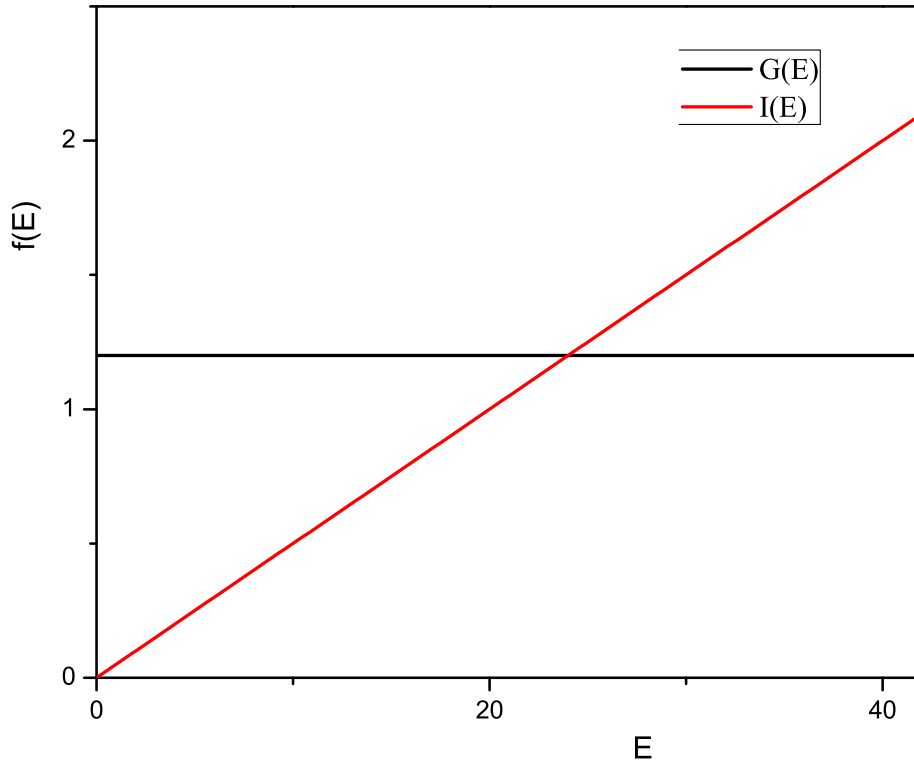


Figura 1.1: Gráfico da condutância e da corrente em função da energia para um sistema clássico onde σ se mantém constante.

pode ser calculada da equação de difusão

$$\vec{J} = -eD\vec{\nabla}n = e^2DN_s\frac{\mu_1 - \mu_2}{|e|L}\hat{x} \rightarrow e^2DN_s\vec{E} \quad (1.10)$$

onde D é o coeficiente de difusão. A partir da equação (1.5), podemos encontrar uma expressão para a condutividade neste modelo mesoscópico

$$\sigma = e^2N_sD \quad (1.11)$$

que é a relação de Einstein para condutores degenerados.

Uma vez investigado a condutividade, podemos investigar o comportamento da condutância. Diretamente da expressão para a condutância obtida, $G = \sigma A/L$, podemos observar que a condutância depende diretamente das dimensões do condutor a ser estudado. Quando passamos de um sistema clássico para um sistema mesoscópico as dimensões do condutor vão para valores muito pequenos de maneira que os elétrons não mais “enxergam” o condutor como algo uniforme e isso causa uma mudança no comportamento da função da condutância.

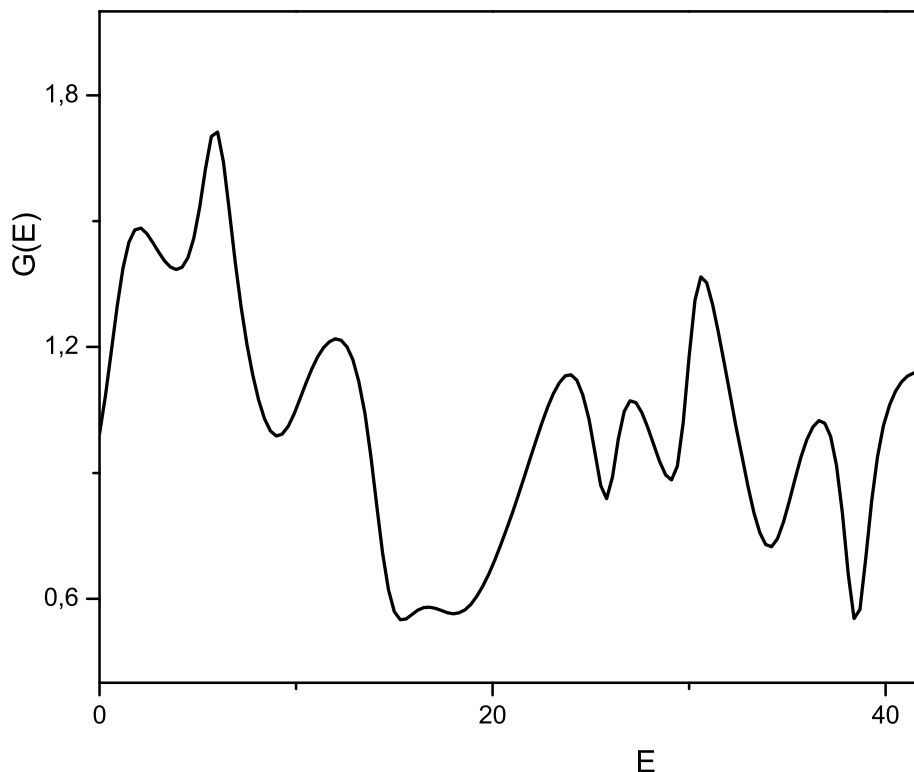


Figura 1.2: Gráfico da condutância em função da energia para um sistema mesoscópico

Podemos observar nas figuras (1.1) e (1.2) um exemplo do comportamento das funções de condutância para um sistema clássico e para um sistema mesoscópico. Enquanto no caso clássico a condutância mantém um valor constante que depende apenas das dimensões do condutor, no caso do sistema mesoscópico o comportamento da função é errático e varia fortemente com a energia.

Iremos estudar a condutância mais a fundo no capítulo 3, levando em conta fenômenos quânticos e desenvolvendo uma discussão mais apurada. A discussão será feita em cima do sistema há pouco descrito, que será estudado através do formalismo de espalhamento para matrizes aleatórias. Neste formalismo a condutância é proporcional ao traço dos elementos de transmissão

$$G \propto \text{Tr}(tt^\dagger) \quad (1.12)$$

Esse sistema e formalismo será então aproveitado para estudar um fenômeno chamado de emaranhamento quântico. O emaranhamento quântico também pode ser relacionado a elementos da matriz de espalhamento, seguindo a seguinte relação

$$E \propto \frac{\sqrt{\text{Det}\gamma\gamma^\dagger}}{\text{Tr}\gamma\gamma^\dagger}, \quad \gamma = \sigma_y r \sigma_y t^T \quad (1.13)$$

Por ora, essa discussão sobre a condutância é suficiente e revisa os conceitos necessários para o entendimento dos desenvolvimentos a serem realizados no capítulo 3 de maneira satisfatória. Essa discussão foi baseada nas referências [3][4]

1.3 Emaranhamento Quântico

A mecânica quântica é a teoria que melhor descreve o mundo microscópico e seu estranho conjunto de regras, que muitas vezes parece não ter muito em comum com a realidade macroscópica. Como toda teoria, a mecânica quântica possui um cerne, um conjunto de características singulares. Essas características a diferenciam de outras teorias e lhe dão a capacidade de explicar certos eventos de maneira única. No caso da mecânica quântica, o conceito que a define é o emaranhamento quântico.

O fenômeno de emaranhamento quântico foi observado teoricamente pela primeira vez por Einstein, Podolsky e Rosen[5] em 1935. Neste artigo, questionava-se a mecânica quântica como uma teoria completa. Pela definição de Einstein, para que uma teoria física pudesse ser considerada completa, ela teria que corresponder cada elemento da realidade física com um elemento de sua teoria física. O questionamento foi feito através do problema a seguir.

Suponha que tenhamos dois sistemas que interagiram entre si por um determinado intervalo de tempo. Após esse tempo, esses sistemas deixam de interagir e então tomamos a medida de um deles e observamos o estado final do sistema que não foi medido.

O sistema 1, quando medido pelo observável A , retornará os autovalores a_1, a_2, a_3, \dots relacionados aos autovetores $u_1(x_1), u_2(x_2), u_3(x_3), \dots$. De maneira geral, podemos representar o sistema total pós-interação com respeito a autoestados de A como

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x_1)\psi_n(x_2)$$

Uma medida de A fará o sistema selecionar um estado k dentre todos. Teremos então

$$A\Psi(x_1, x_2) = a_k\Psi_k(x_1, x_2) = a_k[u_k(x_1)\psi_k(x_2)]$$

Por outro lado, podemos representar o sistema um em termos de autoestados de um observável qualquer B . Nesta nova representação, o sistema 1 terá autovetores $g_1(x_1), g_2(x_2), g_3(x_3), \dots$ e retornará os autovalores b_1, b_2, b_3, \dots quando feita a medição de B . Teremos neste caso o sistema

total dado por

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n(x_1)\phi_n(x_2)$$

Tomando a medida em B irá fazer o estado colapsar em um estado k

$$B\Psi(x_1, x_2) = b_k\Psi_k(x_1, x_2) = b_k[g_k(x_1)\phi_k(x_2)]$$

Podemos observar que dependendo do observável utilizado para fazer a medição, o sistema 2 pode colapsar em dois estados diferentes ($\psi_k(x_2)$ ou $\phi_k(x_2)$). Resultado este que causa estranheza, afinal de contas, os dois sistemas já não estariam mais interagindo e além disso as medidas teriam sido feitas apenas sobre o sistema 1.

Este tipo de interação foi nomeado de emaranhamento quântico por Erwin Schrödinger [6], onde o próprio classificou o emaranhamento como a característica que define a mecânica quântica. Essa configuração de dois sistemas receberia o nome de par EPR (em homenagem aos autores do artigo inicial) e o problema foi chamado de “paradoxo EPR”.

O emaranhamento quântico gerou bastantes discussões sobre como um sistema quântico, em especial o caso EPR, deveria ser encarado. A duas principais linhas de pensamento divergiam sobre o fator de localidade de um sistema quântico. Alguns sugeriam que para manter a localidade de um sistema quântico era necessário que houvessem variáveis ocultas[5], enquanto outros viam o sistema quântico como não-local.

A prova teórica da não-localidade veio em 1964 com uma publicação de John Bell [7]. Em sua publicação ele demonstrou que no caso EPR a informação entre dois sistemas emaranhados deve ser transmitida instantaneamente e que esses sistemas não devem ser independentes.

A principal área de aplicação do fenômeno de emaranhamento quântico até o momento é sem dúvidas a computação quântica. A área de computação quântica trás um aumento significativo no poder de computação em alguns tipos de processos, assim como permite que alguns novos processos sejam realizados, como por exemplo o “envio” de informação quântica através de canais clássicos (teletransporte quântico). No entanto, a implementação de sistemas de computação quântica não é tão simples pelo fato de ser necessário criar partículas emaranhadas de maneira consistente. Esse é um dos principais motivos de se estudar sistemas de criação de emaranhamento.

Como já foi mencionado, neste trabalho iremos calcular o emaranhamento através do formalismo de matrizes aleatórias. Através deste formalismo pudemos observar que como mostrado na figura (1.3), o emaranhamento tem um caráter oscilatório e caótico para pequenas energias e um caráter mais constantes para energias maiores. Através de uma amostragem grande de curvas de emaranhamento foi possível obter uma função de autocorrelação para o emaranhamento

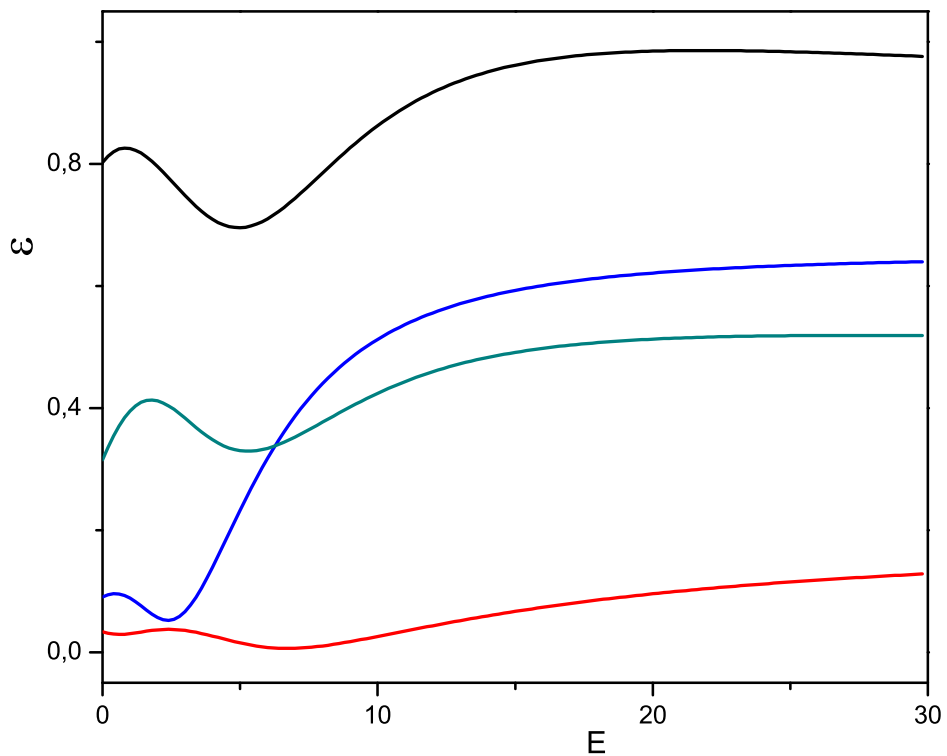


Figura 1.3: Curvas de emaranhamento (ε) em função da energia (E) para pontos quânticos diferentes.

e estudar a distribuição de probabilidade de quantidade de emaranhamento para os ensembles ortogonal, unitário e simplético.

No capítulo 4 iremos definir mais a fundo o emaranhamento e iremos mostrar resultados obtidos através de simulação a partir de um sistema proposto por Beenakker para a criação de emaranhamento.

Capítulo 2

Teoria de Matrizes Aleatórias para Transporte Quântico em um Ponto Quântico

2.1 Breve Introdução à Teoria de Matrizes Aleatórias

Teoria de matrizes aleatórias lida com propriedades estatísticas de matrizes grandes com elementos aleatoriamente distribuídos. A partir da distribuição de probabilidade das matrizes, podemos obter funções de correlação dos autovalores e autovetores. A partir dessas funções de correlação, é possível extrair propriedades físicas do sistema. Neste trabalho, focamos na correlação da condutância, da concorrência e do emaranhamento.

A teoria de matrizes aleatórias começou a ser estudada na década de 1930, porém sem chamar muita atenção por não haver uma área de estudo com uma ligação forte à teoria. Entretanto, no início da década de 1950 foi observado que era possível entender melhor alguns problemas através do formalismo de matrizes aleatórias. O problema que de fato impulsionou o estudo de matrizes aleatórias foi o problema dos níveis de energia de núcleos pesados abordado por Wigner[10][11] através de TMA em 1955. A partir de então, o formalismo de matrizes aleatórias passou a ser utilizado em várias áreas da física e da matemática onde podemos citar como exemplos a caracterização de sistemas caóticos, gravitação quântica, cromodinâmica quântica, teoria de cordas e problemas de transporte quântico, onde este último exemplo é de suma importância para este trabalho.

A TMA em um problema de transporte quântico lida com sistemas mesoscópicos, que por sua vez se encontram na fronteira entre o microscópico e o macroscópico. O efeito dessa aproximação é que nesses sistemas os elétrons irão manter sua coerência de fase quântica, necessitando um tratamento quântico ao problema, e ao mesmo tempo o sistema é grande o suficiente para que um tratamento estatístico seja aceitável. Neste regime é possível estudar uma

variedade de novos fenômenos através da interferência quântica, onde parte destes fenômenos mostram um caráter “universal”, no sentido de que até certo ponto estes fenômenos independem do tamanho da amostra ou do grau de desordem. Neste ponto, a TMA relaciona a “universalidade” destas propriedades do transporte quântico à universalidade das funções de correlação de autovalores de transmissão. A vantagem de se estudar o problema através deste prisma é que se leva em conta toda a distribuição de probabilidade da matriz de transmissão e, portanto, os resultados podem ser aplicados a várias propriedades do transporte quântico, não se restringindo à condutância. De acordo com Beenakker [12] temos a descrição completa da estatística da matriz de transmissão para dois tipos de geometria. Temos a geometria tipo fio e a geometria tipo ponto quântico. Neste trabalho iremos nos focar no segundo tipo e seguiremos a descrição do mesmo como em [12].

2.2 Teoria Estatística de Níveis de Energia

A TMA aplicada ao transporte quântico é uma teoria estatística de autovalores de transmissão de um sistema aberto. Em contrapartida, a TMA desenvolvida por Wigner e Dyson trata da estatística dos níveis de energia de um sistema fechado. Nesta seção, falaremos um pouco sobre o ensemble de hamiltonianos aleatórios de Wigner-Dyson focando na hipótese de correlação geométrica.

2.2.1 Ensemble de Wigner-Dyson

Wigner e Dyson estudaram um ensemble de matrizes hermitianas \mathcal{H} de dimensão $N \times N$ com a distribuição de probabilidade dada por

$$P(\mathcal{H}) = C \exp\{-\beta \text{Tr } V(\mathcal{H})\} \quad (2.1)$$

onde C é a constante de normalização. Caso o potencial seja $V(\mathcal{H}) \propto \mathcal{H}^2$, o ensemble é chamado de ensemble gaussiano. Wigner focou seus estudos no ensemble gaussiano pelo fato do ensemble seguir a relação $\text{Tr } \mathcal{H}^2 = \text{Tr } \mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger = \sum_{ij} |\mathcal{H}_{ij}|^2$ que causa o ensemble a ter elementos matriciais independentemente distribuídos, o que acarreta a simplificação de alguns cálculos.

Para que o hamiltoniano seja aceitável no contexto de representar um sistema físico, é necessário e suficiente que seja tomado o limite $N \rightarrow \infty$. Neste limite, as correlações espectrais se tornam bastante independentes do potencial V contanto que não se aproxime do limite do espectro. O termo β na equação (2.1) é chamado de índice de simetria, ele serve para sinalizar os graus de liberdade dos elementos da matriz e pode assumir os valores $\beta = 1, 2, 4$. Os elementos da matriz podem ser reais, complexos, ou números reais quaterniônicos correspondendo

a $\beta = 1, 2, 4$ respectivamente. De maneira geral, podemos definir os sistemas com diferentes valores de β como:

- $\beta = 1$: Sistemas com simetria de reversão temporal e simetria de rotação de spin semi-inteiro. Esses sistemas se transformam através de uma transformação de similaridade $\mathcal{H} \rightarrow U\mathcal{H}U^{-1}$ onde U é ortogonal e geram matrizes hamiltonianas \mathcal{H} com entradas $\mathcal{H}_{\mu\nu}$ reais que satisfazem

$$\mathcal{H}_{\mu\nu} = \mathcal{H}_{\nu\mu} = \mathcal{H}_{\mu\nu}^*$$

- $\beta = 2$: Sistemas com quebra de simetria de reversão temporal. Geralmente essa quebra acontece devido a um campo magnético ou impurezas magnéticas. Esses sistemas se transformam através de uma transformação de similaridade $\mathcal{H} \rightarrow U\mathcal{H}U^{-1}$ onde U é unitário. A quebra do vínculo de reversão temporal gera um novo grau de liberdade para as entradas do hamiltoniano que seguem a seguinte relação

$$\mathcal{H}_{\mu\nu} = \mathcal{H}_{\mu\nu}^\dagger$$

- $\beta = 4$: Sistemas com simetria de reversão temporal e com quebra de simetria de rotação de spin semi-inteiro (devido a espalhamento spin-órbita forte). Esses sistemas se transformam através de uma transformação de similaridade $\mathcal{H} \rightarrow U\mathcal{H}U^{-1}$ onde U é simplético. As entradas do hamiltoniano são quatérnions reais¹ e podem ser escritas seguindo a seguinte relação

$$\mathcal{H}_{\mu\nu} = \mathcal{H}_{\mu\nu}^0 I - i \sum_{j=1}^3 \mathcal{H}_{\mu\nu}^j \sigma_j,$$

onde σ_j são as matrizes de pauli, $\mathcal{H}_{\mu\nu}^0$ é um coeficiente real e $\mathcal{H}_{\mu\nu}^j$ onde $j=1,2,3$ são coeficientes complexos.

Podemos agora deduzir, a partir da distribuição de probabilidade $P(\mathcal{H})$, a distribuição em função dos autovalores e autovetores de \mathcal{H} . Tomando $\{E_n\}$ como conjunto de autovalores e U como a matriz de autovetores, teremos para $\beta = 1, 2$

$$\mathcal{H} = U \text{diag}(E_1, E_2, \dots, E_N) U^\dagger \quad (2.2)$$

e para $\beta = 4$

$$\mathcal{H} = U \text{diag}(E_1 I, E_2 I, \dots, E_N I) U^\dagger \quad (2.3)$$

onde cada um dos N autovalores diferentes em (2.3) é duplamente degenerado. Observando equação (2.1), podemos afirmar que a distribuição de probabilidade depende apenas do traço de

¹Um quatérnion Q é uma matriz 2×2 que é combinação linear da matriz identidade e das três matrizes de pauli: $Q = aI + b\sigma_1 + c\sigma_2 + d\sigma_3$. Dizemos que Q é um quatérnion real se a, b, c, d forem números reais

$V(\mathcal{H})$, além disso temos a relação

$$\text{Tr}V(\mathcal{H}) = \sum_n V(E_n). \quad (2.4)$$

Portanto, a distribuição de probabilidade deve depender apenas dos autovalores, ou seja, a distribuição de probabilidade (2.1) independe dos autovetores. Esse resultado implica que a matriz U é uniformemente distribuída nas três simetrias. Para encontrarmos a distribuição de probabilidade $P(\{E_n\})$, precisamos multiplicar a distribuição $P(\mathcal{H})$ pelo jacobiano J que liga um elemento de volume infinitesimal $d\mu(\mathcal{H})$ aos elementos de volume $d\mu(U)$ e dE_n

$$d\mu(\mathcal{H}) = Jd\mu(U) \prod_i dE_i \quad (2.5)$$

onde de acordo com [13], o jacobiano depende apenas dos autovalores e assume a seguinte forma

$$J(\{E_n\}) = \prod_{i<j} |E_i - E_j|^\beta. \quad (2.6)$$

Escrevendo a equação (2.1) em termos de (2.4), teremos

$$P(\mathcal{H}) = C \exp \left\{ -\beta \sum_n V(E_n) \right\} \quad (2.7)$$

$$= C \prod_n \exp \{ -\beta V(E_n) \} \quad (2.8)$$

e, multiplicando pelo jacobiano (2.6), iremos finalmente obter a distribuição de probabilidade dos autovalores, teremos

$$P(\{E_n\}) = J(\{E_n\})P(\mathcal{H}) \quad (2.9)$$

$$= \left[\prod_{i<j} |E_i - E_j|^\beta \right] \left[C \prod_n \exp \{ -\beta V(E_n) \} \right] \quad (2.10)$$

$$= C \prod_{i<j} |E_i - E_j|^\beta \prod_k \exp \{ -\beta V(E_k) \} \quad (2.11)$$

$$= C \exp \left[-\beta \left(\sum_{i<j} u(E_i, E_j) + \sum_i V(E_i) \right) \right] \quad (2.12)$$

onde $u(E, E') = -\ln|E - E'|$. Esta distribuição tem a forma da distribuição de Gibbs conhecida da mecânica estatística. Podemos imaginar os autovalores nesta expressão como partículas ao longo de uma linha, localizadas nos pontos E_1, E_2, \dots, E_N . Essas partículas se repelem entre si por um potencial u e se atraem pelo potencial V , que como discutido antes nesta seção é proporcional a \mathcal{H}^2 . Esse sistema é chamado de “gás coulombiano” devido a analogia com o

potencial de duas linhas paralelas carregadas como feito por Dyson em [14]. O coeficiente β faz o papel do inverso da temperatura, aumentando a distância entre as partículas quando se aumenta o valor de β .

2.2.2 Correlações Geométricas

Um dos pilares do ensemble de Wigner-Dyson é a hipótese de que as correlações espectrais são geométricas. Em outras palavras podemos dizer que as correlações espectrais acontecem graças apenas ao jacobiano (2.6) que relaciona elementos de volume da matriz e o espaço de autovalores. Caso haja quaisquer outras fontes de correlação, a função u da equação (2.12) correspondente a uma interação de repulsão entre os autovalores não mantém sua forma logarítmica.

Efetov mostrou em [17] que elétrons dentro de um grão de metal com movimento difusivo geram a mesma função de correlação obtida no ensemble de Wigner-Dyson. No entanto, foi observado que existe uma energia limite para a separação de energia $|E - E'|$ que divide o comportamento da função de correlação em dois comportamentos distintos. Essa energia limite é conhecida como energia de Thouless, que de acordo com as referências [18][19] é uma energia limite que caracteriza diversas quantidades associadas a sensibilidade a condições de contorno em condutores mesoscópicos difusivos. A energia de Thouless é representada por E_c e é dada por $E_c = \hbar D/L^2$ onde D é a constante de difusão e L o tamanho do sistema. Argaman, Imry e Smilansky [20] mostraram que quando a separação de energia $|E - E'| \ll E_c$ teremos a função de correlação seguindo o comportamento logarítmico previsto pelo ensemble de Wigner-Dyson. No caso onde $|E - E'| \gg E_c$, o potencial de interação decai e se torna fracamente atrativo em três dimensões[21].

2.3 Teoria Estatística de Autovalores de Transmissão

A teoria que vamos desenvolver nesta seção nos fornecerá uma descrição completa do transporte quântico à baixas frequências, temperaturas e voltagens em termos dos autovalores de transmissão. Em suma, adaptaremos o formalismo desenvolvido na seção anterior para um formato mais palpável em relação aos problemas estudados neste trabalho. Nesta seção trabalharemos em um sistema onde interações elétron-elétron podem ser negligenciadas. Além disso, vamos lidar com um sistema formado por dois reservatórios de elétrons ligados por guias ideais a uma região de fase coerente onde acontecerão eventos de espalhamento elástico, como descrito na figura (2.1).

2.3.1 Matriz de Espalhamento

A função de onda Ψ de um elétron no guia, à energia de fermi E_F , separa-se em parte longitudinal (como uma partícula livre) e parte transversal (como uma partícula confinada) da seguinte maneira

$$\Psi_n^\pm(x, y, z) = \Phi_n(y, z) \exp(\pm ik_n x) \quad (2.13)$$

onde o índice $n = 1, 2, \dots, N$ se refere aos modos propagantes. A onda incidente na região de espalhamento será descrita por um vetor de coeficientes

$$c^{in} = (a_1^+, a_2^+, \dots, a_N^+, b_1^-, b_2^-, \dots, b_N^-) \quad (2.14)$$

de maneira análoga teremos um vetor para as ondas refletidas e transmitidas dado por

$$c^{out} = (a_1^-, a_2^-, \dots, a_N^-, b_1^+, b_2^+, \dots, b_N^+) \quad (2.15)$$

onde os coeficientes a se referem ao guia da esquerda e os coeficientes b ao guia da direita como na figura (2.1).

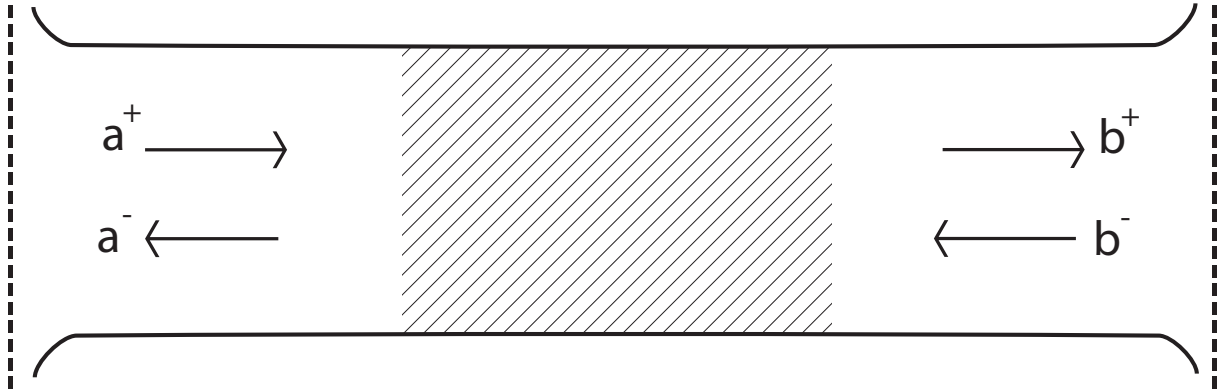


Figura 2.1: Região desordenada conectada a reservatório de elétrons através de guias ideais. A matriz de espalhamento S relaciona as amplitudes a^+, b^- das ondas incidentes às amplitudes a^-, b^+ das ondas transmitidas.

A matriz de espalhamento S será uma matriz $2N \times 2N$ que se relaciona com com estes vetores através da relação

$$c^{out} = S c^{in}$$

e apresenta a seguinte estrutura

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

onde os elementos desta matriz são blocos $N \times N$ que representam reflexões e transmissões de ondas provindas de cada guia.

A conservação da corrente observada neste modelo nos permite inferir que a matriz S é unitária. Por sua vez, a unitariedade da matriz implica que as matrizes hermitianas $tt^\dagger, t't'^\dagger, 1 - rr^\dagger$ e $1 - r'r'^\dagger$ possuem o mesmo conjunto de autovalores dado pelos coeficientes de transmissão T_1, T_2, \dots, T_N . Com essas propriedades em mente podemos escrever a matriz de espalhamento em outra forma para que possamos fazer algumas observações. De acordo com as referências [15][16], podemos escrever a matriz S em termos dos coeficientes de transmissão T_n por meio de uma decomposição polar. Ficaremos então com

$$S = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{1-\tau} & \sqrt{\tau} \\ \sqrt{\tau} & \sqrt{1-\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U' & 0 \\ 0 & V' \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

onde U, V, U' e V' são matrizes $N \times N$ unitárias e $\tau = \text{diag}(T_1, T_2, \dots, T_N)$ para $\beta = 1, 2$ e $\tau = \text{diag}(T_1 I, T_2 I, \dots, T_N I)$ para $\beta = 4$.

Caso estejamos lidando com ensemble ortogonal ($\beta = 1$), estaremos trabalhando com simetria de reversão temporal e de rotação de spin, teremos a matriz S unitária e simétrica: $S = S^T, U' = U^T$ e $V' = V^T$. Caso estejamos no ensemble unitário ($\beta = 2$), a única restrição imposta sobre S é que S seja unitária. Finalmente para o ensemble simplético ($\beta = 4$), S será unitária e autodual: $S = S^R, U' = U^R$ e $V' = V^R$.

2.3.2 Correlações Geométricas para Autovalores de Transmissão

Seguindo com a discussão, iremos estudar a hipótese de correlação geométrica na representação de autovalores de transmissão. Na seção anterior, vimos que o termo geométrico se refere à hipótese da correlação espectral ser devido apenas ao jacobiano (2.6) que, de acordo com (2.5), relaciona elementos de volume e o espaço de autovalores de energia. Teremos então que utilizar um outro elemento de volume de onde possamos extrair o jacobiano que o relacionará desta vez ao espaço de autovalores de transmissão. De acordo com [22][23], podemos obter um jacobiano que relaciona elementos de volume da decomposição polar (2.16) com os autovalores de transmissão na forma

$$d\mu(S) = J \prod_{\alpha} d\mu(U_{\alpha}) \prod_i dT_i, \quad (2.17)$$

onde o jacobiano depende apenas dos autovalores de transmissão e o conjunto $\{U_{\alpha}\}$ é o conjunto de matrizes unitárias em (2.16): $\{U_{\alpha}\} = \{U, V\}$ se $\beta = 1$ ou $\beta = 4$; $\{U_{\alpha}\} = \{U, U', V, V'\}$ se $\beta = 2$ O jacobiano por sua vez será dado por

$$J(\{T_n\}) = \prod_{i < j} |T_i - T_j|^{\beta} \prod_k T_k^{-1+\beta/2} \quad (2.18)$$

e a distribuição de Wigner-Dyson (2.1) será dada por

$$P(S) = C \exp[-\beta \text{Tr} f(tt^\dagger)]. \quad (2.19)$$

Como neste caso teremos $\text{Tr} f(tt^\dagger) = \sum_n f(T_n)$, podemos ainda reescrever a equação (2.19) como

$$P(S) = C \prod_k \exp[-\beta f(T_k)] \quad (2.20)$$

Com o jacobiano e a distribuição de probabilidade escritos em termos dos autovalores de transmissão, podemos aplicar o mesmo raciocínio que utilizamos para o caso dos autovalores de energia. Multiplicando o jacobiano (2.18) por (2.20) iremos obter

$$P(\{T_n\}) = C \prod_{i<j} |T_i - T_j|^\beta \prod_k T_k^{-1+\beta/2} \exp[-\beta f(T_k)] \quad (2.21)$$

seguindo o roteiro das referências [24][25], vamos fazer a troca de variáveis

$$T_n = \frac{1}{1 + \lambda_n}. \quad (2.22)$$

Como os elementos T_n variam de 0 à 1, a variável λ_n deve variar de 0 à ∞ com essa substituição finalmente chegamos à expressão em uma forma mais palpável

$$P(\{\lambda_n\}) = C \exp \left[-\beta \left(\sum_{i<j} u(\lambda_i, \lambda_j) + \sum_i V(\lambda_i) \right) \right] \quad (2.23)$$

onde

$$u(\lambda, \lambda') = -\ln |\lambda - \lambda'| \quad (2.24)$$

$$V(\lambda) = [N - \frac{1}{2}(1 - 2/\beta)] \ln(1 + \lambda) + f(1 + \lambda)^{-1} \quad (2.25)$$

Podemos então observar que a equação da distribuição de probabilidade na representação (2.23) tem a mesma forma da equação (2.12), ou seja, tem a mesma forma da distribuição de Gibbs, com exceção de que os λ_i podem apenas tomar valores positivos devido à restrição na equação (2.22). Todas as informações microscópicas a respeito do condutor (tamanho e grau de desordem) estão contidos no potencial de confinamento $V(\lambda)$. A hipótese das correlações geométricas não especifica esta função. Como mostrado em [24] a distribuição de probabilidade (2.23) maximiza a entropia do ensemble, sujeito a restrição de uma dada densidade $\rho(\lambda)$ média em termo dos λ_i . A função $V(\lambda)$ é o multiplicador de Lagrange para esta restrição. Analogamente o ensemble de Wigner-Dyson também pode ser interpretado como uma densidade média dos estados.

Antes de darmos continuidade ao estudo de TMA, é importante fazer um comentário a respeito da validade da hipótese de correlações geométricas. Como mostrado em [26][27], pode-se afirmar que a verdadeira repulsão entre autovalores de transmissão não é logarítmica. Isso se deve ao fato de existir correlação entre os autovalores de transmissão além da correlação induzida pelo jacobiano, contrariando a hipótese de correlações geométricas. No entanto, existe um limite onde a repulsão entre os autovalores de transmissão assumem um comportamento logarítmico. Para valores de $T_n \approx 1$ pode-se se dizer que as correlações entre os autovalores são geométricos.

2.4 Ponto Quântico

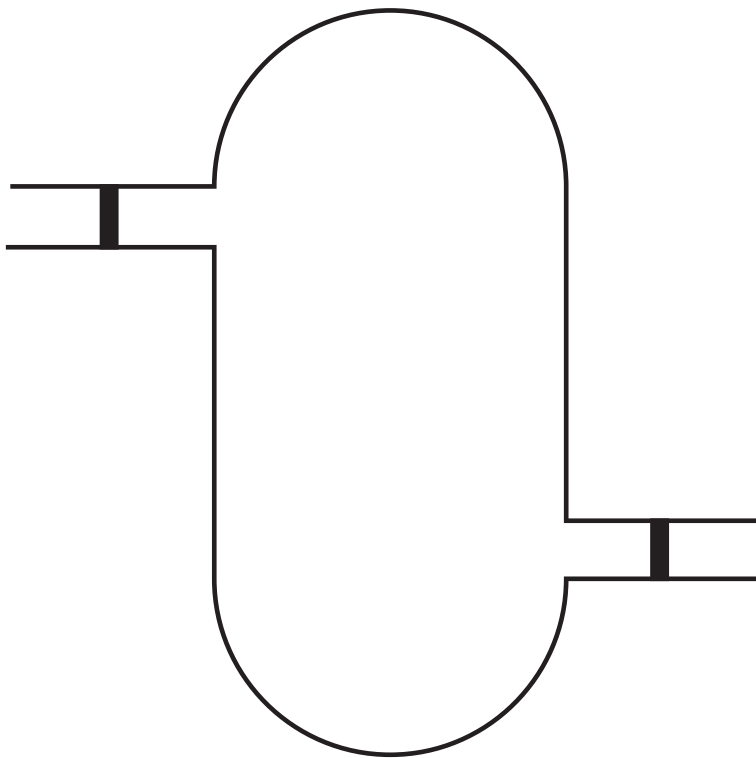


Figura 2.2: Cavidade caótica (ponto quântico) acoplado a dois reservatórios via guias estreitos contendo barreiras de potencial. A distribuição da matriz de espalhamento é dado pelo núcleo de Poisson devido às barreiras. Caso removamos as barreiras, as matrizes de espalhamento serão dadas pelo ensemble circular.

Pontos quânticos são cavidades semicondutoras que têm um diâmetro que geralmente variam entre 2 e 50 nanômetros. O hamiltoniano neste sistema é distribuído de acordo com o ensemble de Wigner-Dyson. Para a estatística de Wigner-Dyson, é indiferente se estivermos tratando de movimento balístico ou movimento difusivo dentro da cavidade. Como discutido na subseção de correlações geométricas, a estatística de Wigner-Dyson representa bem o sistema necessitando apenas que seja aplicado em escalas de energias pequenas em comparação

com a energia de Thouless E_c . Características microscópicas do sistema são implementadas no sistema através do potencial V que, por si só, não gera correlação entre os autovalores em (2.12). Portanto, estamos lidando com um formalismo geral no âmbito de pequenas separações de energia em comparação com a energia de Thouless.

As propriedades de transporte de um ponto quântico podem ser medidas acoplando dois reservatórios de elétrons e causando um desequilíbrio entre eles. Apesar do caráter universal apresentado pelo movimento dentro da cavidade, esta universalidade não se reproduz no sistema como um todo, a escolha do tipo de acoplamento entre a cavidade e os reservatório influencia na maneira como se deve estudar o problema. Caso o acoplamento seja feito através de contatos balísticos pontuais o sistema é representado pelo ensemble circular, caso o acoplamento seja feito através de barreiras de tunelamento, o sistema é representado pelo núcleo de Poisson. Iremos descrever os dois métodos e depois iremos fazer a conexão deles com o ensemble gaussiano e o formalismo de Mahaux-Weidenmüller.

2.4.1 Ensemble Circular de Matrizes de Espalhamento

Blümel e Smilansky [28] notaram que as correlações das mudanças de fase ϕ_n para espalhamento caótico são bem descritas pela distribuição do ensemble circular

$$P(\{\phi_n\}) = \frac{1}{V} 2^{-M(\beta M + 2 - \beta)/2} \prod_{n < m} |\exp(i\phi_n) - \exp(i\phi_m)|^\beta \quad (2.26)$$

$$P(\{\phi_n\}) \propto \prod_{n < m} |\exp(i\phi_n) - \exp(i\phi_m)|^\beta \quad (2.27)$$

onde V é uma constante de normalização. Desejamos então encontrar uma distribuição de probabilidade para a estatística de autovalores de transmissão $P(\{T_n\})$. Levando em contas as propriedades do ensemble circular, podemos dizer que a medida $d\mu(S)$ é invariante sob multiplicação[29], ou seja

$$d\mu(S) = d\mu(USV) \quad (2.28)$$

onde U e V são matrizes unitárias e satisfazem as restrições impostas sobre S em USV . De acordo com Dyson [30], a medida $d\mu(S)$ na representação de espalhamento toma a forma

$$d\mu(S) = \prod_{n < m} |\exp(i\phi_n) - \exp(i\phi_m)|^\beta d\mu(U) \prod_i d\phi_i \quad (2.29)$$

onde U é a matriz de autovetores que diagonaliza a matriz de espalhamento. Podemos encontrar a medida invariante $d\mu(S)$ na representação de autovetores de transmissão analisando a equação (2.17). Vamos então reescrever a equação (2.17) de uma maneira mais palpável, escrevendo o

jacobiano por extenso

$$\begin{aligned}
d\mu(S) &= J \prod_{\alpha} d\mu(U_{\alpha}) \prod_i dT_i \\
d\mu(S) &= \prod_{n < m} |T_n - T_m|^{\beta} \prod_k T_k^{-1+\beta/2} \prod_{\alpha} d\mu(U_{\alpha}) \prod_i dT_i \quad (2.30)
\end{aligned}$$

A decomposição polar (2.16) implica que os dois guias ligados à cavidade devem ter o mesmo número de modos transversos. Supondo que os guias têm quantidade de modos transversos diferentes, deveremos ter as matrizes t e t' retangulares e não mais quadradas. Como consequência disto, os produtos de matrizes tt^{\dagger} e $t't'^{\dagger}$ devem ter um conjunto de $\min(N_1, N_2)$ autovalores de transmissão não nulos. Computando estes valores na equação (2.30), implica em um fator extra $\prod_k T_k^{(1/2)\beta|N_2-N_1|}$. Devido a esta mudança, a distribuição de probabilidade deverá obedecer a relação

$$P(\{T_n\}) \propto \prod_{n < m} |T_n - T_m|^{\beta} \prod_k \left(T_k^{-1+\beta/2}\right) \left(T_k^{(1/2)\beta|N_2-N_1|}\right) \quad (2.31)$$

$$P(\{T_n\}) \propto \prod_{n < m} |T_n - T_m|^{\beta} \prod_k T_k^{(1/2)\beta(|N_2-N_1|+1-2/\beta)} \quad (2.32)$$

2.5 Núcleo de Poisson

Ao lidar com cavidades caóticas, é natural utilizar um ensemble que seja o mais aleatório possível, eis a aplicabilidade do ensemble circular para estes problemas. Porém, podemos definir aleatoriedade de um ensemble através de uma relação de distribuição de probabilidade definida por

$$S = - \int d\mu(S) P(S) \ln P(S) \quad (2.33)$$

onde o ensemble mais aleatório é o ensemble que maximiza S obedecendo as restrições que lhe são impostas. De acordo com [31][32], além das restrições usuais, existe o seguinte conjunto de restrições

$$\int d\mu(S) S^p P(S) = \overline{S^p}, \quad p = 1, 2, \dots \quad (2.34)$$

onde \overline{S} é uma matriz tal que $\overline{S S^{\dagger}} \leq 1$. A distribuição mais aleatória sujeita a estas restrições é então dada por

$$P(S) \propto |\text{Det}(1 - \overline{S^{\dagger}} S)|^{-\beta(N_1+N_2-1+2/\beta)} \quad (2.35)$$

O ensemble circular tem para todas as matrizes de espalhamento S uma probabilidade de ser encontrada constante, ou seja, $P(S) = \text{constante}$. Computando esta informação na equação (2.35), podemos afirmar que para o ensemble unitário $\overline{S} = 0$. A distribuição (2.35) é conhecida como núcleo de Poisson[33].

O ensemble circular é o ensemble mais apropriado para lidar com cavidades caóticas com contatos balísticos. No entanto, quando se começa a introduzir barreiras nos contatos que ligam os guias com a cavidade, a distribuição de probabilidade passa a ser representada mais fielmente pela equação (2.35). Neste caso a matriz de espalhamento média é dada por

$$\bar{S} = \begin{pmatrix} r_1 & 0 \\ 0 & r_2 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

onde r_1 e r_2 são as matrizes de reflexão das barreiras de elétrons incidentes dos reservatórios e os autovalores de $1 - \bar{S}\bar{S}^\dagger$ são as probabilidades de tunelamento através dos guias.

2.6 Ensemble Gaussiano

O ensemble gaussiano de hamiltonianos começou a ser usado no âmbito de espalhamento em um ponto quântico na década de 1960 sendo inicialmente aplicado em física nuclear. Neste formalismo as hamiltonianas da cavidade se conectam aos guias através de barreiras à energia de fermi E_F . A matriz de espalhamento associada ao hamiltoniano H é dada por

$$S = I - 2i\pi W^\dagger (E_F - \mathcal{H}_{ri} + i\pi WW^\dagger)^{-1} W \quad (2.37)$$

$$= \frac{1 + i\pi W^\dagger (\mathcal{H} - E_F)^{-1} W}{1 - i\pi W^\dagger (\mathcal{H} - E_F)^{-1} W} \quad (2.38)$$

A distribuição da hamiltoniana da cavidade caótica \mathcal{H} é dada de acordo com a distribuição do ensemble gaussiano em (2.1) por

$$P(\mathcal{H}) = \frac{1}{V} \exp \left[-\frac{1}{4} \beta M \lambda^{-2} \text{Tr } \mathcal{H}^2 \right] \quad (2.39)$$

onde V é a constante de normalização e λ é um coeficiente arbitrário que determina a densidade dos estados à energia de fermi E_F . A distribuição de probabilidade $P(\mathcal{H})$ é invariante sob transformação de similaridade $\mathcal{H} \rightarrow U\mathcal{H}U^\dagger$ para $\beta = 1, 2, 4$. A matriz de espalhamento média \bar{S} pode ser calculada no limite $M \rightarrow \infty$ com número de modos propagantes N fixo, à energia de fermi E_F e com espaçamento médio entre níveis Δ fixo, neste limite \bar{S} é dado por

$$\bar{S} = \frac{1 - \pi W^\dagger W / \lambda}{1 + \pi W^\dagger W / \lambda} \quad (2.40)$$

Acoplar autoestados da cavidade caótica a canais de espalhamento nos guias gera um número grande de constantes de acoplamento, o que torna o formalismo do ensemble gaussiano mais difícil de lidar do que os apresentados anteriormente.

Como este trabalho utiliza bastante o ensemble gaussiano na parte das simulações, nas

seções seguintes o formalismo gaussiano será cuidadosamente desenvolvido e depois será mostrada a equivalência entre os diversos formalismos.

2.6.1 O Modelo Estocástico de VWZ

Para a nossa dedução da matriz de espalhamento iremos nos utilizar do modelo de Verbaarschot, Weidenmüller e Zirnbauer (VWZ)[34] e faremos o desenvolvimento da dedução seguindo [35].

O modelo de VWZ, inicialmente desenvolvido para aplicação em física nuclear, se mostra útil para áreas da física quântica estocástica devido a sua base estatística e em teoria de matrizes aleatórias (TMA) para sistemas abertos, o que permite que seja tomado o limite de um número arbitrariamente pequeno de canais. Nosso objetivo nesta dedução será definir o caso geral do modelo como definido no artigo original, aplicá-lo para o caso de um guia semi-infinito e depois generalizar, obtendo então a matriz de espalhamento de Mahaux-Weidenmüller geral.

Em um fenômeno de espalhamento geral, assume-se que os eventos de espalhamento acontecem em uma região compacta do espaço de configurações, o qual é genericamente chamado de “região de confinamento”. Os subprodutos dessa interação na região compacta são denominados de “modos propagantes”, e são caracterizados por um conjunto enumerável de números quânticos. Esses números quânticos podem indexar os graus de liberdade internos de cada estado assintoticamente livre.

Consideremos, primeiramente, o modelo especificado na figura 2.1, o qual consiste de modos propagantes ao longo de um guia semi-infinito com largura d . Os modos propagantes do guia são quantizados ao longo da direção transversal.

Vamos assumir um guia que carregue M canais abertos e independentes, cada um em uma energia E específica. Na região assintótica, existirá, portanto, um conjunto de estados de espalhamento denotados por $|n, E\rangle$; $n = 1, 2, \dots, M$ normalizados segundo a prescrição $\langle n, E_1 | m, E_2 \rangle = \delta_{mn} \delta(E_1 - E_2)$. Na região compacta de interação, por outro lado, assume-se a existência de um conjunto discreto de N_c estados ortogonais $|\mu\rangle$; $\mu = 1, 2, \dots, N_c$. Podemos então escrever o hamiltoniano \mathcal{H} como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{\mu\nu} |\mu\rangle (H_{ri})_{\mu\nu} \langle\nu| + \sum_n \int dE |n, E\rangle E \langle n, E| \\ + \sum_{\mu,\nu} \left(|\mu\rangle \int dE W_{\mu\nu} \langle n, E| + \text{h.c.} \right) \end{aligned} \quad (2.41)$$

O primeiro termo do lado direito da equação (2.41) denota a representação em uma base arbitrária do hamiltoniano \mathcal{H}_{ri} da região compacta de interação, a qual contém $N_c \gg 1$ autoesta-

dos de \mathcal{H}_{ri} .

O segundo termo do lado direito da equação (2.41) é a parte referente aos canais da hamiltoniana. Este termo contém os estados da região de canais abertos. O modelo VWZ baseia-se na hipótese de aleatoriedade da matriz H_{ri} que representa o operador \mathcal{H}_{ri} , incorporando com isso as propriedades básicas de TMA para matrizes $N_c \times N_c$ de ordem alta. Por outro lado, de acordo com o mesmo modelo, o segundo termo é determinístico e corresponde aos estados assintóticos. Os canais de entrada se acoplam com os autoestados de \mathcal{H}_{ri} , criando canais de espalhamento assintoticamente livres. O terceiro termo corresponde ao acoplamento.

O modelo foi simplificado ignorando todos os termos que acoplavam canais diferentes entre si e anulando as transições de fase elásticas. Nesse caso, a parcela do hamiltoniano que contém os canais de reação está corretamente representado como uma matriz diagonal.

Podemos então reescrever a equação (2.41) como

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mu\nu} |\mu\rangle (H_{ri})_{\mu\nu} \langle\nu| + \sum_n \int dE |n, E\rangle E \langle n, E| \quad (2.42)$$

$$\mathcal{V} = \sum_{\mu, \nu} \left(|\mu\rangle \int dE W_{\mu\nu} \langle n, E| + \text{h.c.} \right) \quad (2.43)$$

O conjunto de estados de $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ pertence a um espaço de Hilbert H de dimensão infinita. Esse conjunto pode ser visto como um espaço de estados, dotado de um certo produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, carregando, de acordo com o teorema da representação de Riesz, um único operador contínuo \mathcal{H} tal que $\mathcal{H} : H \rightarrow H$ com a seguinte propriedade

$$\langle \mathcal{H}\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)} \rangle = \langle \Phi^{(1)}, \mathcal{H}^\dagger \Phi^{(2)} \rangle, \forall \Phi^{(1)}, \Phi^{(2)} \in H \quad (2.44)$$

O operador \mathcal{H}^\dagger é chamado de operador adjunto e é uma generalização do conjugado complexo. Vamos admitir que o hamiltoniano com interação seja hermitiano e obter os estados, $\Phi^{(1)}$ e $\Phi^{(2)}$, e as correspondentes restrições sobre tais estados diante da hermiticidade. Apresentamos uma maneira de conectar as amplitudes dos canais abertos por meio de uma matriz de espalhamento S que incorpora os vínculos sobre o acoplamento.

Uma vez fixado o hamiltoniano e suas propriedades, podemos nos focar no exemplo com um guia semi-infinito para obter a matriz S de espalhamento correspondente. Para isso, seguiremos a referência [35].

2.6.2 Dedução da Matriz de Espalhamento de Mahaux-Weidenmüller

Vamos agora resolver o problema da figura (2.3) utilizando a equação de Schrödinger bidimensional, através da qual iremos obter os canais de espalhamento dentro dos guias.

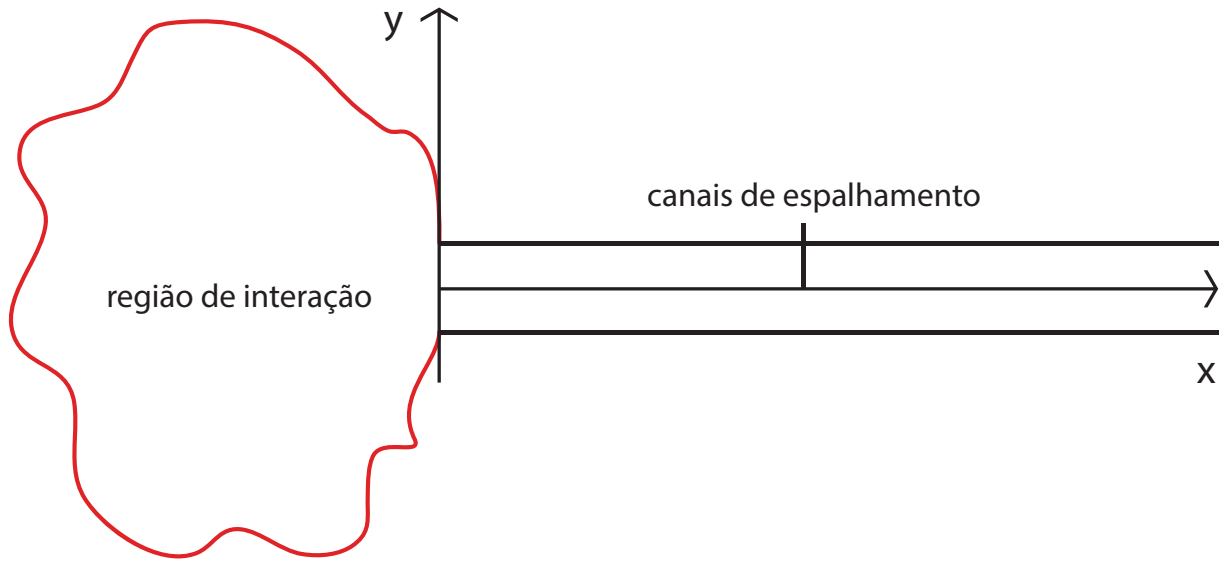


Figura 2.3: Espalhamento de modos propagantes em um guia semi-infinito causado na região de interação

$$-\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad (2.45)$$

Onde E é a energia total do sistema e pode ser dividida em duas partes como $E = E_a + E_b$, e podemos definir E_a como a energia da parte em x e E_b como a energia da parte em y .

Podemos observar pela figura que podemos dividir nosso problema em duas partes: um problema de partícula livre no eixo x e um problema de poço infinito de $-d/2$ à $d/2$ em y . Dividindo a função $\Psi(x, y)$ teremos

$$\Psi(x, y) = \psi(x)\phi(y) \quad (2.46)$$

onde resolveremos cada parte separadamente

Como a função de onda $\psi(x)$ se trata de uma partícula livre, a equação de Schrödinger se escreve

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E_a \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE_a}{\hbar^2} \psi$$

para energias positivas teremos soluções da forma

$$e^{\pm ik_a x}, \quad E_a = \frac{k_a^2 \hbar^2}{2m}$$

portanto teremos uma forma para a função de onda estacionária dada por

$$\psi(x) = C[Ae^{ik_ax} + Be^{-ik_ax}] \quad (2.47)$$

onde C é uma constante arbitrária que depende das condições de contorno tomadas para determinado problema.

Para a parte referente ao eixo y nós temos um problema análogo ao poço infinito, a equação de Schrödinger se escreve portanto

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = -k_b^2 \phi \quad (2.48)$$

onde a solução geral para esse problema é dado por

$$\phi(y) = A' \text{sen} \left[k_b \left(\frac{d}{2} + y \right) \right] + B' \text{cos} \left[k_b \left(\frac{d}{2} + y \right) \right] \quad (2.49)$$

porém neste caso teremos as condições de contorno $\phi(y = \pm d/2) = 0$ devido às paredes do guia, portanto

$$\begin{aligned} \phi \left(-\frac{d}{2} \right) &= A' \text{sen}(0) + B' \text{cos}(0) = 0, & B' &= 0 \\ \phi \left(\frac{d}{2} \right) &= A' \text{sen}(k_b d) = 0, & k_b &= \frac{n\pi}{d} \end{aligned}$$

podemos substituir esses resultados na equação (2.49) e depois encontrar o valor de A' que normaliza a função para obter

$$\phi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \text{sen} \left[\left(\frac{n\pi}{d} \right) \left(y + \frac{d}{2} \right) \right]; \quad n = 1, 2, \dots, M$$

As soluções podem ser escritas como um produto $\Psi_n(x, y) = \psi(x)\phi_n(y)$, fazendo isso encontramos a solução geral

$$\Psi_n(x, y) = [Ae^{ik_ax} + Be^{-ik_ax}] \sqrt{\frac{2}{d}} \text{sen} \left[\left(\frac{n\pi}{d} \right) \left(y + \frac{d}{2} \right) \right] \quad (2.50)$$

Como neste caso temos n funções $\Psi_n(x, y)$ que são ortogonais entre si, podemos escrever cada um destas funções Ψ_n como elementos de um “vetor solução” M -dimensional definido como

$$\Psi = (\Psi_1(x, y), \Psi_2(x, y), \dots, \Psi_M(x, y))^T$$

Porém, a relação $E_a = E - E_b$ implica que $k_a^2 = k^2 - k_b^2$ ou seja

$$k_a = \left[k^2 - \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.51)$$

onde o vetor de onda para a onda propagante k_a deve ser real. Podemos então afirmar que $\frac{M\pi}{d}$ deve ser menor ou igual a k . Quaisquer outros canais que tornem k_a complexo são evanescentes e não contribuem para o transporte quântico.

Exemplo: Podemos extrair a matriz \mathcal{S} do sistema para o caso da cavidade caótica (região de interação) estar desacoplada dos guias. Para isso, usamos a seguinte condição de contorno

$$\left. \frac{\partial \psi_n}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad (2.52)$$

representando a ausência de fluxo de probabilidade através da interface em $x = 0$. Desta condição de contorno teremos

$$Aik_a - Bik_a = 0 \quad (2.53)$$

que implica que $A = B$. A condição de contorno que impomos ao problema nos traz uma relação de reflexão. Os canais incidentes e transmitidos são os mesmos, portanto

$$\mathbf{A} = (A_1, A_2, \dots, A_M)^T \Leftrightarrow \mathbf{B} = (B_1, B_2, \dots, B_M)^T \quad (2.54)$$

$$B_n = \delta_{nm} A_m \quad (2.55)$$

então, uma vez imposto a condição de contorno (2.52), teremos as equações (2.54) e (2.55) que implicam que a matriz de espalhamento é uma matriz identidade.

A interação pode ser estabelecida considerando condições de contorno mais gerais que ampliam o espaço de Hilbert dos estados do sistema. Consideremos então N_c estados ortogonais da cavidade caótica e agrupemos todos eles como um vetor de estados escrito como

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{N_c})^T \quad (2.56)$$

O vetor \mathbf{u} pode ser obtido diretamente da matriz aleatória \mathcal{H}_{ri} da cavidade. Os autoestados do hamiltoniano, que descreve a interação dos estados ressonantes da cavidade com os canais propagantes no guia, podem ser escritos como

$$\Phi = (\mathbf{u}, \Psi)^T \quad (2.57)$$

e pertencem ao espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+, \mathbb{C}^M) \oplus \mathbb{C}^N$. Vamos definir o operador hamiltoniano atuando nesse espaço de Hilbert como

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{H}}_{ri} & \hat{\mathcal{W}}^{(1)} \\ \hat{\mathcal{W}}^{(2)} & \hat{\mathcal{H}}_c \end{pmatrix}$$

O operador $\hat{\mathcal{H}}_{ri}$ atua na região de interação e é representado pela matriz hamiltoniana $N_c \times N_c$, cujos autoestados formam as ressonâncias do sistema aberto. Os operadores $\hat{\mathcal{W}}^{(1)}$ e $\hat{\mathcal{W}}^{(2)}$ descrevem o acoplamento dos canais propagantes com as ressonâncias. O operador energia cinética do guia pode ser representado por

$$\hat{\mathcal{H}}_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \text{diag} (\partial_x^2 + \partial_y^2, \partial_x^2 + \partial_y^2, \dots, \partial_x^2 + \partial_y^2). \quad (2.58)$$

Admitindo que o acoplamento é local, podemos escolher $\hat{\mathcal{W}}^{(2)} = 0$ de maneira que teremos

$$\hat{\mathcal{W}}^{(1)}\Psi = \int_{-d/2}^{d/2} dy \mathcal{W}(y)\Psi(0, y) = \hat{\omega}\psi(0) \quad (2.59)$$

onde esta forma de $\mathcal{W}^{(1)}$ mantém a hermiticidade de $\hat{\mathcal{H}}$. Teremos neste caso $\psi(0) = (\psi_1(0), \psi_2(0), \dots, \psi_M(0))$ e $\hat{\omega}$ terá entradas $\omega_{\mu n} = \int_{-d/2}^{d/2} dy \mathcal{W}_{\mu n} \phi(y)$, com $\mu = 1, 2, \dots, N_c$ e $n = 1, 2, \dots, M$. Desta forma, a atuação do operador hamiltoniano nos estados do espaço de Hilbert estendido pode ser descrita como

$$\mathcal{H}\Phi = (\mathcal{H}_{ri}\mathbf{u} + \hat{\omega}\psi(0), \mathcal{H}_c\Psi)^T \quad (2.60)$$

Definindo o produto escalar nesse espaço de Hilbert como

$$\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = u_1^\dagger u_2 + \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle, \quad \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{-d/2}^{d/2} dy \int_0^\infty dx \Psi_1^\dagger \Psi_2, \quad (2.61)$$

onde consideramos que a propagação ocorre no semi-eixo x positivo.

Para o caso geral, o operador hamiltoniano \mathcal{H} não é autoadjunto. Porém neste caso iremos impor como uma das condições que ele o seja. Vamos então impor condições de contorno e encontrar um subconjunto de estados para os quais \mathcal{H} satisfaça o requerimento de hermiticidade. Considerando o produto interno definido anteriormente, temos

$$\langle \mathcal{H}\Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \left(\mathbf{u}_1^\dagger \mathcal{H}_{ri}^\dagger + \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger \right) \mathbf{u}_2 + \langle \mathcal{H}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle, \quad (2.62)$$

$$\langle \Phi_1 | \mathcal{H}\Phi_2 \rangle = \mathbf{u}_1^\dagger (\mathcal{H}_{ri} \mathbf{u}_2 + \hat{\omega} \psi_2(0)) + \langle \Psi_1 | \mathcal{H}\Psi_2 \rangle \quad (2.63)$$

Subtraindo as equações (2.62) e (2.63), teremos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}\Phi_1 | \Phi_2 \rangle - \langle \Phi_1 | \mathcal{H}\Phi_2 \rangle &= \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1^\dagger \hat{\omega} \psi_2(0) \\ &+ \langle \mathcal{H}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle - \langle \Psi_1 | \mathcal{H}\Psi_2 \rangle \end{aligned} \quad (2.64)$$

onde os valores em braket são dados por

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{H}\Psi_1 | \Psi_2 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \frac{\partial^2 \psi_1^\dagger}{\partial x^2} \psi_2 \\ &= +\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} \psi_2(0)\end{aligned}\quad (2.65)$$

analogamente teremos

$$\langle \Psi_1 | \mathcal{H}\Psi_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} \psi_1(0) \quad (2.66)$$

teremos, portanto, como resultado da subtração

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{H}\Phi_1 | \Phi_2 \rangle - \langle \Phi_1 | \mathcal{H}\Phi_2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_1^\dagger \right) \Big|_{x=0} \psi_2(0) - \mathbf{u}_1^\dagger \hat{\omega} \psi_2(0) \\ &\quad + \psi_1^\dagger(0) \hat{\omega}^\dagger \mathbf{u}_2 - \frac{\hbar^2}{2m} \psi_1^\dagger(0) \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_2 \right) \Big|_{x=0}\end{aligned}\quad (2.67)$$

Podemos observar da equação (2.67) que o operador \mathcal{H} não é, em geral, autoadjunto. Uma condição aceitável que irá tornar o operador \mathcal{H} autoadjunto é obrigar que as derivadas parciais em x sigam a seguinte regra

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \Big|_{x=0} = \hat{\omega}^\dagger \mathbf{u} \quad (2.68)$$

Queremos acoplar os canais propagantes em $x = 0$, o que pode ser feito notando também que o vetor \mathbf{u} está relacionado ao vetor de interação, nesse ponto, mediante a equação de Schrödinger do sistema

$$\mathcal{H}\Phi = (\mathcal{H}_{ri}\mathbf{u} + \hat{\omega}\psi(0), \mathcal{H}_c\Psi)^T = E(\mathbf{u}, \Psi)^T, \quad (2.69)$$

onde a primeira componente da igualdade anterior estabelece que

$$\mathcal{H}_{ri}\mathbf{u} + \hat{\omega}\psi(0) = E\mathbf{u} \quad (2.70)$$

indicando conservação de energia no ponto de contato. Dessa forma, podemos escrever uma segunda relação entre os canais propagantes e as ressonâncias

$$\mathbf{u} = (E - \mathcal{H}_{in})^{-1} \hat{\omega}\psi(0) \quad (2.71)$$

Substituindo a equação (2.71) na equação (2.68) e usando a equação (2.47) com $C = [2\pi\hbar^2 \left(\frac{k_{ri}}{m}\right)]^{-1/2}$, obtemos

$$\hat{\omega}^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}\hat{\omega} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2} K^{-1/2}(A + B) = -i\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2} K^{1/2}(A - B), \quad (2.72)$$

onde $K \equiv \text{diag}(k_1, k_2, \dots, k_M)$, e os vetores \mathbf{A} e \mathbf{B} tem como entradas as amplitudes das autofunções de \mathcal{H} . Podemos reescrever a equação (2.72) de uma maneira mais agradável através da matriz de espalhamento S e da relação $B = SA$

$$\hat{\omega}^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}\hat{\omega} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2} K^{-1/2}(1 + S)A = -i\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2} K^{1/2}(1 - S)A \quad (2.73)$$

$$\hat{\omega}^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}\hat{\omega}K^{-1}(1 + S) = -i\frac{\hbar^2}{2m}(1 - S) \quad (2.74)$$

$$i\frac{2m}{\hbar^2}\hat{\omega}^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}\hat{\omega}K^{-1}(1 + S) = (1 - S) \quad (2.75)$$

Podemos agora definir

$$W = \sqrt{2m/\pi\hbar^2}\hat{\omega}\text{diag} \left(k_1^{-1/2}, k_2^{-1/2}, \dots, k_M^{-1/2}\right) \quad (2.76)$$

$$F = \pi W^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}W \quad (2.77)$$

Substituindo as equações (2.76) e (2.77) na equação (2.75) ficamos com

$$iF(I + S) = (I - S) \quad (2.78)$$

$$S = (I - iF)(I + iF)^{-1} \quad (2.79)$$

I é a matriz identidade de ordem M . A matriz S pode ser reescrita conforme a referência [34]:

$$\begin{aligned} S &= (I - iF)(I + iF)^{-1} = I - 2iF(I + iF)^{-1} \\ &= I - 2i(\pi W^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}W) \sum_{l=0}^{\infty} (i\pi W^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}W)^l \\ &= I - 2 \sum_{l=0}^{\infty} (i\pi W^\dagger(E - \mathcal{H}_{ri})^{-1}W)^{l+1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= I - 2i\pi W^\dagger \left[\sum_{l=0}^{\infty} (i\pi W^\dagger (E - \mathcal{H}_{ri})^{-1} W)^l \right] (E - \mathcal{H}_{ri})^{-1} W \\
&= I - 2i\pi W^\dagger (I + i\pi W^\dagger (E - \mathcal{H}_{ri})^{-1} W)^{-1} (E - \mathcal{H}_{ri})^{-1} W \\
S &= I - 2i\pi W^\dagger (E - \mathcal{H}_{ri} + i\pi W W^\dagger)^{-1} W
\end{aligned} \tag{2.80}$$

Ou ainda, em termos de um hamiltoniano efetivo não hermitiano $\mathcal{H}_{ef} = \mathcal{H}_{ri} - i\Gamma$, onde $\Gamma = \pi W W^\dagger$ caracteriza o decaimento das ressonâncias.

$$S = I - 2i\pi W^\dagger \frac{1}{E - \mathcal{H}_{ef}} W, \tag{2.81}$$

Essa é a fórmula de Mahaux-Weidenmüller. As energias dos estados ressonantes são pólos simples desta fórmula.

O passo seguinte é generalizar a equação (2.81) com o objetivo de incorporar múltiplos terminais. Iremos fazer isto seguindo os mesmos argumentos utilizados nesta seção para o caso de um terminal. Iremos identificar as amplitudes da mesma maneira que foi feito anteriormente para cada terminal, adicionando um índice superior que identifica o terminal referente a aquela amplitude. Neste exemplo teremos M terminais, portanto os vetores amplitude serão escritos como

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} &= \left(A_1^{(1)}, A_2^{(1)}, \dots, A_{N_1}^{(1)}, \dots, A_1^{(M)}, A_2^{(M)}, \dots, A_{N_M}^{(M)} \right) \\
\mathbf{B} &= \left(B_1^{(1)}, B_2^{(1)}, \dots, B_{N_1}^{(1)}, \dots, B_1^{(M)}, B_2^{(M)}, \dots, B_{N_M}^{(M)} \right)
\end{aligned} \tag{2.82}$$

A matriz K , generalizada para M terminais, deve então ser definida como

$$\mathbf{K} = \text{diag}(k_1^{(1)}, k_2^{(1)}, \dots, k_{N_1}^{(1)}, \dots, k_1^{(M)}, k_2^{(M)}, \dots, k_{N_M}^{(M)}) \tag{2.83}$$

e a função de onda generalizada $\Psi(x)$ como

$$\Psi(x) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 \mathbf{K}} \right)^{1/2} [\mathbf{A} \exp(-i\mathbf{K}x) + \mathbf{B} \exp(i\mathbf{K}x)] \tag{2.84}$$

onde Ψ é um vetor cujas entradas são as funções de onda de cada modo propagante. Refazendo os mesmos passos que realizamos para obtenção equação (2.81), utilizando os vetores com M terminais, iremos obter a mesma fórmula de Mahaux-Weidenmüller anterior com a matriz de acoplamento W modificada para

$$\mathbf{W} = \hat{\omega} \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2 K} \right)^{1/2},$$

onde $\hat{\omega} \equiv (\hat{\omega}_1, \hat{\omega}_2, \dots, \hat{\omega}_M)$ caracteriza o acoplamento, incluindo todos os terminais. A matriz S

correspondente pode ser decomposta em blocos de “reflexão”, r , e em blocos de “transmissão”, t , que ligam os M terminais entre si de modo que podemos escrevê-la como

$$S = \begin{pmatrix} r_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1M} \\ t_{21} & r_{22} & \cdots & t_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{M1} & t_{M2} & \cdots & r_{MM} \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

Os blocos da $r_{l,l}$ diagonal principal da matriz S de ordem $N_l \times N_l$, como descrito na equação (2.85), caracterizam amplitudes de reflexão do terminal l . Já os blocos $t_{l,l'}$ de ordem $N_l \times N_{l'}$ caracterizam amplitudes de transmissão do guia l para o guia l' .

Podemos agora dividir a matriz diagonal W por blocos de $\hat{\omega}$ e de $K^{-1/2}$ de maneira que a matriz W fica escrita por porções correspondentes a cada terminal. A matriz de acoplamento W de ordem $N_c \times M$ pode então ser escrita como

$$W_{\mu n} = \begin{cases} (W_1)_{\mu n}; & n = 1, 2, \dots, N_1 \\ (W_2)_{\mu, n-N_1}; & n = N_1 + 1, N_1 + 2, \dots, N_1 + N_2 \\ \vdots \\ (W_M)_{\mu, n-N_{(M-1)}}; & n = N_{(M-1)}, N_{(M-1)} + 1, \dots, N \end{cases} \quad (2.86)$$

com $\mu = 1, 2, \dots, M$. Definindo a matriz W dessa forma, podemos reescrever a matriz S de uma maneira bastante apropriada, fornecendo, diretamente, as matrizes de reflexão e de transmissão em termos dos propagadores e do acoplamento:

$$S = \begin{pmatrix} 1 - 2\pi i W_1^\dagger D^{-1} W_1 & -2\pi i W_1^\dagger D^{-1} W_2 & \cdots \\ -2\pi i W_2^\dagger D^{-1} W_1 & 1 - 2\pi i W_2^\dagger D^{-1} W_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

onde $D = E - H_{ri} - i\Gamma$ e $\Gamma = \sum_{l=1}^M W_l W_l^\dagger$. Comparando as equações (2.96) e (2.98), vemos que $r_{l,l} = 1 - 2\pi i W_l^\dagger D^{-1} W_l$ e $t_{l,l'} = -2\pi i W_l^\dagger D^{-1} W_{l'}$. Novamente, assumiremos a condição de ortogonalidade ou, equivalentemente, que não há reações diretas, portanto

$$W_l^\dagger W_{l'} = \frac{N_C \Delta}{\pi^2} \hat{\omega}^{(l)} \delta_{l,l'} \quad ; \hat{\omega}^{(l)} \equiv \text{diag}(\omega_1^{(l)}, \omega_2^{(l)}, \dots, \omega_{N_l}^{(l)}) \quad (2.88)$$

onde Δ é o espaçamento médio de níveis de energia dentro da cavidade.

2.7 Equivalência Entre Ensembles

Nesta seção, vamos mostrar através do ensemble lorentziano que em um certo limite o ensemble circular, o ensemble gaussiano e o núcleo de Poisson são equivalentes.

2.7.1 Ensemble Gaussiano e Ensemble Lorentziano

Inicialmente, vamos definir a distribuição de probabilidade do hamiltoniano para o ensemble lorentziano

$$P(\mathcal{H}) = \frac{1}{V} \lambda^{M(\beta M + 2 - \beta)/2} \text{Det}[\lambda^2 + (\mathcal{H} - \epsilon)^2]^{-(\beta M + 2 - \beta)/2} \quad (2.89)$$

onde V é a constante de normalização e λ e ϵ são parâmetros que descrevem a espessura e o centro da distribuição. Para que possamos afirmar que a distribuição de probabilidade do ensemble lorentziano e a distribuição de probabilidade do ensemble gaussiano são equivalentes no limite de escala de energia fixa e $M \rightarrow \infty$, devemos mostrar que suas distribuições de autovalores e autovetores são iguais. Podemos afirmar que a distribuição dos autovetores são equivalentes pois a distribuição de \mathcal{H} depende apenas dos autovalores independentemente do ensemble utilizado, de maneira que a distribuição de autovetores seja uniforme para ambos. As distribuições de autovalores são equivalentes e podem ser calculadas e comparadas através do método de polinômios ortogonais.

2.7.2 Ensemble Lorentziano e Ensemble Circular

A partir da equação (2.85), podemos obter a distribuição de probabilidade em função dos autovalores da mesma forma que fizemos para obter esta probabilidade no início deste capítulo. Neste caso, teremos o jacobiano que relaciona o elemento de volume no espaço da hamiltoniana \mathcal{H} ao espaço de seus autovalores dado por

$$J(\{E_i\}) = \prod_{n < m} |E_n - E_m|^\beta \quad (2.90)$$

e usaremos também a seguinte relação

$$\text{Det}(A) = \prod_i \gamma_i, \quad (2.91)$$

onde A é uma matriz quadrada e γ_i são os seus autovalores. Esta relação, por sua vez, implica na seguinte relação

$$\text{Det}[\lambda^2 + (\mathcal{H} - \epsilon)^2]^{-(\beta M + 2 - \beta)/2} = \prod_i [\lambda^2 + (E_i - \epsilon)^2]^{-(\beta M + 2 - \beta)/2}. \quad (2.92)$$

Com estas relações definidas, podemos reescrever a distribuição de probabilidade da equação (2.89) em termos dos autovalores de \mathcal{H} como

$$P(\mathcal{H}) = \frac{1}{V} \lambda^{M(\beta M + 2 - \beta)/2} \prod_i [\lambda^2 + (E_i - \epsilon)^2]^{-(\beta M + 2 - \beta)/2}, \quad (2.93)$$

e, por sua vez, teremos a distribuição de probabilidade no espaço dos autovalores de \mathcal{H} dado por

$$P(\{E_j\}) = [J(\{E_i\})] [P(\mathcal{H})] \quad (2.94)$$

$$= \left[\prod_{n < m} |E_n - E_m|^\beta \right] \left[\frac{1}{V} \lambda^{M(\beta M + 2 - \beta)/2} \prod_i [\lambda^2 + (E_i - \epsilon)^2]^{-(\beta M + 2 - \beta)/2} \right] \quad (2.95)$$

$$= \frac{1}{V} \lambda^{M(\beta M + 2 - \beta)/2} \prod_{n < m} |E_n - E_m|^\beta \prod_i [\lambda^2 + (E_i - \epsilon)^2]^{-(\beta M + 2 - \beta)/2}. \quad (2.96)$$

Considerando $\lambda = 1$, $\epsilon = 0$, podemos fazer a transformação

$$S = \frac{1 + i\mathcal{H}}{1 - i\mathcal{H}}, \quad (2.97)$$

onde os autovalores $e^{i\phi_j}$ da matriz unitária S se relacionam com os níveis de energia E_j através da relação

$$e^{i\phi_j} = \frac{1 + iE_j}{1 - iE_j}, \quad \phi_j = 2 \arctan E_j. \quad (2.98)$$

Podemos então escrever a distribuição de probabilidade das autofases a partir das equações (2.85) e (2.87) como

$$P(\{\phi_j\}) = \frac{1}{V} 2^{-M(\beta M + 2 - \beta)/2} \prod_{n < m} |\exp(i\phi_n) - \exp(i\phi_m)|^\beta \quad (2.99)$$

que é exatamente a distribuição de autofases para o ensemble circular. As funções distância do enésimo nível T_n^Λ do ensemble lorentziano e as funções distância do enésimo nível T_n^C do ensemble circular se relacionam então da seguinte maneira

$$T_n^\Lambda(E_1, \dots, E_n) = T_n^C(2 \arctan E_1, \dots, 2 \arctan E_n) \prod_{j=1}^n \frac{2}{1 + E_j^2}. \quad (2.100)$$

Uma relação entre funções distância para um λ geral é dado na referência [36] como

$$T_n^\Lambda(E_1, \dots, E_n) = T_n^C \left(2 \arctan \frac{E_1 - \epsilon}{\lambda}, \dots, 2 \arctan \frac{E_n - \epsilon}{\lambda} \right) \prod_{j=1}^n \frac{2\lambda}{\lambda^2 + (E_j - \epsilon)^2}. \quad (2.101)$$

Para reescrever essa equação no limite $M \rightarrow \infty$, podemos seguir a relação

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \Delta^n T_n(\xi_1 \Delta, \dots, \xi_n \Delta) = Y_n(\xi_1, \dots, \xi_n) \quad (2.102)$$

onde para os ensembles gaussiano e lorentziano, $\Delta = \lambda\pi/M$ é o espaçamento médio entre os níveis no centro do espectro no limite $M \rightarrow \infty$. Como queremos um espaçamento fixo, o limite

$M \rightarrow \infty$ na verdade é o limite $M, \lambda \rightarrow \infty$ de maneira que Δ se mantenha fixo para ambos os ensembles. Vamos tomar este limite no centro do espectro.

$$\begin{aligned}
\lim_{M \rightarrow \infty} T_n^\Lambda(E_1, \dots, E_n) &= \lim_{M \rightarrow \infty} T_n^C \left(2 \arctan \frac{E_1}{\lambda}, \dots, 2 \arctan \frac{E_n}{\lambda} \right) \prod_{j=1}^n \frac{2\lambda}{\lambda^2 + (E_j)^2} \\
Y_n^\Lambda(E_1, \dots, E_n) &= \lim_{M \rightarrow \infty} T_n^C \left(2 \arctan \frac{\pi E_1}{\Delta M}, \dots, 2 \arctan \frac{\pi E_n}{\Delta M} \right) \prod_{j=1}^n \frac{2\lambda}{\lambda^2 + E_j^2} \\
Y_n^\Lambda(E_1, \dots, E_n) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{2\pi}{\Delta M} \right)^n T_n^C \left[2 \left(\frac{\pi E_1}{\Delta M} \right), \dots, 2 \left(\frac{\pi E_n}{\Delta M} \right) \right] \\
Y_n^\Lambda(E_1, \dots, E_n) &= Y_n^C(E_1, \dots, E_n) \tag{2.103}
\end{aligned}$$

Temos, portanto, que no limite que tomamos as funções distância Y_n^C do ensemble circular são iguais às funções distância do ensemble lorentziano Y_n^Λ . Temos, portanto, neste limite, uma equivalência entre os ensembles gaussiano e circular.

Capítulo 3

Condutância

O objetivo deste capítulo é deduzir uma representação da condutância que seja compatível com o formalismo desenvolvido até então neste trabalho. Uma vez desenvolvida a representação, seremos capazes de fazer uma conexão com a teoria de matrizes aleatórias. Para a dedução desta representação, iremos seguir o roteiro como descrito em [4][42].

No formalismo que iremos desenvolver, a corrente que atravessa o condutor é expressa em termos da probabilidade de transmissão do elétron. Iremos observar a condutância através de uma ótica idealizada e simplificada e que, no entanto, descreve satisfatoriamente o processo.

Nesta dedução, iremos tomar um condutor ideal à temperatura $T = 0$ de maneira que tenhamos um fluxo de corrente apenas no intervalo $\mu_1 > E > \mu_2$. Vamos tomar também que as características de transmissão sejam independentes da energia neste intervalo de energia adotado, o que pode ser interpretado como um único canal de energia.

3.1 Descrição Geral do Problema

Vamos considerar as condições iniciais impostas no início deste capítulo aplicadas a um sistema como descrito na figura (3.1). Temos um condutor balístico ligando os dois contatos com probabilidade de reflexão “nula” que, por sua vez, estão ligados a dois reservatórios. Se o condutor tiver uma largura W e dimensões grandes o suficiente, sua condutância será dada por

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

onde σ é a condutividade do material. Observando esta fórmula, podemos inferir que no limite de L tendendo à zero, a condutância tende a ir para infinito. No entanto, evidências experimentais apontam para um certo limite G_C quando o comprimento L do condutor passa a ser muito menor que o caminho livre médio. Esta limitação implica em uma resistência no sistema, que neste caso provém da interface entre o condutor e os contatos. Por esse motivo, iremos

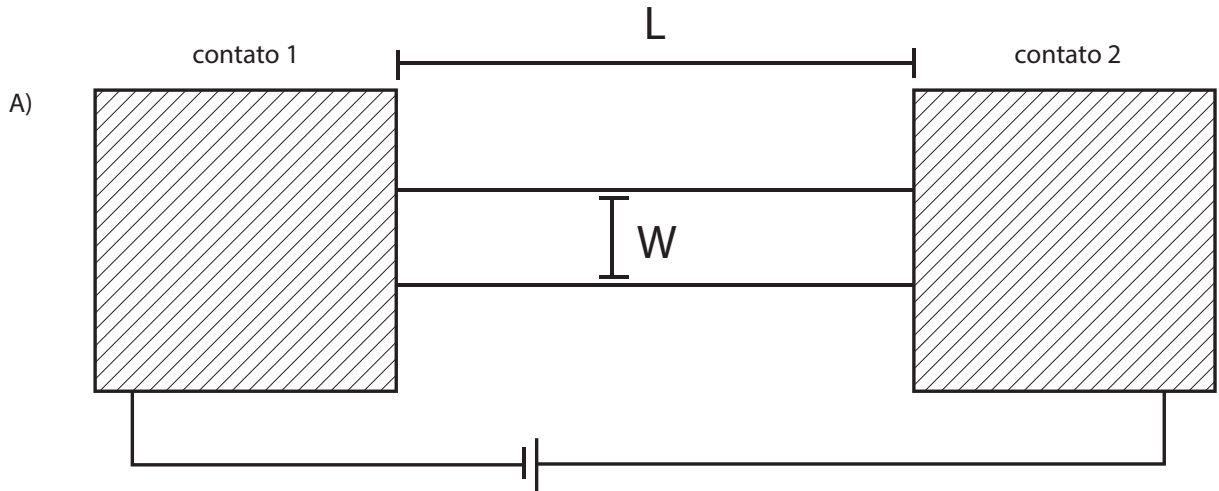


Figura 3.1: Um condutor ideal está ligando dois contatos que por sua vez estão ligados a reservatório de elétrons. Aos contatos são impostas a condição de não reflexão, ou seja, a probabilidade de reflexão nas transições contato-condutor são negligenciáveis.

denominar a resistência G_C^{-1} de resistência dos contatos. Especificamente, esta resistência é causada pela diferença de quantidade de modos transversais que carregam a corrente nos contatos e no condutor. Este fenômeno obriga que haja uma redistribuição da corrente entre os modos transversais na interface entre o condutor e o contato.

Uma vez descrito o condutor e a interface entre o condutor e os contatos, precisamos agora descrever os contatos. No início desta seção, os contatos foram definidos como tendo probabilidade de reflexão “nula”. Essa descrição implica em uma limitação na área do condutor, no sentido de que enquanto o condutor tiver uma área de contato muito pequena em comparação com os contatos, a reflexão pode ser negligenciada.

Tomando essa condição inicial teremos $+k$ estados no condutor que serão ocupados pelos elétrons que saem do contato esquerdo e $-k$ estados ocupados por elétrons vindos do contato direito, onde k é número de onda na direção x .

3.2 Cálculo da Corrente

Para que possamos realizar o cálculo da corrente é preciso notar que cada modo transversal do condutor tem uma relação de dispersão $E(N, k)$ que possui uma energia limite

$$\epsilon_N = E(N, k = 0) \quad (3.2)$$

que delimita a energia mínima abaixo da qual não há propagação. Através desta definição, é possível obter o quantidade de modos transversos à uma energia E simplesmente contando o

número de modos que possuem a energia limite menor que E . Teremos

$$M(E) = \sum_N \theta(E - \epsilon_N) \quad (3.3)$$

onde $\theta(x)$ é a função de Heaviside. Vamos então avaliar a corrente de cada modo não evanescente e somá-los para obter a corrente total. Podemos assumir que cada modo transversal tem seus $+k$ estados ocupados de acordo com uma função $f^+(E)$. Nessas condições, um gás de elétrons uniforme com n elétrons por unidade de comprimento se movendo a uma velocidade v deve carregar uma corrente igual a env . Cada k -estado do condutor de comprimento L terá uma densidade de elétrons dada por $1/L$. Poderemos portanto escrever a corrente I^+ devido aos $+k$ estados como

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v f^+(E) \quad (3.4)$$

$$= \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E) \quad (3.5)$$

Podemos ainda transformar a soma sobre os valores de k em uma integral seguindo a relação

$$\sum_k \rightarrow \frac{L}{\pi} \int dk \quad (3.6)$$

para obtermos por fim a relação

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\epsilon}^{\infty} f^+(E) dE \quad (3.7)$$

onde o limite inferior na integral se deve à energia mínima para que haja propagação do elétron. A equação (3.7) nos dá a corrente dos estados $+k$ para um modo transversal do condutor. Para obter a expressão para todos os modos, temos que integrar o produto de $f^+(E)$ com $M(E)$ desta vez de $-\infty$ até $+\infty$ pois a função $M(E)$ já cuida do limite inferior de energia. Teremos então para todos os modos

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} f^+(E) M(E) dE \quad (3.8)$$

Podemos considerar que, em um intervalo pequeno de energia $\mu_1 < E < \mu_2$, a quantidade de estados ocupados em cada modo transversal $f^+(E)$ e a quantidade de modos transversais são constantes. Portanto, podemos resolver a integral e teremos a corrente dada por

$$I^+ = \frac{2e}{h} M(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.9)$$

3.3 Fórmula de Landauer para a Condutância

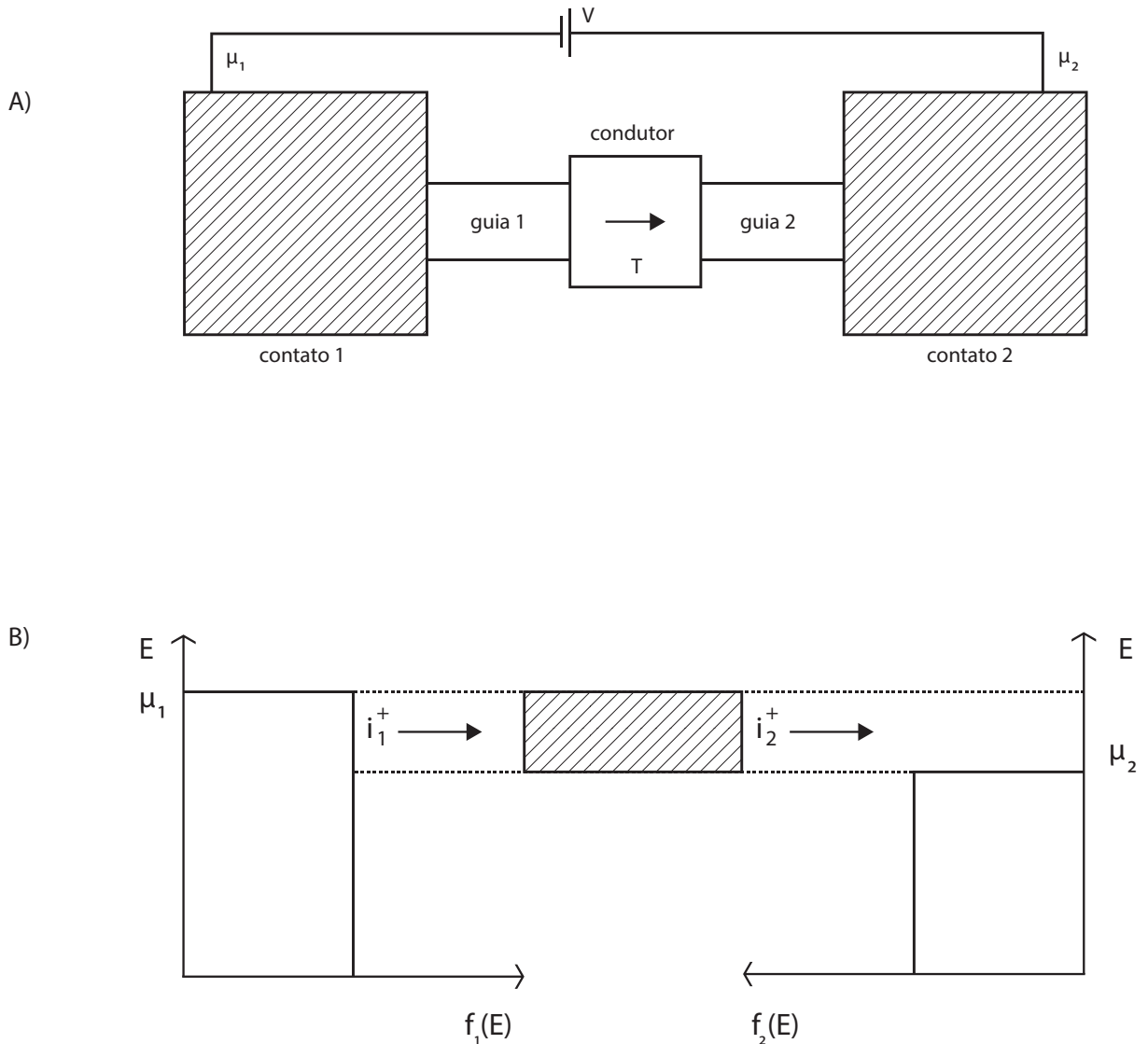


Figura 3.2: A) Um condutor com uma probabilidade de transmissão T está conectado a dois contatos através de dois guias. B) Pelo fato do sistema se encontrar à temperatura zero, a distribuição das energias assume uma forma que impede que haja corrente nos dois sentidos.

Vamos agora considerar um condutor conectado a dois contatos grandes através de duas guias que agem como condutores ideais. Cada guia terá uma quantidade constante de modos transversos M e uma probabilidade média T de transmitir um elétron do guia 1 para o guia 2. Os contatos são suficientemente grandes em comparação aos guias para que quaisquer probabilidades de reflexão possam ser negligenciadas. Seguindo a linha de raciocínio da seção anterior, teremos que os $+k$ estados do guia 1 serão ocupados apenas pelos elétrons vindos do contato 1, que por sua vez possuem potencial eletroquímico μ_1 . Analogamente o guia 2 terá seus $-k$ estados ocupados apenas pelos elétrons vindos do contato 2 e que possuem potencial eletroquímico μ_2 .

Mantendo a condição inicial de que estamos trabalhando em um sistema à temperatura $T = 0$, podemos afirmar que o fluxo de corrente está fixo no intervalo de energia $\mu_1 < E < \mu_2$. Seguindo os resultados obtidos na seção anterior, podemos escrever a corrente vindo do guia 1 como

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} M(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.10)$$

Por sua vez a corrente que sai do guia 2 é dado pela corrente que sai do guia 1 multiplicado pela probabilidade média de transmissão de um elétron através do condutor central, teremos

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.11)$$

Levando em conta que parte dos elétrons são refletidos no condutor central, teremos um fluxo no sentido contrário no guia 1 dado pelo fluxo inicial no guia 1 menos a parte refletida R

$$I_1^- = \frac{2e}{h} MR(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.12)$$

$$= \frac{2e}{h} M(1 - T)(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.13)$$

Portanto, para este sistema, teremos que a corrente total será dada por

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ \quad (3.14)$$

$$= \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.15)$$

Por fim, podemos finalmente definir a condutância que será dada por

$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/|e|} = \frac{2e^2}{h} MT \quad (3.16)$$

3.4 Formulação de Matriz de Espalhamento para a Fórmula de Landauer

Na proposição feita por Landauer, temos uma quantidade finita de modos transversais nos guias. Nesta proposição, os reservatórios de elétrons estão em equilíbrio termodinâmico e os elétrons devem satisfazer a equação de Schrödinger

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right)^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (3.17)$$

onde $V(\vec{r})$ é o potencial de confinamento e E representa a energia incidente. Assumiremos o vetor posição \vec{r} no plano (x, y) , com o elétron se propagando em x e confinado em y com

paredes em $y = 0$ e $y = d$. Como vimos na seção 2.6, teremos uma solução do tipo partícula livre e uma solução do tipo poço infinito, onde podemos escrever a solução final como produto das soluções

$$\psi(\vec{r}) = C \sqrt{\frac{2}{d}} \text{sen}(k_y y) \exp[\pm i k_x x], \quad (3.18)$$

onde C é a constante de normalização. Para o sentido transversal, teremos a condição de quantização do tipo poço infinito

$$k_{y,n} = \frac{n\pi}{d}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.19)$$

Os momentos nos respectivos eixos serão dados por $p_x = \hbar k_x$, $p_y = \hbar k_y$ de maneira que a energia de Fermi E_F pode ser escrita como

$$E_F = E_x + E_{y,n} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_{y,n}^2}{2m} \quad (3.20)$$

A partir da expressão (3.11), podemos concluir que caso $E_{y,n} < E_F$, teremos que ter $E_x > 0$, o que implica em um modo propagante tipo onda livre, ou canal aberto. Caso $E_{y,n} > E_F$ teremos que ter $E_x < 0$, o que implica em momento negativo, a exponencial em (3.9) irá decair e teremos um modo evanescente, também conhecido como canal fechado. Logo, os modos de espalhamento que incidem nos reservatórios em $x \rightarrow \pm\infty$ têm um valor máximo $n = N_g$ com $g = 1, 2$ onde g é o índice do guia. Podemos agora escrever a solução geral da equação de Schrödinger em termos das amplitudes da seguinte forma

$$\psi_g(x, y) = \sum_1^{N_g} (a_n^{(g)} \phi_n^{-(g)} + b_n^{(g)} \phi_n^{+(g)}) \quad (3.21)$$

ou em termos dos modos transversais

$$\psi_n^{\pm, (g)} = \sqrt{\frac{2m}{k_{x,n} \hbar d}} \text{sen}(k_{y,n} y) \exp[\pm i k_{x,n} x]. \quad (3.22)$$

onde o sinal + (-) representa os canais propagante para a esquerda (direita) em cada um dos guias. Nosso objetivo é relacionar, por meio de uma matriz de espalhamento, as amplitudes de entrada e saída do condutor. Podemos escrever matrizes coluna em termos das amplitudes $a_n^{(g)}$ e $b_n^{(g)}$ de maneira que teremos

$$A^{(g)} = (a_1^{(g)}, a_2^{(g)}, \dots, a_{N_g}^{(g)})^T, \quad B^{(g)} = (b_1^{(g)}, b_2^{(g)}, \dots, b_{N_g}^{(g)})^T \quad (3.23)$$

ou criando uma matriz coluna para todos os valores de g

$$A = (A^{(1)}, A^{(2)})^T, \quad B = (B^{(1)}, B^{(2)})^T \quad (3.24)$$

A matriz S é a matriz que conecta as amplitudes de entrada e saída. Teremos então

$$B = SA. \quad (3.25)$$

Podemos decompor a matriz S em blocos de transmissão e reflexão referentes a cada guia. Neste caso, a matriz S terá dimensão $(N_1 + N_2) \times (N_1 + N_2)$. A reflexão do guia i será denotada por r e terá dimensão $N_i \times N_i$, $i = 1, 2$. Sua transmissão do guia 1 para o guia 2 será denotada por t e terá dimensão $N_1 \times N_2$. Por fim sua transmissão do guia 2 para o guia 1 terá dimensão $N_2 \times N_1$ e será denotada por t' , de maneira que teremos a mesma notação do capítulo 2

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Precisamos agora encontrar uma maneira de relacionar a expressão da condutância linear em T com a matriz de espalhamento obtida no capítulo anterior. Uma vez relacionadas as duas expressões, poderemos utilizar a expressão da condutância em termos de blocos da matriz de espalhamento em nossas simulações. Neste caso, podemos fazer esta conexão observando que a probabilidade de transmissão T pode ser escrita em forma de matriz com seus elementos representando as probabilidades de transmissão de um determinado canal para outro. Essas matrizes são exatamente os blocos de transmissão das matrizes de espalhamento. A probabilidade de transmissão se relaciona então com o bloco de transmissão pela expressão

$$T = \text{Tr}(tt^\dagger)/M,$$

onde a divisão por M é necessária pois $\text{Tr}(tt^\dagger)$ nos dá a soma das probabilidades de transmissão de todos os canais. Teremos finalmente a expressão para a condutância dada por

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(tt^\dagger). \quad (3.27)$$

3.5 Considerações Sobre um Sistema Menos Idealizado

Desenvolvemos nas seções anteriores o formalismo de Landauer-Büttiker em uma forma mais simplificada com intuito de obter o necessário para cobrir a base teórica da simulação que será apresentada no final deste capítulo. Nesta seção, iremos tratar de uma versão um pouco menos idealizada do formalismo de Landauer-Büttiker para, na seção seguinte, fazer um

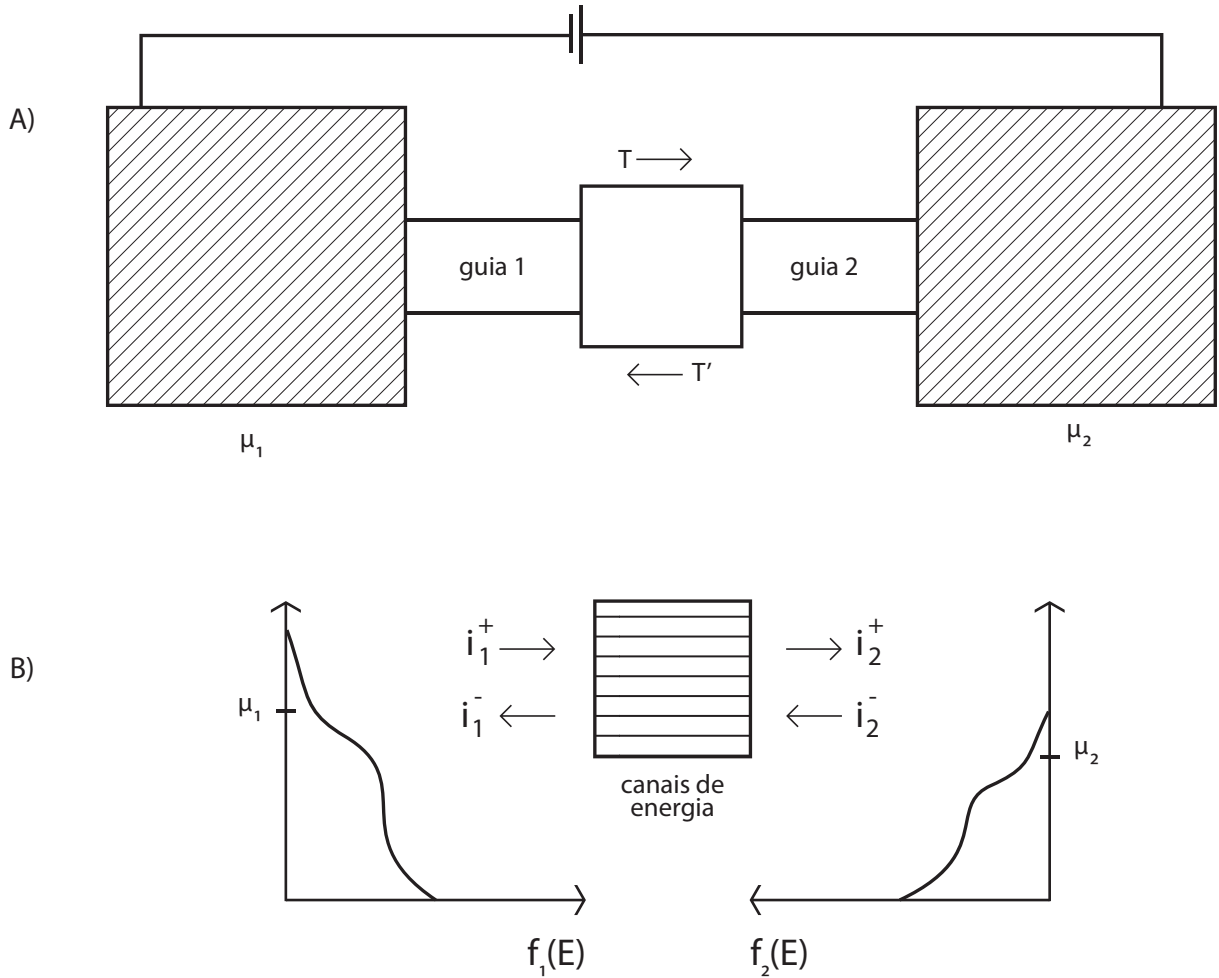


Figura 3.3: A) Um condutor está ligado a dois contatos através de dois guias ideais. A probabilidade de transição do guia 1 para o guia 2 é dado por T e a probabilidade de transição do guia 2 para o guia 1 é dado por T' . B) Devido ao fato de não estarmos mais em um regime de temperatura zero, temos agora distribuições de energia um pouco mais suaves que permitem corrente nos dois sentidos.

questionamento sobre o limite de validade deste formalismo.

Nas seções anteriores, estudamos o problema de transporte coerente à temperatura $T = 0$. O que aconteceria se nosso sistema tivesse uma temperatura baixa porém diferente de zero? Em uma temperatura diferente de zero a distribuição de energia adota uma forma mais suavizada e contínua em comparação com a distribuição da energia à temperatura zero. Na prática isso significa que em uma temperatura diferente de zero alguns elétrons no reservatório 2 vão ter uma energia maior que alguns elétrons no reservatório 1, gerando uma corrente no sentido contrário.

Anteriormente, no caso ideal, chegamos à equação da corrente dada por

$$I = \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2), \quad (3.28)$$

onde tratamos a probabilidade de transmissão dos modos como uma constante em um único

canal. No entanto, em um caso menos idealizado, podemos ter vários canais de energia com probabilidades de transmissão diferentes no novo intervalo de energia

$$\mu_1 + nk_B T > E > \mu_2 - nk_B T, \quad (3.29)$$

onde n é um valor pequeno.

Podemos agora aplicar o raciocínio desenvolvido neste capítulo para encontrar uma expressão para a corrente total neste novo sistema. Podemos escrever o fluxo de elétrons por unidade de energia que sai do contato 1 para o guia 1 como

$$i_1^+(E) = \frac{2e}{h} M f_1(E), \quad (3.30)$$

onde $f_1(E)$ é o termo correspondente ao intervalo de energia deste sistema (que agora é diferente de $\mu_1 < E < \mu_2$). Analogamente, teremos um fluxo saindo do contato 2 para o guia 2 devido à nova distribuição de energias dado por

$$i_2^-(E) = \frac{2e}{h} M' f_2(E) \quad (3.31)$$

O fluxo saindo do condutor para o guia 2 deve ser uma soma do fluxo que sai do guia 1 e atravessa o condutor e o fluxo que sai do contato 2 e é refletido no condutor, teremos então seguindo o raciocínio das seções anteriores

$$i_2^+(E) = T i_1^+(E) + (1 - T') i_2^-(E) \quad (3.32)$$

e analogamente

$$i_1^-(E) = (1 - T) i_1^+(E) + T' i_2^-(E) \quad (3.33)$$

podemos finalmente escrever o fluxo total como

$$i(E) = i_1^+ - i_1^- = i_2^+ - i_2^- \quad (3.34)$$

$$= i_1^+ - (1 - T) i_1^+ + T' i_2^- \quad (3.35)$$

$$= T i_1^+ - T' i_2^- \quad (3.36)$$

$$= \frac{2e}{h} [M(E)T(E)f_1(E) - M'(E)T'(E)f_2(E)] \quad (3.37)$$

Definindo $\tilde{T} = M(E)T(E)$

$$i(E) = \frac{2e}{h} [\tilde{T}(E)f_1(E) - \tilde{T}'(E)f_2(E)] \quad (3.38)$$

onde de acordo com [4] para sistemas neste regime e com a restrição de ter apenas espalhamento

elástico dentro do sistema, teremos $\tilde{T}(E) = \tilde{T}'(E)$. O fluxo pode então ser escrito como

$$i(E) = \frac{2e}{h} \tilde{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (3.39)$$

e a corrente total será dada por

$$I = \int i(E) dE \quad (3.40)$$

No caso onde da diferença de potencial é zero ($\mu_1 = \mu_2$), devemos ter corrente nula, o que implica $f_1(E) = f_2(E)$. Neste regime, para pequenas variações, corrente é proporcional à diferença de potencial, podemos então escrever

$$\delta I = \int \delta [i(E)] dE \quad (3.41)$$

$$= \frac{2e}{h} \int \left\{ [\tilde{T}(E)] \delta [f_1 - f_2] + [f_1 - f_2] \delta [\tilde{T}(E)] \right\} dE \quad (3.42)$$

$$= \frac{2e}{h} \int \left\{ [\tilde{T}(E)] \delta [f_1 - f_2] \right\} dE \quad (3.43)$$

onde, pelas condições impostas, $f_1 = f_2$ e portanto o segundo termo dentro da integral é nulo. A função delta pode ser desenvolvida através de expansão de Taylor, teremos

$$\delta [f_1 - f_2] \approx (\mu_1 - \mu_2) \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\mu_1 - \mu_2) \quad (3.44)$$

onde $f_0(E)$ é a função de Fermi no equilíbrio, dada por

$$f_0(E) = \left\{ \frac{1}{\exp [(E - \mu)/k_B T] + 1} \right\}_{\mu=E_f} \quad (3.45)$$

que à baixas temperaturas pode ser aproximada à função de heaviside, ou seja

$$f_0(E) \approx \theta(E_f - E) \quad (3.46)$$

e, pela definição da função de Heaviside, teremos

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} \approx \delta(E_f - E) \quad (3.47)$$

substituindo esse valor na expressão para δI ficamos com

$$\begin{aligned}
\delta I &= \frac{2e}{h} \int \left\{ \left[\tilde{T}(E) \right] (\mu_1 - \mu_2) \delta(E_f - E) \right\} dE \\
&= \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \tilde{T}(E_f) \\
&= \frac{2e}{h} T(E_f) M(E_f) (\mu_1 - \mu_2)
\end{aligned} \tag{3.48}$$

e a condutância é dada por

$$G = \frac{\delta I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} \tag{3.49}$$

$$= \frac{2e^2}{h} T(E_f) M(E_f) \tag{3.50}$$

Podemos notar que recuperamos as expressões da corrente e da condutância obtidas no nosso exemplo em um sistema à temperatura zero.

Cabe agora um questionamento sobre quais situações obedecem a essa expressão linear da corrente e da condutância de maneira a ligar a teoria desenvolvida no caso com temperatura nula e no caso com temperatura próxima de zero.

No desenvolvimento com $T \neq 0$ a expressão linear foi obtida através da condição inicial imposta de que a diferença de potencial $(\mu_1 - \mu_2)$ fosse muito pequena (muito menor que $k_B T$). No entanto essa condição não é necessária. Como vimos no caso inicial, a expressão é linear com a simples imposição de trabalharmos com temperatura nula. A realidade é que as expressões serão lineares independentemente da temperatura, contanto que a função de transmissão $\tilde{T}(E)$ seja aproximadamente constante no intervalo de energia onde está acontecendo o transporte. Nos resta encontrar sob quais condições podemos tratar a função de transmissão como constante.

Vamos reescrever a expressão para a corrente total (3.40) tomando a função de transmissão como constante à energia de Fermi, teremos

$$I = \frac{2e}{h} \tilde{T}(E_f) \int [f_1(E) - f_2(E)] dE \tag{3.51}$$

onde vimos que, à baixas temperaturas, $f_1(E) \approx \theta(\mu_1 - E)$ e $f_2(E) \approx \theta(\mu_2 - E)$. No entanto, de acordo com [4] estas relações também são válidas para temperaturas altas, fazendo com que

a parte integral, independentemente da temperatura, seja dada por

$$\int [f_1(E) - f_2(E)]dE = \int \theta(\mu_1 - E)dE - \int \theta(\mu_2 - E)dE \quad (3.52)$$

$$= \int_0^{\mu_1} dE - \int_0^{\mu_2} dE \quad (3.53)$$

$$= \mu_1 - \mu_2 \quad (3.54)$$

resultando em uma relação linear para a corrente

$$I = \frac{2e}{h} \tilde{T}(E_f)(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.55)$$

com restrição apenas sobre a função de transmissão ser constante no intervalo de energia.

Dando prosseguimento a este tópico, vamos escrever a fórmula da corrente total de acordo com [37]

$$I = \frac{1}{e} \int_{\mu_2}^{\mu_1} \tilde{G}(E')dE' \quad (3.56)$$

onde a função da condutância $\tilde{G}(E')$ é definida aqui como

$$\tilde{G}(E') = \frac{2e^2}{h} \int \tilde{T}(E)F_T(E - E')dE \quad (3.57)$$

e $F_T(E)$ é a função “thermal broadening”

$$F_T(E) \equiv -\frac{d}{dE} \left[\frac{1}{\exp(E/k_B T) + 1} \right] \quad (3.58)$$

$$= \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2k_B T} \right) \quad (3.59)$$

Observando a expressão para a corrente total (3.56), podemos afirmar que a corrente será dada por uma expressão linear quando a função da condutância $\tilde{G}(E')$ não depender da energia no intervalo de integração, ficamos com uma nova expressão para a corrente

$$I = \tilde{G}(E_f) \frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \quad (3.60)$$

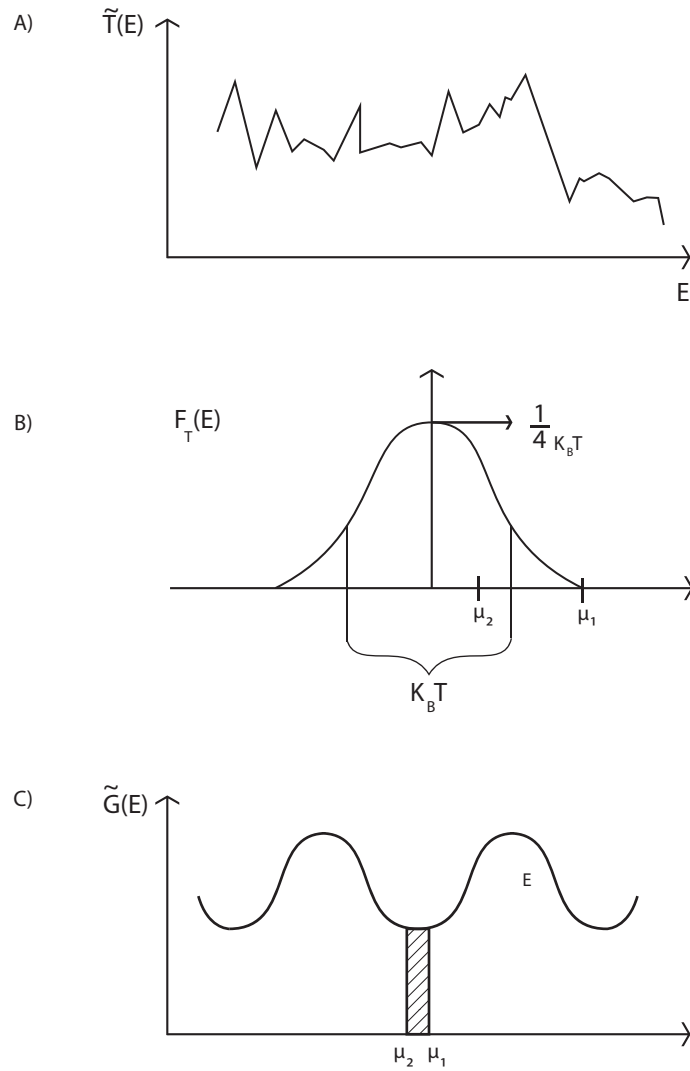


Figura 3.4: A) Temos a função $\tilde{T}(E)$ que varia bastante com a energia. B) Temos a função $F_T(E)$ que serve como filtro para a função $\tilde{T}(E)$ dentro da operação de convolução. C) A função $\tilde{G}(E)$ formada pela convolução de $\tilde{T}(E)$ e $F_T(E)$ se torna uma função suave, e pode ser considerada constante em intervalos pequenos de energia

e analogamente, teremos a condutância dada por

$$G = \frac{I}{\mu_1 - \mu_2/e} \quad (3.61)$$

$$= \frac{\tilde{G}(E_f)[\mu_1 - \mu_2/e]}{\mu_1 - \mu_2/e} \quad (3.62)$$

$$= \frac{2e^2}{h} \int \tilde{T}(E) F_T(E - E_f) dE \quad (3.63)$$

que está de acordo com a expressão para condutividade anteriormente obtida se fizermos a comparação de $F_T(E - E_f)$ com f_0 .

Observando a equação (3.57), podemos ver que a função $\tilde{G}(E)$ é dada pela convolução das

funções $\tilde{T}(E)$ e $F_T(E)$ e é a partir dessa relação que podemos definir o intervalo de validade das expressões lineares obtidas.

Em um regime de temperaturas baixas a interferência quântica da origem a estruturas ressonantes que afetam significativamente o comportamento da função $\tilde{T}(E)$ em relação à variação de energia, isso significa que a energia de correlação do sistema é baixa. No entanto a função $F_T(E)$ é uma função bem comportada de largura da ordem de $k_B T$ e serve de suavizador e filtro para a função $\tilde{T}(E)$ dentro da operação de convolução. Portanto, como regra geral, para que se possa utilizar uma expressão linear para a corrente e a condutância, é interessante se manter a diferença de potencial muito abaixo da largura da função $F_T(E)$ ou seja $(\mu_1 - \mu_2) \ll k_B T$

3.6 Resultados Obtidos Através de Simulação

Foram realizadas algumas simulações que abrangem os desenvolvimentos teóricos realizados nos capítulos 2 e 3 deste trabalho. O modelo que foi simulado é o modelo proposto no desenvolvimento da fórmula de Landauer onde temos reservatórios de elétrons (contatos) ligados através de guias ideais a um condutor, que neste caso é tratado como um ponto quântico caótico com 4 canais. Neste caso específico, foi tomado a probabilidade de transmissão $T(E) = 1$ e o sistema é tratado com temperatura diferente de zero porém próxima a zero obedecendo o limite de diferença de potencial $\mu_1 - \mu_2 \ll k_B T$. Montamos o problema através de teoria de matrizes aleatórias utilizando o hamiltoniano gaussiano e variamos o número de ressonâncias (autovalores) no condutor para os ensembles ortogonal e unitário.

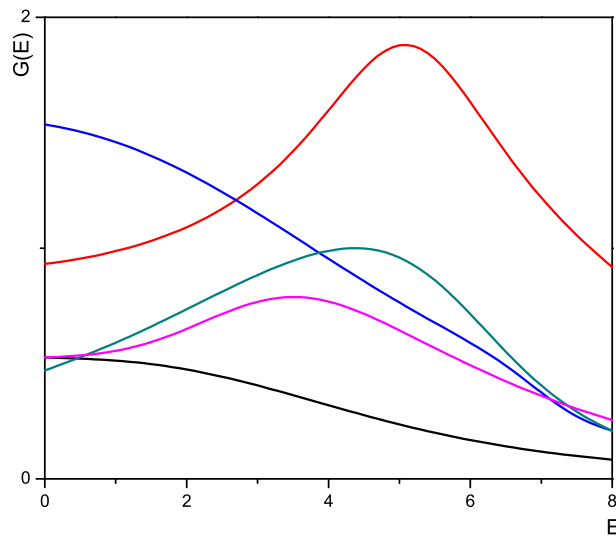


Figura 3.5: Diferentes curvas de condutância obtidas através de hamiltonianos aleatórios.

Quando se trata um problema através da teoria de matrizes aleatórias, se obtém diversos

resultados que aparentemente não têm conexão, é necessário que seja feito um tratamento estatístico em cima dos resultados iniciais. Como exemplo temos uma pequena amostragem das funções da condutância obtidas nestas simulações na figura (3.5).

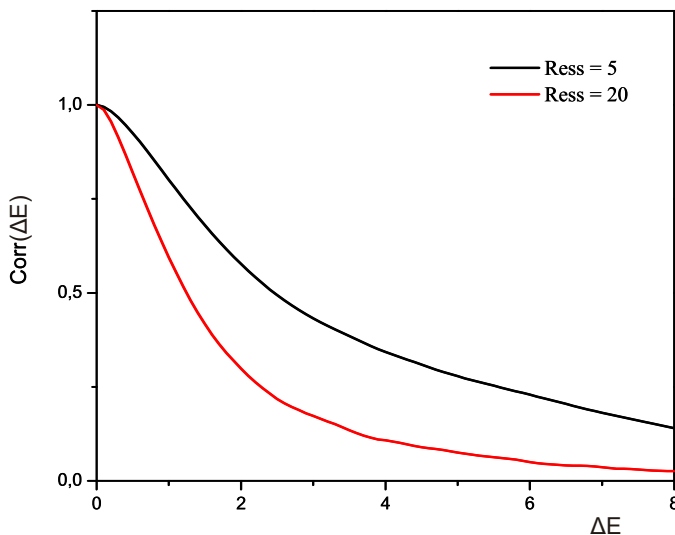


Figura 3.6: Curvas de correlação para dois valores diferentes das ressonâncias da cavidade caótica.

A partir das condutâncias é possível calcular a autocorrelação das condutâncias para uma mesma diferença de potencial e a partir daí criar curvas de autocorrelação da condutância. De acordo com as flutuações de Ericson observadas em [39], a função de autocorrelação das energias da seção de choque em um regime de núcleos compostos deve ser uma lorentziana com largura Γ que é a largura de uma ressonância típica dentro do núcleo. Esse tipo de flutuação também foi observado em pontos quânticos abertos $T \approx 1$ para função da autocorrelação da condutância [38] que é o caso em estudo neste capítulo. O processo de normalização utilizado consistiu em dividir pela variância em $\Delta E = 0$. Como ilustração do processo temos duas curvas de autocorrelação para dois valores diferentes da ressonância na figura (3.6). Como pode ser observado na figura (3.6), as duas curvas têm a forma de uma lorentziana com larguras diferentes, estando de acordo com [38].

Foram obtidas curvas de autocorrelação para diversas quantidades de autovalores do condutor variando entre 5 e 200 autovalores e utilizando entre 200000 e 4998 matrizes aleatórias para traçar cada curva, onde as maiores quantidades de matrizes foram utilizadas para os menores valores das ressonâncias. Foi observado uma queda do valor médio da autocorrelação com o aumento no número de ressonâncias no intervalo de energia estudado. Marcando o valor médio da autocorrelação para cada valor das ressonâncias foi possível traçar um gráfico para cada um dos ensembles que, por sua vez, foi fittado pela curva de uma hipérbole.

Como dito anteriormente, esse processo foi realizado para os ensembles unitário e ortogonal

e tiveram resultados similares, o que pode ser visto nas figuras (3.7) e (3.8).

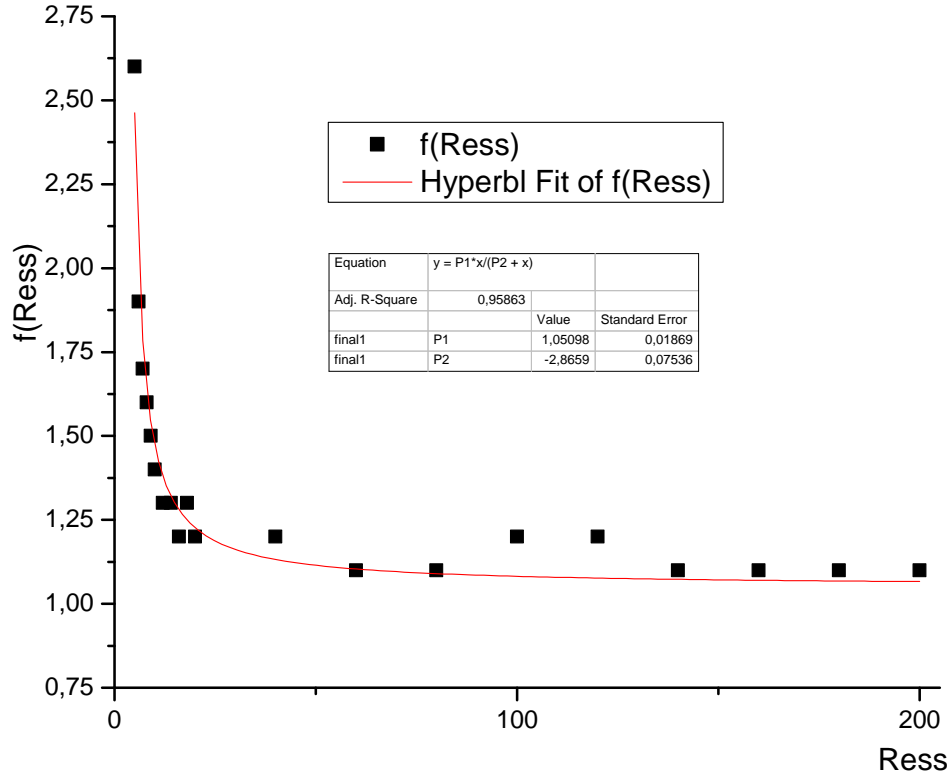


Figura 3.7: Gráfico das larguras das curvas de autocorrelação da condutância à altura média em função das ressonâncias para o ensemble ortogonal

A conexão com os resultados obtidos pode ser feita recuperando uma discussão feita por Alhassid [41] e Weisskopf [40]. Suponhamos um pacote de onda próximo à entrada de um canal c em um dos guias. O pacote de onda irá evoluir no tempo e irá retornar após o tempo de Heisenberg $\tau_H = h/\Delta$, onde Δ é o espaçamento médio de níveis que é o inverso do número de ressonâncias. A probabilidade de decaimento próximo à um canal c é dado pelo coeficiente de transmissão T_c . A taxa de decaimento Γ_c/\hbar de um nível em um canal c deve então ser dado pelo produto entre a frequência de “tentativas” de decaimento e o coeficiente de transmissão

$$\frac{\Gamma_c}{\hbar} = \frac{T_c}{\tau_H} = \frac{\Delta T_c}{h} \quad (3.64)$$

E a largura total é dada pela soma das larguras para cada canal Γ_c , portanto

$$\Gamma = \frac{\Delta}{2\pi} \sum_c T_c \quad (3.65)$$

Temos então que a largura da lorentziana deve ser proporcional a Δ ou ao inverso do número

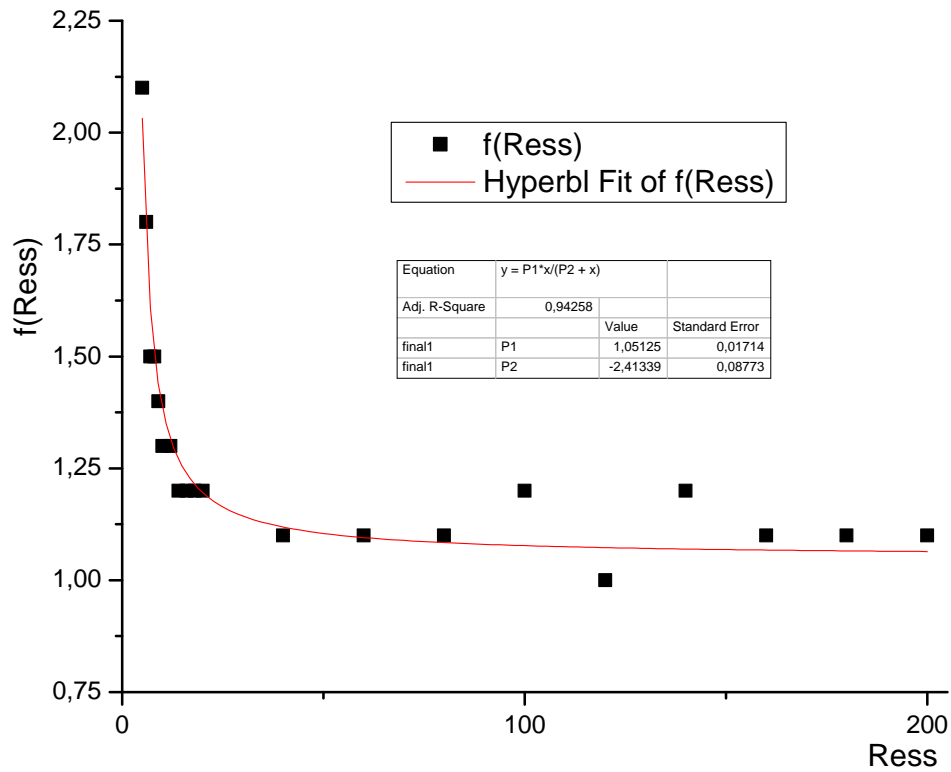


Figura 3.8: Gráfico das larguras das curvas de autocorrelação da condutância à altura média em função das ressonâncias para o ensemble unitário

de ressonâncias, o que significa que a largura da lorentziana deve diminuir com o aumento do número de ressonâncias. Esse resultado pode ser observado nas figuras (3.7) e (3.8), onde podemos observar uma queda drástica da área da lorentziana com o aumento das ressonâncias em um regime de pequenas ressonâncias e variação mínima em um regime de grandes ressonâncias com as curvas completas sendo fittadas pela curva de uma hipérbole.

Capítulo 4

Geração de Emaranhamento em um Ponto Quântico Caótico

Nesta seção iremos discutir o fenômeno do emaranhamento quântico. Vamos revisar a definição de maneira objetiva e simples. Em seguida iremos estudar um modelo para geração de elétrons emaranhados e iremos testar esse modelo através de simulação ligando esta teoria ao que temos desenvolvido até então neste trabalho.

4.1 Definição de Emaranhamento e Concorrência

Emaranhamento, como definido em[8], é uma propriedade de um estado bipartite, ou seja, sistemas que consistem de duas partes A e B que estejam suficientemente separados entre si para que não haja interação, se encontrem em um estado puro ou misto e estejam em um espaço de Hilbert que seja o produto tensorial dos espaços de Hilbert das partes $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ¹.

Algebricamente, um estado pode ser considerado emaranhado quando não é possível fazer uma decomposição do sistema em produto direto.

Exemplo 1:

$$|\Phi\rangle = |00\rangle + |01\rangle$$

$$|\Phi\rangle = |0\rangle_A \otimes (|0\rangle + |1\rangle)_B$$

Podemos observar que o sistema não é emaranhado.

¹Definição alternativa de emaranhamento de formação para sistemas multipartites como em[9]: Inicialmente, Alice e Bob não compartilham partículas emaranhadas porém podem compartilhar informação quântica. A questão se torna, então, quantos qubits devem passar entre Alice e Bob para que se possa criar muitos pares no estado desejado.

Exemplo 2:

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle)$$

Neste caso não é possível escrever em termos de um produto direto como no exemplo anterior. Temos, portanto, um estado emaranhado.

4.1.1 Emaranhamento e Concorrência em um Ensemble Puro

Matematicamente, podemos definir o emaranhamento para estados puros seguindo [8][47]. Dado um estado puro arbitrário $|\Psi\rangle$ no espaço de Hilbert bipartite $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, um par de qubits terá a forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad \text{Tr}(\gamma\gamma^\dagger) = 1$$

$$\gamma = \sigma_y r \sigma_y t^T$$

Para criar um estado emaranhado a partir de um estado não emaranhado é necessário que haja a troca de uma certa quantidade de informação quântica. Essa informação quântica pode tomar a forma de pares de Bell (ou pares EPR). Os pares de Bell vão neste caso fazer o papel de “moeda de troca”, através dos quais será possível quantificar o emaranhamento. O número médio de pares por cópia de Bell necessários para preparar um grande número de cópias do estado puro $|\Psi\rangle$ é dado pela entropia de Von Neumann:

$$S(\rho_A) = -\text{Tr}_A \rho_A \log_2 \rho_A, \quad \rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle \langle \Psi|$$

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) = \mathcal{E}(\Psi)$$

A quantidade \mathcal{E} é chamada de *emaranhamento de formação* e está no intervalo $\mathcal{E} \in [0, 1]$, com $\mathcal{E} = 1$ representando o estado maximamente emaranhado. A partir da matriz de espalhamento é possível reescrever o emaranhamento de formação em termos de coeficientes c da seguinte forma:

$$\mathcal{E} = \mathcal{F}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4\text{Det}\gamma\gamma^\dagger}\right)$$

$$\text{Onde} \quad \mathcal{F}(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x)$$

Podemos agora definir outra quantidade que está diretamente ligada ao emaranhamento de

formação. Essa quantidade é chamada de concorrência. A concorrência se encontra no mesmo intervalo que o emaranhamento, ou seja, $\mathcal{C} \in [0, 1]$. Por esse fato, dependendo das condições, é aceitável tomar a medida da concorrência como uma medida do emaranhamento por si só. Matematicamente a concorrência é definida como[47]:

$$\mathcal{C}(\Psi) = |\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle|$$

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sigma_y |\Psi^*\rangle$$

onde $|\Psi^*\rangle$ é o complexo conjugado de $|\Psi\rangle$ e σ_y é a matriz de pauli. A operação $\tilde{\Psi}$ é chamada *spin flip*. Para uma densidade geral ρ de dois qubits, o respectivo estado *spin flip* é dado por[47]:

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y)$$

A partir destes resultados podemos escrever uma definição de \mathcal{C} em termos dos coeficientes da matriz de espalhamento, teremos então:

$$\mathcal{C} = 2 \frac{\sqrt{\text{Det} \gamma \gamma^\dagger}}{\text{Tr} \gamma \gamma^\dagger}$$

Esta é a definição da concorrência para o caso geral. Para o caso de ensemble puro, $\text{Tr} \gamma \gamma^\dagger = 1$, podemos então reescrever o emaranhamento em termos da concorrência como:

$$\mathcal{E}(\mathcal{C}) = \mathcal{F}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - \mathcal{C}^2}\right)$$

4.1.2 Emaranhamento e Concorrência em um Ensemble Misto

Para o caso de matrizes mistas, a matriz de densidade ρ pode ser decomposta em estados puros $|\Psi_i\rangle$ com peso positivo p_i :

$$\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|, \quad p_n > 0, \quad \sum_i p_n = 1$$

O emaranhamento de formação para um estado misto ρ é então definido como emaranhamento médio dos estados puros da decomposição, minimizado sobre todas as decomposições de ρ :

$$\mathcal{E}(\rho) = \min \sum_i p_i \mathcal{E}(\Psi_i)$$

Onde $\mathcal{E}(\Psi_i)$ é o emaranhamento de formação do estado puro $|\Psi_i\rangle$ e os estados $|\Psi_i\rangle$ são normalizados porém não são necessariamente ortogonais. Devido a este fato o formato de ρ não é único para estados mistos, ou seja, existem várias representações equivalentes para ρ como uma

mistura de estados puros.

Um estado misto no espaço de Hilbert bipartite $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ é não emaranhado caso exista uma representação de $|\Psi_i\rangle$ tal que $|\Psi_i\rangle = |\Phi_i\rangle_A |\Phi'_i\rangle_B$ com $|\Phi_i\rangle \in \mathcal{H}_A$ e $|\Phi'_i\rangle \in \mathcal{H}_B$ para todo i . Como esperado, no caso de um estado misto separável, o valor de $\mathcal{E}(\rho)$ é nulo. O emaranhamento mantém sua forma em termos de $\mathcal{E}(\mathcal{C})$ porém a concorrencia \mathcal{C} será escrita como função de ρ em termos das raízes em ordem decrescente λ_i ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$) da matriz hermitiana $R \equiv \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$

$$\mathcal{C}(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}$$

4.2 Modelo Para Produção de Emaranhamento em um Ponto Quântico Caótico

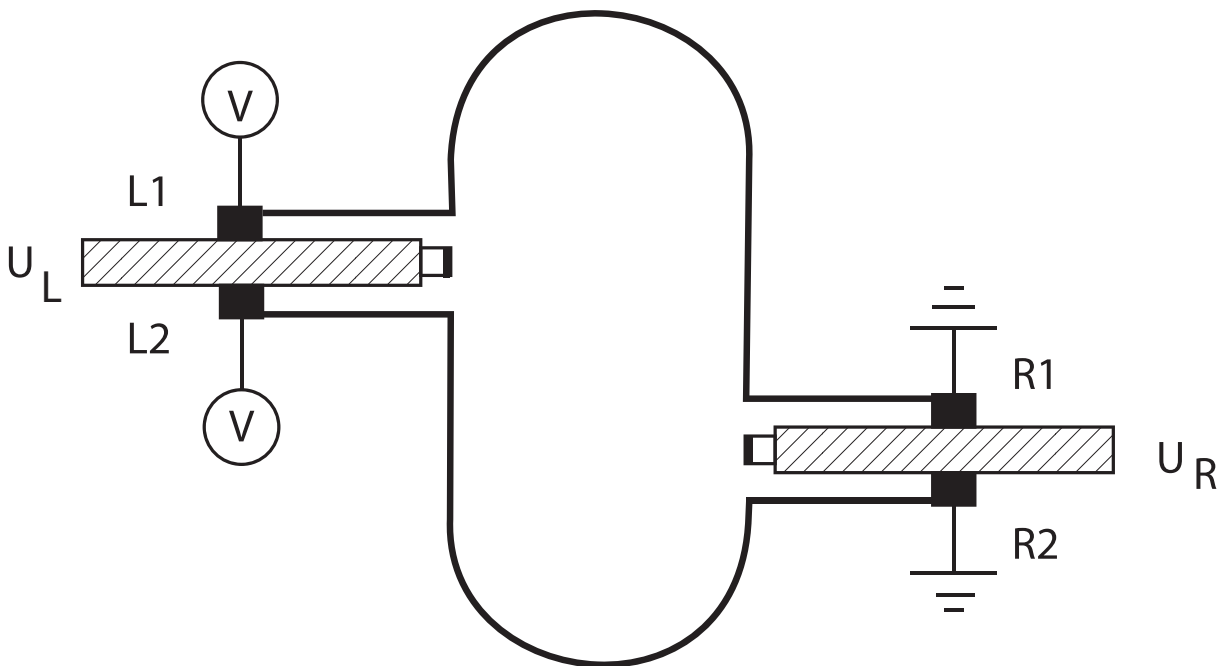


Figura 4.1: Modelo do ponto quântico utilizado para gerar emaranhamento retirado da referência [46]. Os guias superiores ($L1, R1$) representam o estado $|1\rangle$ e os guias inferiores ($L2, R2$) representam o estado $|0\rangle$ ou vice-versa, desta maneira podemos entender um elétron que sai do sistema pela direita ou pela esquerda como um qubit.

Os métodos usuais de criação de partículas emaranhadas dependem de interação entre as partículas para a geração do emaranhamento. No entanto, como descrito em [45], é possível criar emaranhamento em um reservatório de elétrons através de espalhamento elástico de um

único elétron. Nesta seção iremos fazer uma breve discussão sobre a criação de emaranhamento através do modelo desenvolvido em [46].

A geometria do aparato proposto está exposta na figura (4.1). Teremos um ponto quântico conectado a dois guias à direita e dois guias à esquerda que por sua vez estarão ligados a reservatórios de elétrons através de contatos pontuais. Cada guia estará restrito a um único canal. Chamaremos os guias à esquerda de $L1$ e $L2$ e os da direita de $R1$ e $R2$. Uma diferença de potencial irá criar uma corrente que atravessará o ponto quântico dando início ao processo de espalhamento e conseqüentemente criando emaranhamento. Neste modelo consideramos espalhamento entre os canais L e R no intervalo de energia eV acima da energia de Fermi E_F .

O grau de emaranhamento é medido através da violação da desigualdade de Bell para correlatores de flutuações de corrente. Entretanto, a violação da desigualdade de Bell requer a mistura dos canais ($R1$ com $R2$ e $L1$ com $L2$) em cada ponta do ponto quântico. De modo a preservar o grau de emaranhamento, esse espalhamento entre os canais deve ser local, ou seja, o espalhamento entre canais não deve refletir elétrons de volta ao ponto quântico. Uma maneira de satisfazer essas condições é através da inserção de matrizes unitárias quadradas U_L e U_R que representam barreiras parcialmente transparentes que separam os canais $R1/R2$ e $L1/L2$ e que podem ser ajustadas por uma porta quântica.

4.3 Resultados Obtidos Através de Simulação

A motivação destas simulações vieram do interesse em investigar o comportamento de uma grandeza sem equivalente clássico em relação ao comportamento da condutância, estabelecendo um caráter comparativo entre as duas grandezas. No caso da condutância obtivemos a função de autocorrelação com a forma de uma lorentziana com largura equivalente ao inverso da ressonância. Devido ao caráter comparativo desta investigação, as simulações foram realizadas de maneira bastante semelhantes ao que foi feito no capítulo 3. Através da teoria de matrizes aleatórias desenvolvida no capítulo 2 junto com o formalismo de emaranhamento e concorrência, pudemos obter uma base sólida. Partindo desta base precisamos apenas impor as condições descritas no modelo de geração de emaranhamento da seção 4.2. Obtivemos então funções do emaranhamento e da concorrência (como mostrado no capítulo 1) que foram posteriormente tratadas estatisticamente para obter os resultados que serão em breve apresentados.

Neste caso simulamos o emaranhamento e concorrência para os ensembles unitário, ortogonal e simplético utilizando 150000 matrizes aleatórias. Com estes resultados pudemos calcular o valor médio da concorrência, o valor médio do emaranhamento, a autocorrelação da concorrência e a autocorrelação do emaranhamento.

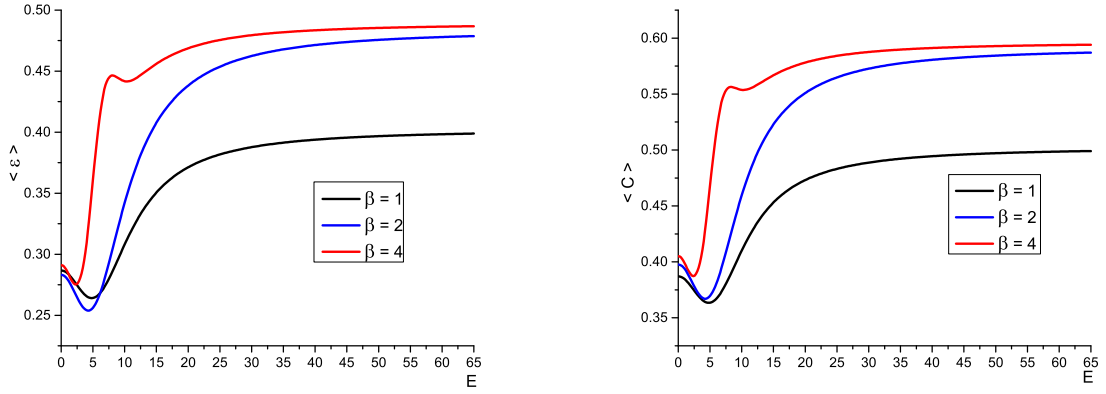


Figura 4.2: Gráfico do emaranhamento médio (esquerda) e da concorrência média (direita)

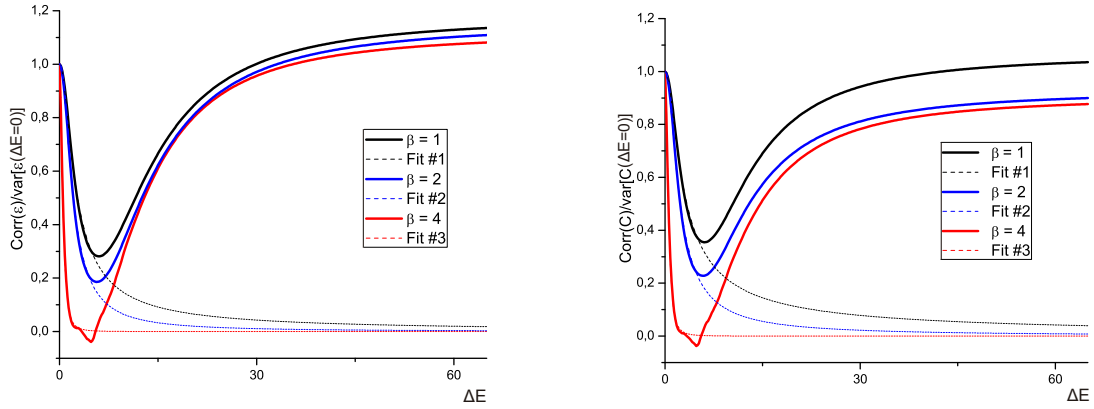


Figura 4.3: Gráfico da correlação do emaranhamento (esquerda) e da correlação da concorrência (direita) para $\beta = 1, 2, 4$ fittados por funções similares a lorentzianas porém com expoente global diferente de 1

Podemos confirmar pela figura (4.2) que, como esperado, o comportamento do emaranhamento médio e da concorrência média são de fato similares entre si, o que está de acordo com a relação obtida.

$$\mathcal{E}(\mathcal{C}) = \mathcal{F}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - \mathcal{C}^2}\right) \quad (4.1)$$

$$\text{com } \mathcal{F}(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2(1 - x) \quad (4.2)$$

No entanto é interessante observar pela figura (4.3) que as funções de emaranhamento e concorrência de fato geram funções de autocorrelação com comportamento similar (até certa diferença de energia) às curvas obtidas para a condutância. No casos do emaranhamento e da concorrência, as curvas são bem fittadas por uma função similar à lorentziana (diferindo apenas no expoente global) até uma certa diferença de energia, após a qual as curvas passam a seguir um comportamento logarítmico. Este é um resultado inédito que pode vir a ser publicado no

futuro.

A fim de estudar mais profundamente o comportamento das distribuições do emaranhamento médio e da concorrência média fizemos um estudo das distribuições dos elementos obtidos nas simulações separando-os por ensemble. Analisando as curvas da figura (4.2) foi tomada a decisão de montar histogramas para os elementos em $E = 0$, no mínimo da sua respectiva curva e no valor máximo de E . Os histogramas mostram então de forma explícita e agradável, as probabilidades de se obter um certo grau de emaranhamento (ou concorrência) para dado ensemble que se deseje estudar em certos limites da diferença de energia.

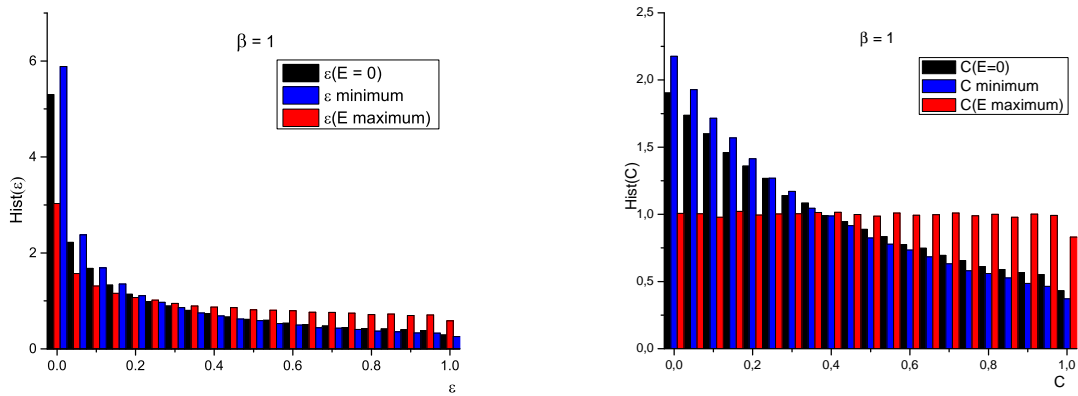


Figura 4.4: Histogramas do emaranhamento (esquerda) e da concorrência (direita) para valores de interesse nas curvas da figura (4.2) para o ensemble ortogonal

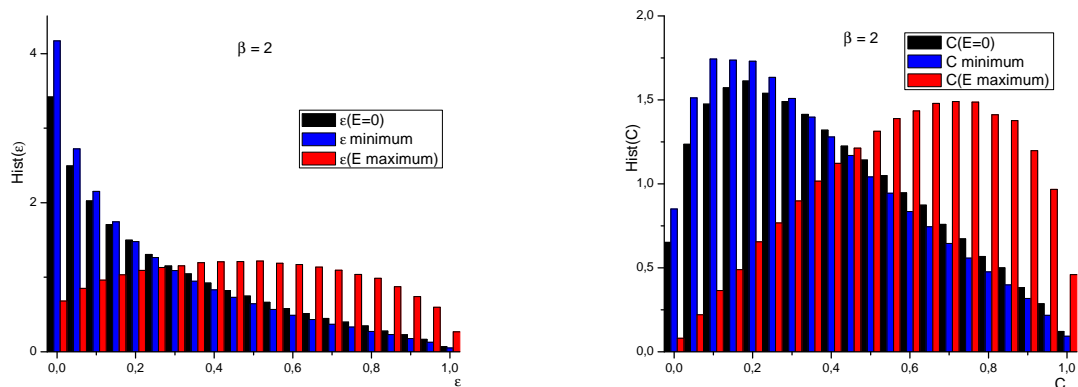


Figura 4.5: Histogramas do emaranhamento (esquerda) e da concorrência (direita) para valores de interesse nas curvas da figura (4.2) para o ensemble unitário

Um resultado interessante obtido através desse estudo foi o comportamento das distribuições do emaranhamento e da concorrência que, apesar de ter curvas de valores médio semelhantes, se

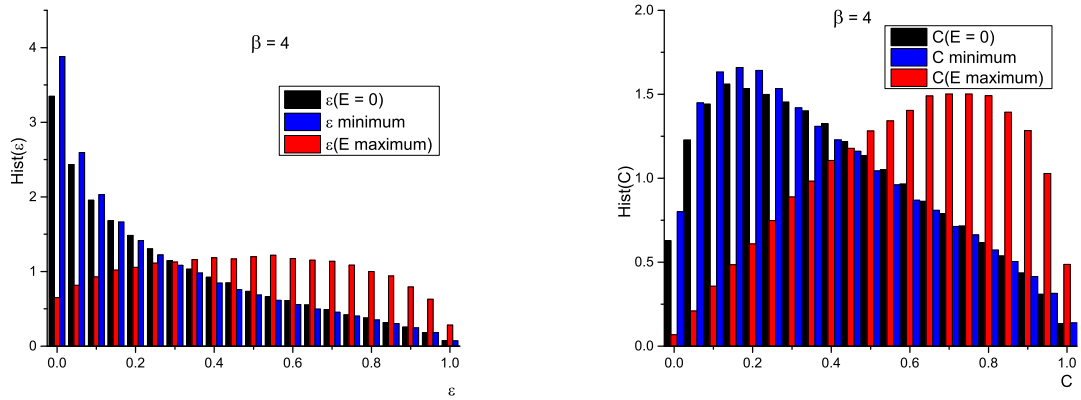


Figura 4.6: Histogramas do emaranhamento (esquerda) e da concorrência (direita) para valores de interesse nas curvas da figura (4.2) para o ensemble simplético

mostram pouco parecidas nos pontos de interesse expostos nos histogramas. Podemos observar pelos histogramas das figuras (4.4) (4.5) e (4.6) que em nenhum ensemble a distribuição da concorrência se assemelha à distribuição do emaranhamento.

Os histogramas de $\beta = 1$ e $\beta = 2$ para $E = 0$ conseguem recuperar os resultados obtidos em [48], o que indica a validade das simulações realizadas. A validade dos histogramas obtidos implica num aumento na produção de pares de Bell para um aumento de energia, o que torna a utilização destes sistemas mais atraente. No entanto ainda é necessário uma investigação mais a fundo com o objetivo de determinar a validade dos resultados, o que será feito posteriormente a apresentação deste trabalho.

Capítulo 5

Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho estudamos o transporte quântico para um ponto quântico caótico aberto com quatro canais. Exploramos a teoria de matrizes aleatórias visando como e quando utilizar certos formalismos para representar um dado sistema mesoscópico para certas condições iniciais. Fomos um pouco mais a fundo na investigação do caso específico estudado de maneira a sanar dúvidas conceituais.

Desenvolvemos o formalismo de Landauer para a condutância assim como fizemos uma breve introdução ao emaranhamento de formação de Wooters e do modelo de geração de emaranhamento de Beenakker. Através da compreensão destes sistemas foi possível realizar simulações numéricas cujos resultados foram comentados neste trabalho.

Analisando o trabalho como um todo, é possível afirmar que este trabalho cumpre o seu objetivo no sentido de oferecer uma base para o estudo de transporte quântico em casos mais complexos. O estudo de transporte quântico requer um leque de conhecimentos bastante diversificado que vai de conceitos de mecânica quântica a programação direcionada à simulação e acredito que esta dissertação conseguiu tocar um pouco em cada ponto.

Quanto às perspectivas, primeiramente há um interesse em continuar o estudo das questões relacionadas à geração de emaranhamento que foram deixadas em aberto. Além disso, com a base desenvolvida na criação deste trabalho, tenho como objetivo a continuação do trabalho desenvolvido mais voltado para a área da computação quântica.

Bibliografia

- [1] N. G. van Kampen. L. PB1, P. Szkpfalus (Eds.), Statistical Physics, Proc. of Int. Conf. . Budapest, Amsterdam: North-Holland. Kobayashi. 1976
- [2] Y. Murayama. Mesoscopic Systems: Fundamentals and Applications. Wiley-VCH. 2001.
- [3] H. D. Young, R. A. Freedman, A. L. Ford. Sears and Zemansky's University Physics: with Modern Physics 13th Edition. Addison-Wesley. 2012
- [4] S. Datta. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [5] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen Phys. Rev. **47**, 777 (1935)
- [6] E. Schrödinger (1935). Discussion of Probability Relations between Separated Systems. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 31, pp 555-563
- [7] J. S. Bell. On the Eintein Podolsky Rosen Paradox. Physics Vol. 1, No. 3, pp. 195-200 (1964)
- [8] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, W. K. Wootters. Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996)
- [9] M. A. Nielsen, I. L. Chuang. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition. Cambridge University Press New York, NY, USA, 2011.
- [10] E. Wigner. Characteristic Vectors of Bordered Matrices With Infinite Dimensions. Annals of mathematics. vol.62 iss.3 p.548-564, 1955.
- [11] E. Wigner. Characteristics Vectors of Bordered Matrices with Infinite Dimensions II. Annals of Mathematics, Second Series, Vol. 65, No. 2 p. 203-207 1957.
- [12] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. Rev. Mod. Phys. **69**, 731, 1997.

- [13] C. E. Porter. *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations. A Collection of Reprints and Original Papers. With an Introductory Review by Charles E. Porter.* Academic Press; 1st edition. 1965
- [14] F.J. Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. *J.Math.Phys.* **3**:157 1962
- [15] P. A. Mello, P. Pereyra, N. Kumar. Macroscopic approach to multichannel disordered conductors. *Annals of Physics* **181**, 290-317, 1988.
- [16] Th. Martin, R. Landauer. Wave-packet approach to noise in multichannel mesoscopic systems. *Physical Review B* **45**,1742. 1992
- [17] K.B. Efetov. Supersymmetry and theory of disordered metals. *Adv. Physics*, **32**,53. 1983.
- [18] J. T. Edwards, D. J. Thouless. Numerical studies of localization in disordered systems. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, Vol. 5. 1972
- [19] A. Altland, Y. Gefen, G. Montambaux. What is the Thouless Energy for Ballistic Systems. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1130. 1996
- [20] N. Argaman, Y. Imry, U.Smilansky. Semiclassical analysis of spectral correlations in mesoscopic systems. *Phys. Rev. B* **47**,4440. 1993
- [21] R. A. Jalabert, J. -L. Pichard, C. W. J. Beenakker. Long-Range Energy Level Interaction in Small Metallic Particles. *Europhys. Lett.* **24**,1. 1993
- [22] H. U. Baranger, P. A. Mello. Mesoscopic Transport Through Chaotic Cavities: A Random S-Matrix Theory Approach. *Phys. Rev. Letters* **73**,142. 1994
- [23] R. A. Jalabert, J. -L. Pichard, C. W. J. Beenakker. Universal Quantum Signatures of Chaos in Ballistic Transport. *Europhys. Lett* **27**,255. 1994
- [24] K. A. Muttalib, J. -L. Pichard. A. D. Stone. Random-Matrix Theory and Universal Statistics for Disordered Quantum Conductors. *Phys. Rev. Lett.* **59**,2475. 1987
- [25] J.-L. Pichard, N. Zanon, Y. Imry, A. D. Stone. Theory of random multiplicative transfer matrices and its implications for quantum transport. *J. Phys.* **51**,587. 1990
- [26] C. W. J. Beenakker, B. Rejaei. Nonlogarithmic Repulsion of Transmission Eigenvalues in a Disordered Wire. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3689. 1993
- [27] C. W. J. Beenakker, B. Rejaei. Exact solution for the distribution of transmission eigenvalues in a disordered wire and comparison with random-matrix theory. *Phys. Rev. B* **49**,7499 .1994

- [28] R. Blümel and U. Smilansky. Random-matrix description of chaotic scattering: Semiclassical approach. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 241. 1990.
- [29] M. Hamermesh. *Group Theory and its Applications to Physical Problems* (Addison-Wesley, Reading, MA). 1962
- [30] F. J. Dyson. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I. *J. Math. Phys.* **3**,140. 1962.
- [31] P. A. Mello, P. Pereyra, T. H. Seligman. Information theory and statistical nuclear reactions. I. General theory and applications to few-channel problems. *Annals of Physics.* **161**,254. 1985.
- [32] H. U. Baranger, P. A. Mello. Short paths and information theory in quantum chaotic scattering: transport through quantum dots. *Europhys. Lett.* **33**,465. 1996.
- [33] L. K. Hua. *Harmonic Analysis of Functions of Several Complex Variables in the Classical Domains* (American Mathematical Society, Providence). 1963
- [34] J. J. M. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller, M. R. Zirnbauer. Grassmann Integration in Stochastic Quantum Physics: The Case of Coumpound-Nucleus Scattering. *Phys. Rep.*, **129**:367, 1985.
- [35] J. G. S. Ramos. Modelo sigma não linear supersimétrico: aplicações em nanoestruturas caóticas 2010. 200 f. Tese (Doutorado em Física). Universidade Federal de Pernambuco, Recife.
- [36] P. W. Brouwer. Generalized circular ensemble of scattering matrices for a chaotic cavity with nonideal leads. *Phys. Rev. B.* **51**,23. 1995
- [37] P. F. Bagwell, T. P. Orlando. Landauer's conductance formula and its generalization to finite voltages. *Phys. Rev. B* **40**, 1456. 1989.
- [38] T. Ericson, T. Mayer-Kuckuk. Fluctuations In Nuclear Reactions. *Annu. Rev. Nucl. Sci.* **16**, 183. 1966.
- [39] I. H. Chan, R. M. Clarke, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard. Ballistic Conductance Fluctuations in Shape Space. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3876. 1995
- [40] V. Weisskopf. Statistics and Nuclear Reactions. *Phys. Rev.* **52**, 295. 1937.
- [41] Y. Alhassid. The statistical theory of quantum dots. *Reviews of Modern Physics*, Vol.72(4). 2000.

- [42] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Physical Review B*, **31**:6207, 1985
- [43] R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, **223:231**,1957
- [44] R. Landauer. Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance *Journal of Physics: Condensed Matter*, Volume 1, Number 43
- [45] C. W. J. Beenakker, C. Emary, M. Kindermann, and J. L. van Velsen. Proposal for production and detection of entangled electron-hole pairs in a degenerate electron gas *Phys. Rev. Lett.* 91, 147901. 2003
- [46] C. W. J. Beenakker, M. Kindermann, C. M. Marcus, A. Yacoby. Entanglement production in a chaotic quantum dot. *Fundamental Problems of Mesoscopic Physics: Interactions and Decoherence*, edited by I.V. Lerner, B.L. Altshuler, and Y. Gefen, NATO Science Series II. Vol. 154 (Kluwer, Dordrecht,) pp. 167,177. 2004
- [47] W. K. Wothers. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. *Phys Rev Letters*, **80**,10. 1998
- [48] V. A. Gopar, D. Frustaglia. Statistics of Orbital Entanglement Production in Quantum-Chaotic Dots. *Phys. Rev. B* 77, 153403. 2008