



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

**FORMULAÇÃO VIA KWANT DO TRANSPORTE ELETRÔNICO EM
CAVIDADES MESOSCÓPICAS CAÓTICAS CONECTADAS A DOIS
GUIAS: OS CASOS COM GUIAS IDEAIS E COM UM DOS GUIAS NÃO
IDEAL**

Edivan Amancio da Silva

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

Fevereiro de 2023

Universidade Federal Rural de Pernambuco

Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação

Departamento de Física

Edivan Amancio da Silva

**FORMULAÇÃO VIA KWANT DO TRANSPORTE ELETRÔNICO EM
CAVIDADES MESOSCÓPICAS CAÓTICAS CONECTADAS A DOIS
GUIAS: OS CASOS COM GUIAS IDEAIS E COM UM DOS GUIAS NÃO
IDEAL**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa

Coorientador: Dr. Nathan Lima Pessoa

Recife - PE

Fevereiro de 2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal Rural de Pernambuco
Sistema Integrado de Bibliotecas
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

S586f

Silva, Edivan Amancio da

Formulação via kwan do transporte eletrônico em cavidades mesoscópicas caóticas conectadas a dois guias: os casos com guias ideais e com um dos guias não ideal / Edivan Amancio da Silva. - 2023.
79 f. : il.

Orientador: Anderson Luiz da Rocha e Barbosa.

Coorientador: Nathan Lima Pessoa.

Inclui referências.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, 2023.

1. Cavidades mesoscópicas caóticas. 2. Transporte eletrônico. 3. Kwan. 4. Teoria de matrizes aleatórias . 5. Guias não ideais. I. Barbosa, Anderson Luiz da Rocha e, orient. II. Pessoa, Nathan Lima, coorient. III. Título

CDD 621

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**FORMULAÇÃO VIA KWANT DO TRANSPORTE ELETRÔNICO EM CAVIDADES
MESOSCÓPICAS CAÓTICAS CONECTADAS A DOIS GUIAS: OS CASOS COM
GUIAS IDEAIS E COM UM DOS GUIAS NÃO IDEAL**

Edivan Amancio da Silva

Dissertação julgada adequada para obtenção
do título de mestre em Física, defendida e
aprovada por unanimidade em 10/02/2023
pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
SEDE - UFRPE

Coorientador:

Prof. Dr. Nathan Lima Pessoa
CENAPESQ - UFRPE

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Francisco Assis Gois de Almeida
SEDE - UFS

Prof. Dr. Antônio de Padua Santos
SEDE - UFRPE

“ Que darei ao Senhor por todos os benefícios que me tem feito?”

(Salmos 116:12)

Dedico à minha filha amada Olívia que em breve estará conosco e tornará nossas vidas mais felizes, à minha esposa Andressa Kelly por sempre estar comigo em todo o tempo e, aos meus pais José Quintino e Raimunda Amancio que foram umas das fontes para as minhas inspirações na realização desse trabalho. Amo vocês!

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus que me conduziu até aqui onde estou hoje e tudo o que sou;

À minha família, em especial a minha mãe Raimunda Amancio e ao meu pai José Quintino, por todo apoio, paciência, compreensão, incentivo e amor. Também agradeço ao meu irmão Eduardo Amancio, por seu amor, apoio e cuidado;

À minha esposa Andressa Kelly o amor de minha vida, um presente enviado por Deus para ser minha companheira, amiga, confidente e parceira por toda vida, me incentivando, apoiando, aconselhando, animando, trocando ideais e dividindo sonhos de projetos futuros. Obrigado por me conceder o dom de ser papai de uma princesa linda chamada Olívia (Liv) que está por vir. Também agradeço aos meus sogros pelo carinho, respeito e amor demonstrados a mim e a minha família.

Ao meu orientador Anderson Luiz, por ter aceitado o desafio de me orientar ao longo deste curso, pois foi graças à sua atenção, paciência e dedicação sem igual, que resolvi não desistir. Agradeço também por ele ter sempre respeitado o tempo do meu processo de formação e por não ter desistido de mim ao longo deste trabalho. Obrigado pelo seu exemplo, dedicação e ensinamentos, seguirei seu modelo de Professor na minha vida profissional;

Ao meu coorientador Nathan Pessoa, por esclarecer minhas dúvidas e também por toda paciência em nossas conversas, que contribuíram direta e indiretamente nesta fase de pesquisa. Gratidão também pela sua atenção e dedicação ao processo de supervisão desse trabalho.

Aos colegas de curso: Fernando Brito, Willams Lins, Marcos Coelho e Maylson, por todas as contribuições (mesmo que virtuais) durante esses dois anos. Também aos que não mediram esforços em nos ajudar: Diego Bruno (UFRPE — pela ajuda com Kwant), Luciano (UFPE — pela ajuda na programação em Python), Tiago Verçosa (por várias dicas com Kwant e Python) e todos os outros que não citei mas estão guardados no lado esquerdo do peito.

Aos professores que estiveram presente durante o mestrado e que contribuíram forte-

mente para minha formação acadêmica: Prof. Dr. Adalto José, Prof. Dr. Antonio Romaguera, Prof. Dr. Antônio de Pádua, Prof. Dr. Jonas, Prof. Dra. Viviane Moraes e ao Prof. Dr. Fernando Moraes.

Agradeço de coração ao meu amigo Mauri Alcântara, pela ajuda com a leitura e tradução de muitos artigos na língua inglesa.

Agradeço também, em especial ao Santosh Kumar, Professor do Departamento de Física da Universidade Shiv Nadar , Gautum Buddha Nagar, Uttar Pradesh - India , por sua presteza, cooperação e ajuda em sanar algumas dúvidas (mesmo que via e-mails) relacionadas com simulações computacionais em Kwant.

A Fundação de Amparo à Pesquisa e ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Pernambuco – FACEPE pelo suporte financeiro, ainda que por poucos meses, concedido pelo edital N° 11/2020, solicitação - Processo n° IBPG - 1057-1.05/20.

Resumo

A abordagem de Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA) tem sido bastante frutífera na investigação estatística do transporte quântico em cavidades mesoscópicas caóticas, tendo levado a várias previsões intrigantes ao longo dos anos. A aplicação da técnica da TMA a fenômenos de transporte quântico consiste em modelar uma cavidade mesoscópica como uma região de espalhamento quântico caótica acoplada a guias que a conectam a reservatórios de elétrons. Neste trabalho, usamos Kwant, um pacote baseado na linguagem de programação Python, de código aberto, para investigar como as estatísticas das propriedades de transporte, em particular, da condutância de Landauer e da potência do ruído de disparo, de um ponto quântico conectado a dois guias mudam quando a simetria de reversão temporal é gradualmente quebrada por um campo magnético externo. Investigamos essas estatísticas de transporte em cavidades mesoscópicas caóticas conectadas a guias ideais e também em cavidades caóticas conectadas a um guia não ideal e um ideal. Geramos um conjunto de matrizes de espalhamento através do Kwant, com o número desejado de canais abertos nos guias conectados à cavidade, e calculamos as distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo. Observamos que os resultados obtidos a partir de simulações via Método Tight-Binding (que é usado no Kwant), realizadas sem ou com campo magnético, estão em concordância com as previsões da TMA para as classes de simetria do ensemble circular de Dyson estudadas neste trabalho.

Palavras-chave: Cavidades mesoscópicas caóticas. Transporte eletrônico. Guias não ideais. Kwant. Teoria de Matrizes Aleatórias.

Abstract

The random matrix theory (RMT) approach has been quite fruitful in the statistical investigation of quantum transport in chaotic mesoscopic cavities, and has led to several intriguing theoretical predictions over the years. The application of the RMT approach consists of modeling the mesoscopic cavity as a chaotic quantum scattering region coupled to leads that connect this region to electron reservoirs. In this work, we use Kwant, an open source Python based package, to investigate how the statistics of transport properties, in particular the Landauer conductance and the shotnoise power, of a quantum dot connected to two leads change when the time-reversal symmetry is gradually broken by an external magnetic field. We investigate these transport statistics in chaotic mesoscopic cavities connected to ideal leads, and also in chaotic cavities connected to one non-ideal and one ideal lead. We use Kwant to generate a set scattering matrices with the desired number of open channels in the leads connected to the cavity and compute the conductance and shotnoise power distributions. We observed that the results obtained from simulations based on the Tight-Binding Method (which is used in Kwant), carried out with or without a magnetic field, are in good agreement with the RMT predictions for the symmetry classes of the Dyson circular ensemble studied in this work.

Keywords: Chaotic mesoscopic cavities. Electronic transport. Nonideal Leads. Kwant. Random matrix theory.

Lista de Figuras

2.1	Escala de comprimentos característicos para transporte coerente a baixas temperaturas.	7
2.2	Representação do transporte balístico e difusivo	7
2.3	Ponto de contato quântico. O cinza claro representa um gás de elétrons bidimensional. O cinza escuro é a constrição impenetrável de largura L e abertura de tamanho W . Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada para que ocorra o transporte dos elétrons da esquerda para a direita.	8
2.4	Modelo de ponto de contato quântico com guia de ondas conectado a dois reservatórios de elétrons, caracterizados por seus respectivos potenciais eletroquímicos, μ_1 e μ_2	8
2.5	Gráfico de E_n em função de k_x , conforme eq. (2.4). Quando $T = 0$, o potencial químico μ_i do reservatório i é igual à sua energia de Fermi E_F que corresponde à energia do elétron mais energético do reservatório. As linhas tracejadas representam as energias dos canais fechados. O gráfico ilustra o caso em que há três canais abertos.	10
2.6	Condutância em função da voltagem de <i>gate</i> em um contato quântico a 0,6 K (GaAs/AlGaAs). Quantização da condutância em um condutor balístico.	12
2.7	A figura mostra um condutor mesoscópico ligado idealmente a dois terminais, que têm dimensões maiores que o condutor. Uma vez que o condutor é submetido a uma diferença de potencial químico as cargas saem do terminal 1 e, ao encontrar o condutor, parte das cargas são transmitidas para o terminal 2 e partes são refletidas para o T.1.	14

2.8	Um condutor é ligado por contatos ideais a dois terminais, e existem 3 canais de propagação, $\{a_i\}$ e $\{b_i\}$ representam as amplitudes das ondas incidentes e as amplitudes das ondas que saem, respectivamente, do condutor. A matriz de espalhamento \mathbf{S} desse sistema é do tipo 3×3	17
2.9	Em (a), um ponto quântico construído sobre um GE-2D e em (b), sua visão clássica. O ponto quântico tem analogia clássica a uma cavidade na qual os elétrons são refletidos nas fronteiras, semelhante a uma mesa de bilhar. Neste ponto quântico a função de onda da partícula é descrita pela equação de Schrödinger.	22
2.10	A Figura mostra um ponto quântico híbrido com suas características básicas. Em (a) Micrografia eletrônica de um ponto quântico com interface Normal - Supercondutor- Normal e em (b), A imagem ampliada da heterojunção.	22
3.1	Cadeia monoatômica com átomos idênticos (vermelho), com seu respectivo potencial $v(\vec{r} - \vec{R}_i)$, igualmente espaçados por \vec{R}_i e, os termos de <i>hopping</i> t . . .	28
3.2	Rede em 1D no limite contínuo, sendo graficamente discretizado. Pode-se observar o aparecimento dos sítios quantizados e igualmente espaçados de a . .	29
3.3	Representação gráfica de redes em 1-D (A), 2-D (B) e 3-D (C). As energias localizadas nos sítios tem uma dependência de dimensionalidade. O mesmo não ocorre com a energia de salto $-t$, entre os sítios vizinhos, que está em todas as direções x, y, z	31
3.4	Sistemas caóticos usados para estudar as propriedades de transporte quântico: um quarto de estádio de Bunimovich (à esquerda) e um quarto de bilhar do Sinai (à direita). As setas apontam para os guias (em vermelho) conectados aos sistemas de bilhares.	39
3.5	Gráficos das distribuições da condutância para $B = 0$ para as seguintes combinações de canais abertos: a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$, c) $n = 1, m = 3$, d) $n = 2, m = 2$, e) $n = 2, m = 3$ e f) $n = 3, m = 3$. Os símbolos representam as simulações com Kwant e as curvas sólidas a TMA para $\beta = 1$	42
3.6	Gráficos das distribuições da potência do ruído de disparo para $B = 0$ para várias combinações de canais abertos a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$ e c) $n = 2, m = 2$. Os símbolos representam as simulações Kwant e as curvas sólidas a TMA para $\beta = 1$	43

3.7	Gráficos das distribuições da condutância para $B = 1 \times 10^{-3}$ para as seguintes combinações de canais abertos: a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$, c) $n = 1, m = 3$, d) $n = 2, m = 2$, e) $n = 2, m = 3$ e f) $n = 3, m = 3$. Os símbolos representam as simulações com Kwant e as curvas sólidas a TMA para $\beta = 2$	44
3.8	Gráficos das distribuições da potência do ruído de disparo para $B = 1 \times 10^{-3}$ para várias combinações de canais abertos: a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$ e c) $n = 2, m = 2$. Os símbolos representam as simulações Kwant e a curva sólida a TMA para $\beta = 2$	45
4.1	Esquema de uma cavidade caótica conectada a dois guias suportando n e m canais abertos. O guia não ideal à esquerda compreende uma barreira de potencial, enquanto o guia à direita é ideal, ou seja, sem barreira de tunelamento.	47
4.2	Gráficos da Função característica da condutância para a) $n = 2, m = 2, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,57$, b) $n = 3, m = 3, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,62, \tau_3 = 0,63$	51
4.3	Gráficos da Função característica da potência do ruído para a) $n = 2, m = 2, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,57$, b) $n = 3, m = 3, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,62, \tau_3 = 0,63$	53
4.4	Bilhares caóticos com uma barreira de potencial (no formato de uma fita retangular na cor verde) em um dos guias (superior). Na esquerda, temos o quarto do estádio de Bunimovich e à direita, o quarto de bilhar do Sinai. As setas apontam para os guias (em vermelho) conectados aos sistemas de bilhares.	54
4.5	Gráfico da média teórica da condutância e da média da simulação em função do potencial V na barreira para o caso $n = 1, m = 1$ e $\tau_1 = 0,44$. A linha vertical na cor laranja sinaliza o valor do potencial $V = 0,23$	55
4.6	Distribuições da condutância para várias combinações de n e m conforme indicado. Os valores de transparência usados nos gráficos são $\tau_1 = 0,44$ para (a) e (b) ; $\tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,57$ para (d), (e), (f) e $\tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,62, \tau_3 = 0,63$ para (g). Os símbolos representam as simulações Kwant e as curva sólidas os resultados analíticos da TMA.	57
4.7	Distribuições da potência do ruído de disparo para várias combinações de n e m conforme indicado. Os valores de transparência usados nos gráficos são os mesmos usados na Figura 4.6. Os símbolos representam as simulações Kwant e as curva sólidas os resultados analíticos da TMA.	58

Lista de Tabelas

2.1	Resumo da classificação de Dyson. Os ensembles são classificados pelo índice β dependendo da presença ou ausência de simetria de reversão temporal (SRT) e simetria de rotação de spin (SRS).	23
-----	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Sumário

Agradecimentos	V
Resumo	VII
Abstract	VIII
Lista de Figuras	XI
Lista de Tabelas	XII
1 Introdução	1
1.1 Breve introdução sobre os Capítulos	3
2 Revisão de Transporte Quântico e Teoria de Matrizes Aleatórias	4
2.1 Física Mesoscópica	4
2.1.1 Comprimentos característicos	5
2.1.2 Regime de Transporte	6
2.2 Ponto de Contato Quântico	8
2.3 Teoria de Landauer-Büttiker	13
2.4 Teoria do Espalhamento	15
2.4.1 Matriz de espalhamento	16
2.5 Teoria de Matrizes Aleatórias	21
2.5.1 Teoria de matrizes aleatórias para o ensemble circular de Dyson	23
3 Transporte eletrônico em cavidades mesoscópicas caóticas com guias ideais: uma análise via método Tight-Binding	27

3.1	Modelo Tight-Binding	27
3.1.1	Hamiltoniano Tight-Binding	28
3.1.2	Discretização do Hamiltoniano	28
3.2	Transporte eletrônico através de uma cavidade conectada por guias ideais . . .	31
3.2.1	Autovalores de transmissão e propriedades de transporte	32
3.2.2	Condutância	33
3.2.3	Potência do Ruído de Disparo	35
3.3	Kwant	37
3.3.1	Simulações via Kwant	38
3.4	Resultados Kwant e Previsões da TMA	40
3.4.1	SRT Preservada ($\beta = 1$)	40
3.4.2	SRT Quebrada ($\beta = 2$)	41
4	Transporte eletrônico em cavidades mesoscópicas caóticas com um guia ideal e um não ideal: uma análise via método Tight-Binding	46
4.1	Distribuição Conjunta dos Autovalores de Transmissão	47
4.2	Estatísticas da condutância e potência do ruído de disparo	48
4.2.1	Condutância	48
4.2.2	Potência do Ruído de Disparo	52
4.3	Simulações via Kwant	53
4.4	Resultados Kwant e Previsões da TMA	56
5	Conclusões e perspectivas	59
	Referências Bibliográficas	61

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos de transporte quântico em cavidades mesoscópicas caóticas têm sido estudados extensivamente por meio da abordagem da Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA) nas últimas três décadas [1, 2, 3]. Na presença de colisões elásticas em tais cavidades, a baixas temperaturas e tensões, a coerência da função de onda eletrônica é mantida e os observáveis de transporte mostram universalidade estatística, que é um dos principais aspectos que levam à aplicabilidade da TMA. Com a disponibilidade de técnicas experimentais sofisticadas, agora é possível fabricar dispositivos quânticos onde as previsões teóricas relativas aos observáveis de transporte de carga, incluindo as da TMA, podem ser efetivamente testadas. Neste trabalho, usamos Kwant [4], um pacote baseado na linguagem de programação Python, de código aberto, para investigar como as estatísticas das propriedades de transporte de um ponto quântico conectado a dois guias mudam quando a simetria de reversão temporal é gradualmente quebrada por um campo magnético. Além disso, também estudamos como essas estatísticas se comportam quando ao menos um dos guias ideais é substituído por um guia não ideal (contendo uma barreira de tunelamento). Essas são as nossas principais motivações para a realização do presente trabalho.

O transporte através de pontos quânticos é modelado considerando uma cavidade caótica conectada a guias que, por sua vez, são acoplados a reservatórios de elétrons. O mecanismo base de transporte através da cavidade é o de espalhamento. Devido à dependência complicada — no sentido de que não é fácil de estudar analiticamente — nos parâmetros iniciais das partículas incidentes (como energia e momento), no potencial espalhador e na geometria da cavidade, o espalhamento é, em geral, de natureza caótica [5]. Logo, é útil modelar a matriz de espalhamento S como uma matriz aleatória unitária (a unitariedade é um requisito necessário devido à conservação da carga, conforme será discutido no Capítulo 2). A ideia central da TMA

é modelar o operador relevante de um sistema físico como uma matriz aleatória. Existem duas abordagens para descrever a TMA do transporte em cavidade caótica: o do Hamiltoniano (\mathbf{H}) e o da Matriz de espalhamento (\mathbf{S}). Na abordagem Hamiltoniana [6], modela-se o hamiltoniano da cavidade mesoscópica caótica como uma matriz aleatória pertencente ao ensemble gaussiano e a matriz de espalhamento é derivada do hamiltoniano como uma função da energia de Fermi. Por outro lado, na abordagem da Matriz de espalhamento [7], modela-se diretamente a matriz \mathbf{S} fazendo uso do ensemble circular. Nessas duas abordagens, o hamiltoniano \mathbf{H} (ou a matriz \mathbf{S}), associado à região de espalhamento, é retirado de um ensemble adequado de matrizes aleatórias [1, 2]. As simetrias relevantes do sistema — a presença ou ausência de simetrias fundamentais (como invariância sob reversão temporal e rotação de spin, por exemplo) — ditam a dinâmica e colocam restrições na forma da matriz \mathbf{S} , que por sua vez afetam as estatísticas dos observáveis do sistema [1, 2].

Como as propriedades de transporte são, na maioria das vezes, estatísticas lineares de autovalores de transmissão, pode-se calcular suas estatísticas usando a densidade de probabilidade conjunta de autovalores de transmissão. A condutância média e a potência do ruído de disparo são conhecidos exatamente para $\beta = 1, 2$ [8]. Da mesma forma, a distribuição de probabilidade da condutância é conhecida exatamente quando o número de canais é pequeno [9]. Deve-se notar que enquanto a distribuição tende a se tornar altamente gaussiana à medida que o número de canais aumenta, é de interesse mais prático olhar para um número menor de canais porque as distribuições são não triviais (ou seja, diferentes de gaussianas).

A aplicação de um campo magnético quebra a simetria de reversão temporal do sistema. Dessa forma, para sistemas abertos, à medida que a simetria é quebrada gradualmente, a matriz de espalhamento que descreve a região caótica sofre uma transição de uma classe de simetria do ensemble ortogonal (EO) para outra classe, agora, o ensemble unitário (EU). Portanto, é interessante, não apenas do ponto de vista teórico, investigar essa transição e isso feito com sucesso por Pandey e Mehta [10] para o problema de transporte em sistemas desordenados. Esses resultados também foram testados experimentalmente e verificados numericamente. Um estudo teórico do crossover em bilhares quânticos foi feito por Berry e Robnik [11] e uma descrição numérica foi dada por Yan e Harris [12]. A estatística das propriedades de transporte do *crossover* foram estudadas por Kumar e Pandey [8] e eles deduziram a condutância média e a potência do ruído de disparo para o *crossover*. Eles também obtiveram a distribuição de probabilidade da condutância quando um dos guias contém exatamente um canal [9]. Recentemente, em 2020,

Kumar e Rohit [13] estudaram as distribuições da condutância e potência do ruído de disparo envolvendo essa transição em cavidades com guias ideais. E agora, em 2022, Kumar e Dheer [14], investigaram os mesmos observáveis físicos em cavidades mesoscópicas caóticas contendo um guia não ideal e outro ideal usando simulações numéricas de Monte Carlo.

Sendo assim, nosso trabalho consiste em estudar essas transições em cavidades mesoscópicas caóticas conectadas a guias ideais usando Kwant, e assim, reafirmar os resultados produzidos por Kumar e Rohit, os quais já são conhecidos e bem aceitos na literatura. Além disso, vamos promover uma extensão ao trabalho de Kumar e Dheer, agora, usando o método Tight-Binding (TB) para avaliar essas transições através de simulações numéricas com Kwant, algo até então, não conhecido na literatura existente.

1.1 Breve introdução sobre os Capítulos

Neste capítulo introdutório foi apresentada uma breve motivação a respeito do estudo de transporte eletrônico e TMA.

No capítulo 2 desta dissertação, iremos mostrar um breve resumo acerca do tema e como os comprimentos característicos são importantes para sistemas de nanoestruturas. Também apresentaremos o conceito de ponto quântico e sua relação com a quantização da condutância. Ainda no mesmo capítulo, veremos como a teoria de Landauer-Büttiker sobre transporte de cargas e spin se conecta com a TMA e ambas descrevem o transporte eletrônico através da matriz de espalhamento.

No capítulo 3, será apresentado o modelo TB, que é utilizado no Kwant. Também abordaremos as estatísticas das propriedades de transporte eletrônico para um ponto quântico com guias ideais. No mesmo capítulo, é apresentado Kwant que é a ferramenta computacional que usamos para testar os resultados da TMA e, por fim, mostramos os resultados Kwant e as previsões da TMA para cavidades mesoscópicas caóticas com guias ideais.

No capítulo 4, o transporte eletrônico em cavidades mesoscópicas caóticas conectadas a um guia não ideal e um ideal, é estudado. Iremos calcular as propriedades de transportes através do Kwant e compará-las com as previsões da TMA.

Finalizando a dissertação, no capítulo 5, apresentaremos as conclusões deste trabalho e perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão de Transporte Quântico e Teoria de Matrizes Aleatórias

Neste capítulo, faremos uma breve revisão sobre os fenômenos de transporte eletrônico e apresentaremos os conceitos básicos da Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA). Tomaremos por base as referências [15, 16].

2.1 Física Mesoscópica

O campo da Física mesoscópica surgiu a partir da década de 1980, com experimentos eletrônicos em dispositivos bem pequenos [15]. Ela pode ser entendida como o ramo da Física que estuda sistemas que estão na interface entre o quântico e o clássico, ou seja, ela se encontra no meio dos dois regimes. Uma das formas de caracterizar a Física mesoscópica é através do tamanho característico do objeto a ser estudado. O comprimento característico de tal objeto deve estar entre o mundo microscópico e o macroscópico. Essa escala intermediária pode ser descrita como o tamanho de uma quantidade de átomos que, juntos, têm dimensão da ordem de 10^2 nm a 10^3 nm, que correspondem, ao tamanho aproximado de um vírus e de uma bactéria, respectivamente [16]. É importante lembrar que no regime mesoscópico, determinados efeitos e propriedades quânticas como tunelamento, interferência e princípio de exclusão, por exemplo, ainda se fazem presentes.

2.1.1 Comprimentos característicos

Nesta seção vamos discutir uns dos conceitos mais importantes na física mesoscópica, que são as escalas de comprimento para a caracterização do transporte eletrônico. Dentre elas, temos:

1) **Comprimento de onda de Fermi** (λ_F): em um reservatório, nem todos os elétrons têm a mesma energia, ou são responsáveis por gerar corrente elétrica. Os elétrons responsáveis pelo transporte eletrônico são aqueles que estão próximos à energia de Fermi (ϵ_F), e o comprimento de onda de Fermi (λ_F) referente a esta energia é dado por

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{\kappa_F} = \frac{h}{\sqrt{2m\epsilon_F}} \quad (2.1)$$

onde κ_F é o numero de onda associado à energia de Fermi, m é a massa do elétron e h é a constante de Planck. Além do comprimento de onda de Fermi, podemos definir a velocidade de Fermi como

$$v_F = \frac{\hbar\kappa_F}{m} \quad (2.2)$$

2) **Livre Caminho médio** (ℓ_m): é o caminho que um elétron percorre antes de sofrer um espalhamento elástico, alterando o seu momento inicial (\vec{p}_0). Ao mudar o seu momento inicial, ele altera apenas a direção ou sentido do momento e preserva seu módulo, de modo que o momento após a colisão é

$$\vec{p} = -\vec{p}_0. \quad (2.3)$$

Podemos, portanto, definir o livre caminho medio (ℓ_m) da seguinte forma

$$\ell_m = v_F \tau_m \quad (2.4)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi e τ_m é o tempo médio entre sucessivas colisões do elétron, também chamado de tempo de relaxação do momento do elétron, o qual está associado ao tempo de colisão τ_c da seguinte forma

$$\tau_m = \frac{\tau_c}{\alpha_m} \quad (2.5)$$

onde o fator α_m determina a “eficácia” de uma colisão individual.

3) **Comprimento de coerência de fase** (ℓ_ϕ): o comprimento de coerência de fase (ℓ_ϕ)

é definido como a distância média que os elétrons viajam antes de perderem a informação da fase de sua função de onda, ou seja, antes que sua fase inicial seja destruída ou modificada. Assim como o momento de uma partícula pode ser mudado por processos de espalhamento, a fase de uma onda pode mudar por meio de interações com campos ou partículas. A coerência é uma medida da correlação entre as fases medidas em diferentes pontos de uma onda e, portanto, o comprimento de coerência de fase pode ser escrito como

$$\ell_\phi = \sqrt{D\tau_\phi} \quad (2.6)$$

em que $D = v_F^2 \tau_m / 2$ é chamado de coeficiente de difusão, e τ_ϕ é o tempo de relaxação de fase que relaciona o tempo máximo que o elétron percorre sem que sua fase inicial seja destruída ou modificada [15].

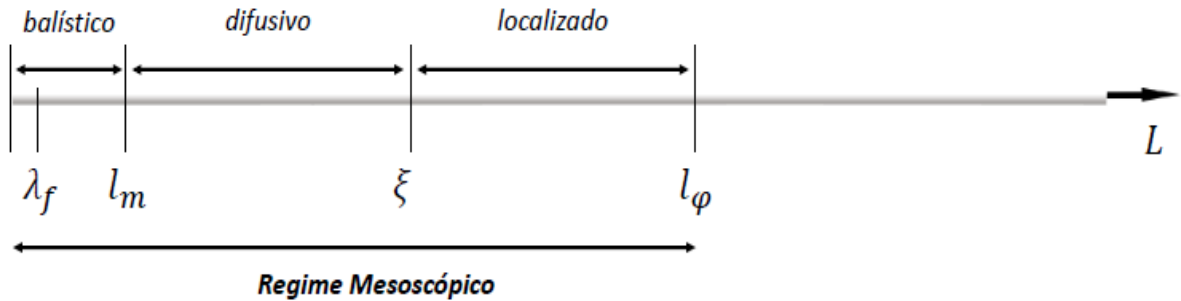
4) **Comprimento de localização (ξ):** o comprimento de localização relaciona-se com o alcance da função de onda do elétron. A função de onda se estende ao longo de toda a amostra se a amostra for um bom condutor (metal, por exemplo). Por outro lado, caso a amostra seja um mau condutor (um isolante), a função de onda fica localizada, decaindo exponencialmente a partir desse ponto, de tal forma que só poderemos encontrar o elétron numa região confinada, região esta chamada de centro de localização.

2.1.2 Regime de Transporte

Os regimes de transporte podem ser diferenciados por meio da relação entre o comprimento da amostra (L) e os comprimentos característicos. Por meio dessa identificação, podemos identificar como os elétrons são deslocados através de um sistema. De acordo com o comprimento (L) característico do condutor em questão, existem três tipos de regimes de transporte: regime balístico, regime difusivo e regime localizado, conforme Figura 2.1. A seguir descreveremos cada um deles

- **Regime Balístico ($L < \ell_m$):** Se o comprimento L estiver entre o comprimento de onda de Fermi (λ_F) e o livre caminho médio (ℓ_m), dizemos que o regime em que o transporte eletrônico acontece é balístico. O elétron quase não sofre colisão ao atravessar o dispositivo. Um exemplo é o transporte eletrônico que ocorre num ponto quântico. Na figura 2.2(a), ilustramos graficamente o transporte balístico de uma partícula.

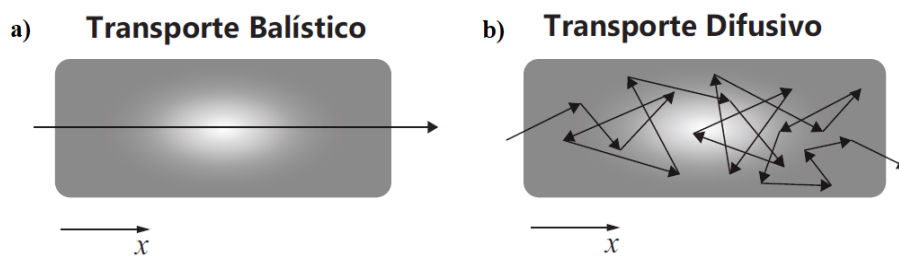
Figura 2.1: Escala de comprimentos característicos para transporte coerente a baixas temperaturas.



Fonte: Ref. [17].

- **Regime difusivo** ($l_m \leq L < \xi$): Se o comprimento L estiver entre livre caminho médio (l_m) e o comprimento de localização ξ ($l_m \leq L < \xi$), dizemos que o regime em que o transporte eletrônico ocorre é um regime difusivo. O elétron sofre inúmeras colisões elásticas, mas não perde a coerência. Isso é característico de fios quânticos desordenados. A figura 2.2(b) mostra graficamente como seria o transporte difusivo de uma partícula.
- **Regime localizado** ($\xi \leq L < l_\phi$): Se o comprimento L estiver entre o comprimento de localização ξ e o comprimento de coerência de fase l_ϕ ($\xi \leq L < l_\phi$), dizemos que o regime é localizado. Nesse regime, as funções de onda eletrônicas ficam localizadas e o elétron apresenta uma probabilidade menor de percorrer toda a amostra, de modo que o dispositivo se comporta como um isolante.

Figura 2.2: Representação do transporte balístico e difusivo

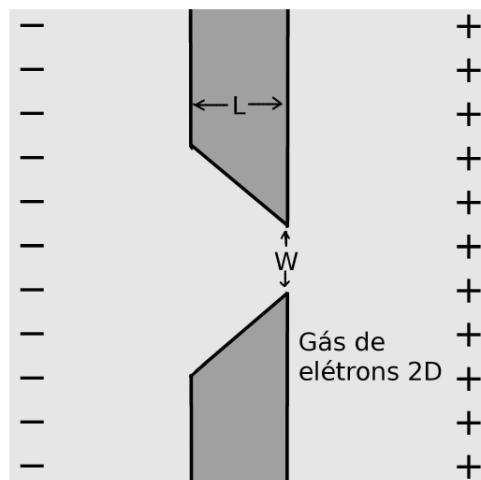


Fonte: Adaptada da Ref. [17].

2.2 Ponto de Contato Quântico

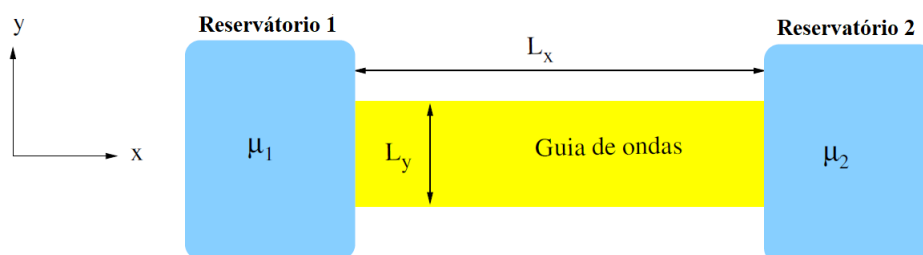
O sistema mesoscópico mais simples é o ponto de contato quântico, o qual está ilustrado na figura 2.3. Ele consiste de uma constrição de largura L e abertura de tamanho W , a qual divide duas regiões condutoras onde o transporte é praticamente balístico: $L \leq \ell_m$. Podemos estudar o ponto de contato quântico por uma modelagem análoga a guias de onda bidimensional, que representa a constrição, conectada a dois reservatórios de elétrons, os quais representam os contatos [18], como visto na figura 2.4. Entende-se por reservatório um elemento macroscópico em equilíbrio termodinâmico conectado ao sistema mesoscópico que envia e/ou recebe partículas [19].

Figura 2.3: Ponto de contato quântico. O cinza claro representa um gás de elétrons bidimensional. O cinza escuro é a constrição impenetrável de largura L e abertura de tamanho W . Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada para que ocorra o transporte dos elétrons da esquerda para a direita.



Fonte: Ref. [19].

Figura 2.4: Modelo de ponto de contato quântico com guia de ondas conectado a dois reservatórios de elétrons, caracterizados por seus respectivos potenciais eletroquímicos, μ_1 e μ_2 .



Fonte: Adaptado da Ref. [20]

Através do estudo clássico, é bem conhecido que, para um condutor ideal de comprimento L e largura W feito de um material de condutividade σ , a lei de Ohm

$$G = \frac{1}{R} = \frac{\sigma W}{L}, \quad (2.7)$$

prevê que a resistência R se aproximará de zero (e, conseqüentemente, a condutância G aumentará infinitamente) à medida que o comprimento L for reduzido a zero. Porém, se o sistema tiver alguma de suas dimensões reduzidas à ordem do livre caminho médio (ℓ_m), o espalhamento dos elétrons torna-se inevitável, o que contribui para manter a condutância finita. Se considerarmos que não existem interações entre os elétrons, podemos tratar a região condutora como um gás de elétrons bidimensional. Dessa forma, com a temperatura absoluta nula e sem reflexão no guia de ondas, os elétrons terão energia no intervalo $\mu_1 < E < \mu_2$, onde μ_i corresponde ao potencial químico do reservatório i , sendo igual à energia de Fermi do respectivo reservatório para $T = 0$ [15].

No equilíbrio, os estados disponíveis no condutor são preenchidos de acordo com a distribuição de Fermi-Dirac:

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu)/k_B T]} \quad (2.8)$$

Para baixas temperaturas, aproximamos a distribuição por seu valor à temperatura nula:

$$f_0(E) = \Theta(\mu - E) = \begin{cases} 0, & \text{se } \mu < E \\ 1, & \text{se } \mu > E \end{cases} \quad (2.9)$$

onde Θ é a função unitária de Heaviside.

Para o ponto quântico da figura 2.4, iremos adotar as coordenadas x e y nas direções horizontal e vertical, respectivamente, de modo que os elétrons podem percorrer livremente o guia na direção \hat{x} com contínuos níveis de energia ($L_x \gg \lambda_F$), enquanto que na direção \hat{y} , eles estão confinados, apresentando níveis quantizados de energia ou sub-bandas (para um sistema cuja energia é contínua em função de uma variável e quantizada em função de outra, possuindo estados quantizados na fixação da primeira variável, os níveis quantizados são chamados de sub-bandas). Então, devido às condições de contorno, um elétron neste sistema apresenta a

função de onda:

$$\Psi(x, y) = \phi(y)e^{ik_x x}, \quad (2.10)$$

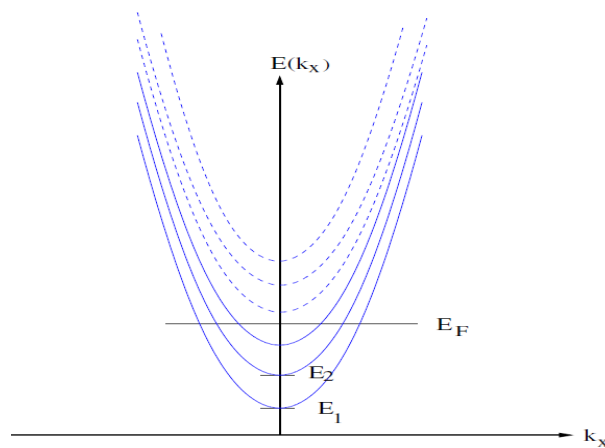
a qual fornece os respectivos valores de energia:

$$E_n(k_x) = E_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \quad (2.11)$$

onde ϕ é uma função periódica, k_x é a componente do vetor de onda na direção \hat{x} e E_n representa o subnível de energia que correspondem à n -ésima sub-banda na direção \hat{y} .

Na figura 2.5, são mostrados os níveis de energia das sub-bandas em função de k_x . Assumimos, então, que o elétron não pode ser transmitido através de um certo canal se sua energia for menor que a energia da sub-banda referente a esse canal. Os canais para os quais a energia é maior que a energia do elétron mais energético são ditos proibidos ou fechados. (Note que, por simplicidade, estamos desconsiderando a probabilidade de tunelamento, uma vez que tal probabilidade é muito pequena). Por outro lado, chamamos de canais abertos aqueles que possuem energias menores ou iguais à do elétron mais energético incidente.

Figura 2.5: Gráfico de E_n em função de k_x , conforme eq. (2.4). Quando $T = 0$, o potencial químico μ_i do reservatório i é igual à sua energia de Fermi E_F que corresponde à energia do elétron mais energético do reservatório. As linhas tracejadas representam as energias dos canais fechados. O gráfico ilustra o caso em que há três canais abertos.



Fonte: Ref.[20].

Esses elétrons possuem densidade de estados dada por $\rho(E)$, tal que

$$\rho(E)dE = \frac{\text{Número de estados entre } E \text{ e } E + dE}{\text{Comprimento total}} = u(k_x)dk_x, \quad (2.12)$$

em que o comprimento total é L_x e o intervalo de energia entre E e $E + dE$ compreende os números de onda entre k_x e $k_x + dk_x$. O número de estados atrelados a uma variação dk_x do número de onda é obtido dividindo-se este comprimento no espaço k_x pelo comprimento $\Delta k_x = 2\pi/L_x$ que cada estado ocupa:

$$u(k_x)dk_x = \frac{s}{L_x} \frac{dk_x}{\frac{2\pi}{L_x}} = \frac{s}{\pi} dk_x, \quad (2.13)$$

em que $s = 2$ é o fator de degenerescência do spin. Como $E = \hbar^2 k_x^2 / 2m$, temos

$$dk_x = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{dE}{2\sqrt{E}} = \frac{dE}{2} \frac{2m}{\hbar^2 k_x} = \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right)^{-1} dE, \quad (2.14)$$

de modo que substituindo a equação acima nas Eqs.(2.12) e (2.13), obtemos a densidade de estados eletrônicos:

$$\rho = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right)^{-1}. \quad (2.15)$$

Além disso, convém salientar que para os contatos balísticos mostrados na figura 2.4, os estados positivos de k_x , que denotaremos por $+k_x$, são ocupados apenas por elétrons advindos do reservatório 1, de modo que sua energia máxima seja a do potencial químico do reservatório 1 (μ_1), enquanto os estados $-k_x$ são ocupados apenas por elétrons do reservatório 2 até que a energia máxima seja o potencial químico do reservatório 2 (μ_2).

Sabemos que um gás de elétrons uniforme com n elétrons por unidade de comprimento movendo-se a uma velocidade v transporta uma corrente igual a env . Sendo assim, através da distribuição de Fermi-Dirac (2.9) e da densidade de estados (2.15), podemos calcular a contribuição da n -ésima sub-banda na corrente advinda do reservatório 1 transportada pelos estados $+k_x$, da seguinte forma:

$$I_n^+ = e \int_{E_n}^{\infty} v(E) \rho(E) f_0(E) dE = e \int_{E_n}^{\mu_1} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)^{-1} dE = \frac{2e}{h} (\mu_1 - E_n). \quad (2.16)$$

Analogamente, a contribuição da n -ésima sub-banda na corrente advinda do reservatório 2, com estados $-k_x$, será:

$$I_n^- = e \int_{E_n}^{\infty} v(E) \rho(E) f_0(E) dE = e \int_{E_n}^{\mu_2} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)^{-1} dE = \frac{2e}{h} (\mu_2 - E_n). \quad (2.17)$$

A corrente resultante vem do somatório de todas as diferentes contribuições sobre todos os N canais abertos. Logo,

$$I = \sum_{n=1}^N \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) = N \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2). \quad (2.18)$$

Como $\mu = eV$, em que V é a diferença de potencial entre os reservatórios, a equação anterior pode ser reescrita na forma:

$$I = N \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2). \quad (2.19)$$

Agora podemos obter a condutância de um condutor balístico:

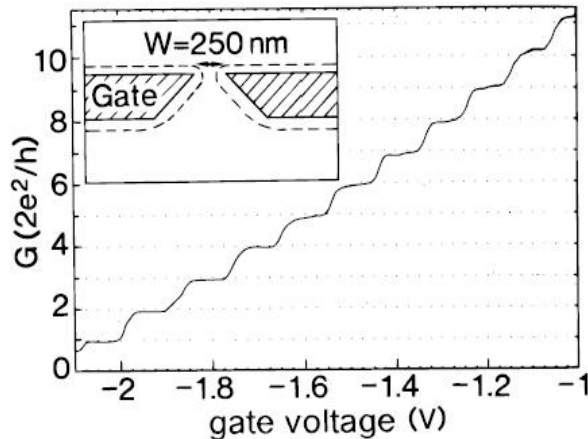
$$G = \frac{2e^2}{h} N = G_0 N, \quad (2.20)$$

onde $G_0 = 2e^2/h \approx 7.7480917 \times 10^{-5} \Omega^{-1}$ é o quantum de condutância e N o número inteiro de canais abertos que está relacionado com a largura W na forma

$$N = \text{int} \left(\frac{k_F W}{\pi} \right). \quad (2.21)$$

Com isso, percebemos que a condutância I/V do sistema é quantizada em termos de G_0 , como é mostrado na figura 2.6. O efeito da quantização da condutância foi primeiramente observado em heteroestruturas semicondutoras de GaAs e Al-GaAs nas referências [18, 21].

Figura 2.6: Condutância em função da voltagem de *gate* em um contato quântico a 0,6 K (GaAs/AlGaAs). Quantização da condutância em um condutor balístico.



Fonte: Ref. [18].

2.3 Teoria de Landauer-Büttiker

Nesta seção, vamos discutir a teoria de Landauer-Büttiker, a qual fornece uma explicação para a quantização da condutância vista no final da seção anterior. Para isso, seguiremos a referência [15]. No modelo em questão, o transporte eletrônico é balístico, assim, para um transporte desse tipo se faz necessário realizar três considerações de suma importância. São elas:

- i. o contato entre o terminal e o guia é ideal, então não existem reflexões entre os terminais e o contato, de modo que todas as partículas que saem do terminal entram no guia e seguem para o centro espalhador;
- ii. o condutor é balístico, portanto, não existem reflexões dentro do próprio condutor;
- iii. o transporte ocorre a baixas temperaturas, logo, todos os elétrons responsáveis pela corrente se encontram no chamado nível de Fermi.

Antes de realizarmos a dedução da fórmula de Landauer, faremos uma breve análise da figura 2.7 que ilustra o caso de um condutor conectado idealmente a dois terminais com potenciais eletroquímicos distintos μ_1 e μ_2 (com $\mu_1 > \mu_2$). Devido à diferença de potencial $\Delta\mu = \mu_1 - \mu_2$ entre eles, surgirá uma corrente elétrica do terminal 1 (T.1) para o terminal 2 (T.2). Sendo assim, parte da corrente que sai do T.1 para o T.2, rotulada por I_1^+ , ao encontrar um condutor, é transmitida para T.2, na forma I_2^+ , e a outra parcela dessa corrente é refletida para o T.1, chamada I_1^- . Em caso de condutores ideais, temos $I_1^- = 0$, contudo, sempre existirá uma probabilidade de transmissão T e uma probabilidade de reflexão R dos elétrons ao passar através de um condutor.

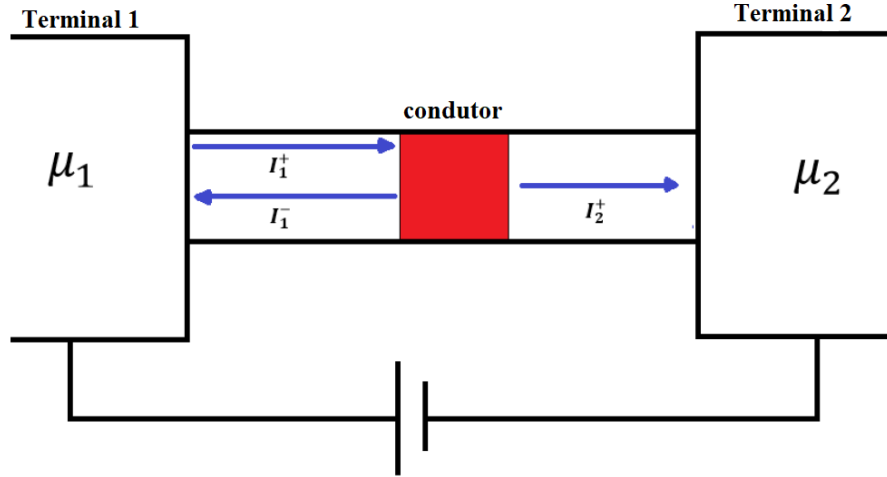
Podemos declarar, portanto, que a corrente que passa em cada terminal pode ser expressa por (veja Eq. (2.19))

$$I = G\Delta V, \quad (2.22)$$

onde pode-se escrever G em função do número de modos transversais (N) e da probabilidade de transmissão (T) ou reflexão ($R = 1 - T$) do elétron ao encontrar um condutor. Dessa forma, a equação da condutância pode ser escrita em função dos modos transversais e da probabilidade de transmissão na forma

$$G = \frac{2e^2}{h} NT, \quad (2.23)$$

Figura 2.7: A figura mostra um condutor mesoscópico ligado idealmente a dois terminais, que têm dimensões maiores que o condutor. Uma vez que o condutor é submetido a uma diferença de potencial químico as cargas saem do terminal 1 e, ao encontrar o condutor, parte das cargas são transmitidas para o terminal 2 e partes são refletidas para o T.1.



Fonte: Ref. [22].

e, sabendo que o transporte eletrônico está no nível de Fermi, então, $\lambda_F < W$, logo N é dado por

$$N = \text{int} \left(\frac{2W}{\lambda_F} \right). \quad (2.24)$$

Usando a relação entre potencial químico e tensão, $\mu_i = eV_i$, o fluxo líquido de corrente saindo do T.1 em direção ao T.2 pode ser escrito, utilizando as Eqs. (2.22) e (2.23), em função de μ do seguinte modo

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} N \Delta\mu, \quad (2.25)$$

em que $T = 1$ pois não existem reflexões entre os terminais e o guia, e $\Delta V = \Delta\mu/e$. Considerando o fator de transmissão (T), podemos dizer que a corrente que flui para o guia 2 é um percentual da corrente injetada no guia 1 e pode ser escrita como

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} NT \Delta\mu, \quad (2.26)$$

sendo, portanto, o percentual da corrente refletida no guia 1 dado por

$$I_1^- = \frac{2e}{h} N(1 - T) \Delta\mu. \quad (2.27)$$

Podemos interpretar o termo $(1 - T)$ na equação como a probabilidade de o elétron ser

refletido ao passar pelo condutor, uma vez que ao somar todas as probabilidades de ocorrer um evento, o resultado é 1. Dessa forma, como só existe a probabilidade T do elétron atravessar o condutor e a probabilidade dele ser refletido R , então, $T + R = 1$, o que resulta na relação entre R e T como sendo $R = 1 - T$ [22].

A corrente líquida I que passa pelo condutor é a diferença entre o fluxo incidente no guia 1 (ver Eq. (2.25)), e o fluxo refletido pelo condutor de volta para o guia 1 (ver Eq. (2.27)), que é igual ao fluxo transmitido através do condutor (ver Eq. (2.26)), ou seja,

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e}{h} NT \Delta\mu. \quad (2.28)$$

Ela depende exclusivamente da diferença de potencial químico ($\Delta\mu$) entre os terminais aos quais está conectado o condutor, da probabilidade de transmissão (T) e do número total de canais (N) que encontram-se abertos no guia.

A condutância do sistema é obtida dividindo-se a corrente que flui do guia 1 para o guia 2 (2.26), pela tensão aplicada ($\Delta V = \Delta\mu/e$), o que resulta em

$$G = \frac{Ie}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{2e^2}{h} NT. \quad (2.29)$$

Nesta equação o fator $2e^2/h$ é o chamado quantum de condutância. O que reflete o caráter quântico da mesma uma vez que, sendo N o número discreto de canais, ela pode ser expressa como um múltiplo desse fator de caráter quântico, conforme dito na seção anterior.

A equação (2.29) é conhecida como Fórmula de Landauer para múltiplos canais [15, 23] e relaciona a probabilidade de transmissão com a condutância para estruturas mesoscópicas. Ela também é escrita em termos dos autovalores de transmissão, conforme veremos ao longo desse trabalho.

2.4 Teoria do Espalhamento

O espalhamento de ondas é um tema que vem sendo estudado em várias áreas da física, desde sistemas complexos até sistemas de uma única partícula, o qual apresenta resultados exatos diferente dos sistemas complexos [24]. O espalhamento no transporte de elétrons é um tema bastante estudado ao longo dos anos, idealizado em guias de onda que ilustram os conceitos de transporte quântico, modelando experimentos concretos [16].

A amostra, ou cavidade espalhadora pode ser conectada aos guias de onda que, por sua vez, são acoplados aos reservatórios. Rolf Landauer observou a conexão entre a probabilidade de transmissão eletrônica através da amostra e o problema do espalhamento [25]. Nessa abordagem, as propriedades do transporte podem ser obtidas da matriz de espalhamento (matriz \mathbf{S}) do sistema. Na teoria do espalhamento, como veremos na seção a seguir, o centro espalhador é descrito por uma matriz \mathbf{S} que contém toda a informação para a teoria do transporte de Landauer-Büttiker [26, 27].

2.4.1 Matriz de espalhamento

Nesta subseção, mostraremos que as amplitudes de transmissão e reflexão são elementos de uma matriz, chamada de matriz de espalhamento do sistema. Novamente, seguiremos a referência [15].

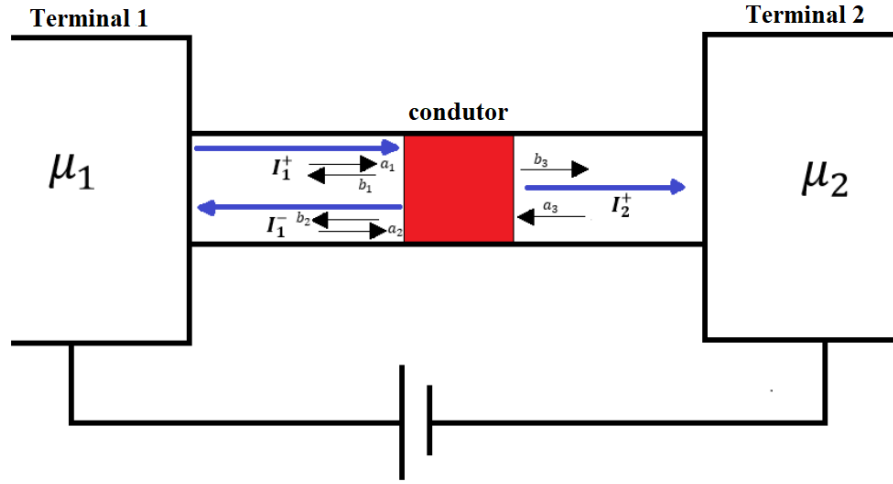
O transporte eletrônico através de condutores pode ser caracterizado pela matriz de espalhamento (ou matriz \mathbf{S}) do sistema. Ela relaciona as amplitudes das ondas que entram no condutor com as amplitudes das ondas que saem dele [15, 28]. Vamos iniciar com um exemplo físico de um transporte eletrônico igual ao que fizemos na seção anterior, contudo, faremos nossa análise tendo em vista que a matriz \mathbf{S} é a responsável por conectar as correntes de entrada e saída na cavidade. Para isso, consideramos na figura 2.8 um condutor conectado a dois terminais contendo três canais de propagação de onda. As amplitudes das ondas incidentes são representadas por $\{a_i\}$, em que a está relacionado a amplitude de entrada, e i representa em que canal a onda está se propagando. Assim, como temos três canais de propagação teremos, a_1 , a_2 e a_3 , e as amplitudes das ondas que saem do condutor são representadas por $\{b_i\}$, de modo que b_1 , b_2 e b_3 representam as amplitudes das ondas de saída do condutor [17, 22].

Para a representação ilustrada na figura 2.8, podemos relacionar as amplitudes das ondas de saída com as amplitudes das ondas incidentes como

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}, \quad (2.30)$$

em que s_{ij} são números que representam o espalhamento das ondas na cavidade.

Figura 2.8: Um condutor é ligado por contatos ideais a dois terminais, e existem 3 canais de propagação, $\{a_i\}$ e $\{b_i\}$ representam as amplitudes das ondas incidentes e as amplitudes das ondas que saem, respectivamente, do condutor. A matriz de espalhamento \mathbf{S} desse sistema é do tipo 3×3 .



Fonte: Ref. [22].

Podemos generalizar a relação acima para o número total de N canais de propagação em todos os guias, da seguinte forma

$$\begin{bmatrix} \mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S} \end{bmatrix}_{N \times N} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

em que \mathbf{b} é o vetor associado às amplitudes das ondas que saem da condutor e \mathbf{a} é o vetor associado às amplitudes das ondas que entram na cavidade a partir de todos os canais abertos em todos os guias. Além disso, perceba que a Matriz \mathbf{S} é quadrada do tipo $N \times N$.

A probabilidade de transmissão T_{nm} é obtida tomando o quadrado da magnitude do elemento correspondente da matriz \mathbf{S}

$$T_{nm} = |s_{nm}|^2, \quad (2.32)$$

que é a probabilidade do elétron passar de um canal m para um canal n .

Para encontrar a função de transmissão \bar{T}_{pq} de um guia q para um guia p , temos que obter a soma das probabilidades de transmissão de todos os canais m no guia q para todos os canais n no guia p :

$$\bar{T}_{pq} = \sum_{m \in q} \sum_{n \in p} T_{nm}. \quad (2.33)$$

Também podemos definir a função de reflexão \bar{R}_{qq} em um guia q como sendo a função de transmissão do guia q para ele mesmo, de modo que

$$\bar{R}_{pp} = 1 - \sum_{q \neq p} \bar{T}_{pq}. \quad (2.34)$$

É importante destacar que a matriz de espalhamento carrega toda informação do transporte dos elétrons no sistema mesoscópico, que em sua forma geral, distribui as amplitudes de transmissão em canais distintos [19].

Pela lei de conservação da carga, a soma das amplitudes das ondas que entram na cavidade deve ser igual a somas das amplitudes das ondas que saem da cavidade. Dessa forma, podemos escrever

$$\sum_m |a_m|^2 = \sum_m a_m^* a_m = \sum_m |b_m|^2 = \sum_m b_m^* b_m \quad (2.35)$$

o que nos leva a concluir que

$$|\mathbf{a}|^2 = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} = |\mathbf{b}|^2, \quad (2.36)$$

Voltando para a equação (2.31), podemos escrevê-la como

$$\mathbf{b} = \mathbf{S}\mathbf{a}. \quad (2.37)$$

Tomando o transposto conjugado, obtemos:

$$\mathbf{b}^\dagger = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{S}^\dagger. \quad (2.38)$$

Multiplicando (2.37) pela (2.38), temos

$$\mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} \mathbf{a}. \quad (2.39)$$

Sendo assim, é possível concluir que, para obedecer a lei da conservação de carga (2.36), a matriz de espalhamento \mathbf{S} deve satisfazer

$$\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{1}. \quad (2.40)$$

A relação acima nos mostra a unitariedade da matriz de espalhamento [15], que tem como

consequencia física a conservação de carga, isto é, no transporte eletrônico, nenhuma carga é perdida, destruída ou absorvida pelo centro espalhador, de modo que ou a carga foi transmitida ou refletida.

Sendo a matriz unitária, chegamos à seguinte conclusão

$$\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{S}^{-1}, \quad (2.41)$$

que em termos dos elementos da matriz S resulta

$$\sum_{m=1}^N |s_{mn}|^2 = \sum_{m=1}^N |s_{nm}|^2. \quad (2.42)$$

Essa equação respeita perfeitamente as relações entre as probabilidades de transmissão. Assim, a transmissão entre dois canais é a mesma independente do espalhamento ir de um canal m no guia q para um canal n no guia p ou o inverso.

Podemos separar a matriz de espalhamento em blocos conforme mostrado abaixo

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

onde r e r' são as matrizes de reflexão, enquanto que t e t' são as matrizes de transmissão.

Além disso, podemos relacionar a condutância de Landauer com os blocos de transmissão da matriz de espalhamento [15, 29, 30]:

$$G = G_0 \text{Tr}(tt^\dagger) = G_0 \sum_{n=1}^N T_n, \quad G_0 \equiv \frac{2e^2}{h}, \quad (2.44)$$

onde $\{T_n\}_{n=1}^N$ são os autovalores de transmissão da matriz tt^\dagger obtida via matriz \mathbf{S} .

A matriz de espalhamento também pode apresentar outros vínculos importantes, além da conservação da carga, como por exemplo, a sua relação com a simetria de reversão temporal (SRT), que, além de ser uma tema relevante para a TMA, mostra que a matriz \mathbf{S} é simétrica.

Consideremos a equação de Schrödinger que, para campo magnético nulo, $\mathbf{B} = 0$, pode

ser escrita da seguinte maneira

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right)^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t). \quad (2.45)$$

Se o Hamiltoniano preserva a SRT, então, para cada solução $\psi(\vec{r}, t)$, a sua conjugada $\psi^*(\vec{r}, t)$ é solução da equação revertida no tempo ($t \rightarrow -t$) [31]. Assim, na base do espalhamento a reversão temporal inverte o sentido de propagação da ondas nos guias, ou seja, transforma uma onda de entrada numa onda de saída e vice-versa.

Potanto, para o problema revertido no tempo, a matriz de espalhamento (2.37) se torna

$$\mathbf{a}^* = \mathbf{S}_{rev} \mathbf{b}^*. \quad (2.46)$$

Dessa forma, se o sistema é invariante sob reversão temporal, comparando as equações (2.37) e (2.46), temos que $\mathbf{S}_{rev} = \mathbf{S}$, de modo que podemos escrever a equação anterior na forma

$$\mathbf{a}^* = \mathbf{S} \mathbf{b}^*. \quad (2.47)$$

Se tomarmos a inversa de \mathbf{S} na equação acima, teremos

$$\mathbf{a}^* \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{b}^*. \quad (2.48)$$

Voltando a analisar a matriz da Eq.(2.37) e tomando o seu complexo conjugado, teremos

$$\mathbf{b}^* = \mathbf{S}^* \mathbf{a}^*. \quad (2.49)$$

Então, comparando as Eqs. (2.48) e (2.49), concluímos que

$$\mathbf{S}^* \mathbf{S} = \mathbf{1}. \quad (2.50)$$

Este vínculo, combinado com a condição de conservação da carga (2.40), fornece

$$\mathbf{S}^* = \mathbf{S}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}^T = \mathbf{S}, \quad (2.51)$$

em que \mathbf{S}^T é matriz transposta da matriz \mathbf{S} . Portanto, a SRT implica que a matriz \mathbf{S} é simétrica.

Caso seja aplicado um campo magnético ao sistema, essa condição de simetria é quebrada, de maneira que não poderemos mais escrever essa relação, ficando somente com a condição de unitariedade da matriz de espalhamento (2.40).

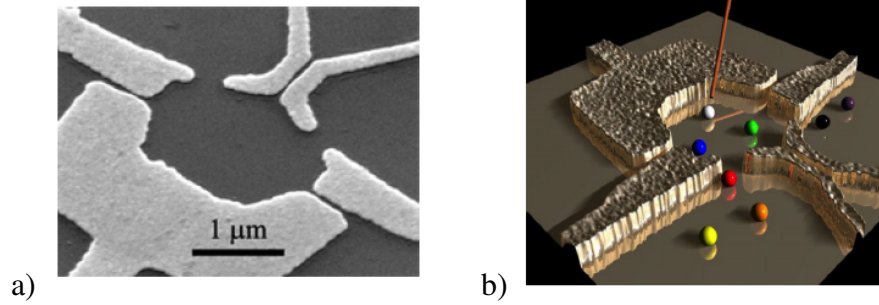
Outra simetria importante da matriz de espalhamento surge quando levamos em conta o grau de liberdade do spin dos elétrons. Nesse caso, os elementos da matriz de espalhamento s_{ij} na Eq. (2.30) serão quatérnions e haverá grau de liberdade de rotação, devido ao spin das partículas [30]. Portanto, podemos perceber que a depender do problema, a matriz \mathbf{S} em certas condições deve satisfazer algumas simetrias, contudo, para todos os problemas a condição de conservação da carga é sempre garantida [22].

2.5 Teoria de Matrizes Aleatórias

A Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA) foi desenvolvida pelo físico e matemático Eugene Wigner em 1957, com o objetivo inicial de estudar as distribuições dos níveis de energia de núcleos pesados no campo da Física Nuclear [32, 33, 34]. Nos átomos, existe uma grande quantidade de cargas distribuídas ao longo das órbitas, portanto para analisar a distribuição dos níveis de energia, Wigner utilizou ferramentas estatísticas, e ensembles de matrizes aleatórias [35]. Em seguida, Dyson estabeleceu os fundamentos matemáticos da TMA, sendo o responsável pela classificação dos ensembles de acordo com a presença ou ausência de determinadas simetrias, como a simetria de reversão temporal e a simetria de rotação de spin [36]. Na TMA, no que refere-se à universalidade dos transportes [29], os fenômenos são considerados universais no sentido de que não dependem do tamanho da amostra ou do grau de desordem do sistema, apenas de algumas simetrias.

A TMA é uma teoria consolidada e vem tendo uma vasta aplicação em fenômenos de transporte eletrônico em que a dinâmica da partícula é caótica [1, 32]. Dentre os dispositivos eletrônicos modernos em que podemos aplicar a TMA, podemos destacar as cavidades balísticas caóticas. Essas cavidades balísticas são também conhecidas como pontos quânticos, ou bilhares caóticos [39], conforme mostrado na Figura 2.9. Nos bilhares que estudaremos neste trabalho, a função de onda da partícula será descrita pela equação de Schrödinger. Além dessas cavidades balísticas, o transporte eletrônico também pode ocorrer em um bilhar quântico de Dirac, como o grafeno e os isolantes topológicos, por exemplo, em que a função de onda da partícula é descrita pela equação de Dirac, bem como também em dispositivos híbridos que utilizam uma

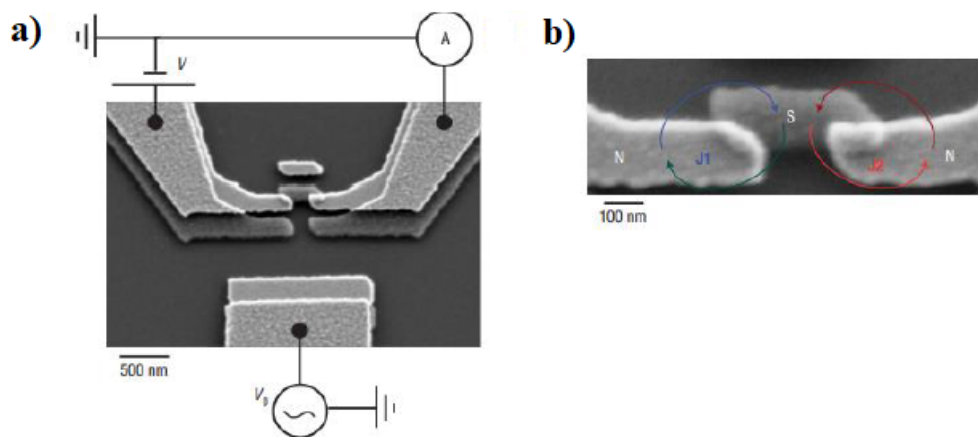
Figura 2.9: Em (a), um ponto quântico construído sobre um GE-2D e em (b), sua visão clássica. O ponto quântico tem analogia clássica a uma cavidade na qual os elétrons são refletidos nas fronteiras, semelhante a uma mesa de bilhar. Neste ponto quântico a função de onda da partícula é descrita pela equação de Schrödinger.



Fonte: Refs. [37, 38].

junção supercondutor-metal na forma da figura 2.10. Nesse caso, temos um novo bilhar quântico conhecido como Bilhar de Andreev, onde a reflexão de Andreev e os pares de Cooper induzem a simetria partícula-buraco no sistema [32].

Figura 2.10: A Figura mostra um ponto quântico híbrido com suas características básicas. Em (a) Micrografia eletrônica de um ponto quântico com interface Normal - Supercondutor- Normal e em (b), A imagem ampliada da heterojunção.



Fonte: Ref [40].

No transporte de cargas através de pontos quânticos caóticos, a dinâmica no interior da cavidade pode ser descrita por uma matriz hamiltoniana (\mathbf{H}) aleatória, pertencente ao ensemble gaussiano, o qual possui classes de universalidade que dependem de vínculos e simetrias da cavidade [19]. As classes mais comuns são as de Wigner-Dyson, onde cada classe é representada pelo índice de simetria β , que corresponde ao número de graus de liberdade dos elementos de

Tabela 2.1: Resumo da classificação de Dyson. Os ensembles são classificados pelo índice β dependendo da presença ou ausência de simetria de reversão temporal (SRT) e simetria de rotação de spin (SRS).

Classe de Simetria	Ensemble	β	SRT	SRS	Nomenclatura
Wigner Dyson	Ortogonal	1	sim	sim	ECO
	Unitário	2	não	irrelevante	ECU
	Simplético	4	sim	não	ECS

Fonte: Adaptada da Ref.[31]

matriz. As três classes de Dyson são: classe ortogonal, classe unitária e classe simplética. A classe ortogonal é aplicada a cavidades que preservam a simetria de reversão temporal e de rotação de spin, e que é caracterizada pelo índice de simetria $\beta = 1$. A classe unitária se aplica a cavidades onde existe a quebra da simetria de reversão temporal, causada, por exemplo, pela aplicação de um forte campo magnético ou por impurezas magnéticas, o índice de simetria vale $\beta = 2$. Por fim, a classe simplética, com índice de simetria $\beta = 4$, descreve sistemas com simetria de reversão temporal, na ausência de invariância sob rotação de spin devido a uma forte interação spin-órbita, por exemplo [29].

Alternativamente, podemos estudar as propriedades de transporte eletrônico através da Matriz de espalhamento (\mathbf{S}). Nessa abordagem, a cavidade caótica é descrita diretamente por \mathbf{S} sem se referir a \mathbf{H} . Para isso, usamos o ensemble circular, o qual apresenta as mesmas classes de universalidade de Wigner-Dyson. Na tabela 2.1 apresentamos um resumo contendo características das três classes de Wigner-Dyson.

Além das classes de simetria apresentadas anteriormente, outras foram introduzidas por Shuryak [41] e Verbaarschot [42], tornando possível o estudo de fenômenos de transporte em sistemas que têm redes bipartidas, como são os sistemas quirais e, também por Altland e Zimbauer [43] de maneira que a TMA foi aplicada a sistemas em contato com supercondutores.

2.5.1 Teoria de matrizes aleatórias para o ensemble circular de Dyson

O ensemble circular de matrizes aleatórias foi introduzido por Dyson em 1962. As matrizes que fazem parte desse ensemble são unitárias [36]. O ensemble circular, assim como o ensemble gaussiano, apresenta três classes de universalidade referentes à simetria e vínculos do

sistema (veja a tabela 2.1). São essas classes que determinam a forma das matrizes.

Seja U_β , por exemplo, uma matriz pertencente ao ensemble circular, em que $\beta = 1, 2, 4$ são os índices de simetria de Dyson. Novamente, $\beta = 2$ se aplica ao caso de SRT quebrada por um campo magnético ou por impurezas magnéticas, enquanto que na presença de SRT, temos $\beta = 1$ se o spin do elétron é conservado e $\beta = 4$ se a SRS é quebrada devido a uma forte interação spin-órbita, por exemplo.

Portanto, as três classes do ensemble circular são:

Ensemble circular unitário (ECU): Representado pelo índice de simetria $\beta = 2$. A simetria de reversão temporal é quebrada devido a um campo magnético não nulo ($\mathbf{B} \neq 0$). Portanto, sem a imposição da simetria de reversão temporal, a única exigência para a matriz pertencente ao ECU é que ela seja unitária, ou seja,

$$U_2^{-1} = U_2^\dagger. \quad (2.52)$$

Ensemble circular ortogonal (ECO): Representado pelo índice $\beta = 1$. Nesse caso, temos a preservação da simetria de reversão temporal e a invariância sob rotação de spin, o campo magnético externo é nulo ($\mathbf{B} = 0$) e não há interação spin-órbita. Logo, além de ser unitária, a matriz pertencente ao ECO deve ser simétrica, e portanto, pode ser escrita na forma:

$$U_1 = U_2^T U_2. \quad (2.53)$$

Ensemble circular simplético (ECS): Representado por $\beta = 4$. Neste caso, ocorre a preservação da simetria de reversão temporal sem a invariância sob rotação de spin, o campo magnético é nulo ($\mathbf{B} = 0$), mas há uma forte interação spin-órbita. Por isso, a matriz do ECS deve ser unitária e autodual. Respeitando estas imposições, podemos escrever essa matriz como

$$U_4 = U_2^R U_2, \quad (2.54)$$

com $U^R = \mathbf{K} U^T \mathbf{K}^{-1}$, onde \mathbf{K} é um operador unitário e \mathbf{K}^{-1} é a matriz inversa referente ao

operador \mathbf{K} . Além disso, o operador unitário \mathbf{K} possui a seguinte forma:

$$\mathbf{K} = i \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 & \cdots \\ 0 & \sigma_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

onde cada elemento é um bloco 2×2 e σ_2 é uma das três matrizes de Pauli [19]:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

Para um simples condutor ligado a dois terminais, a matriz de espalhamento do sistema (\mathbf{S}) terá um tamanho $N_T \times N_T$, em que $N_T = N_1 + N_2$, escrevendo em termos dos coeficientes de transmissão e reflexão, teremos que

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} r_{11} & t_{12} \\ t_{21} & r_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

A condutância pode ser obtida pela fórmula de Landauer (2.44):

$$\frac{G}{G_0} = \text{Tr}(t_{21}t_{12}^\dagger) = \text{Tr}(\mathbf{C}_1\mathbf{S}\mathbf{C}_2\mathbf{S}^\dagger). \quad (2.58)$$

As matrizes \mathbf{C}_1 e \mathbf{C}_2 são chamadas matrizes de projeção:

$$\mathbf{C}_1 = \begin{pmatrix} 1_{N_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{C}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1_{N_2} \end{pmatrix}. \quad (2.59)$$

As matrizes de projeção são sempre matrizes que obedecem a operação de multiplicação $\text{Tr}(\mathbf{C}_i\mathbf{C}_j) = \delta_{ij}$, e cujo traço é sempre não nulo, $\text{Tr}(\mathbf{C}_i) = N_i$, exibindo o numero de canais abertos no guia i . Portanto, seguindo as referencias [1, 44], podemos concluir que a média da condutancia

para as três classes de WD é

$$\langle G \rangle = G_0 \frac{N_1 N_2}{N_T - 1 + 2/\beta}, \quad (2.60)$$

e a variância da condutância,

$$\text{var}[G] = G_0^2 \frac{2N_1 N_2 (N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{\beta(N_T - 1 + 4/\beta)(N_T - 2 + 2/\beta)(N_T - 1 + 2/\beta)^2}, \quad (2.61)$$

em que β representa o índice de simetria de cada classe.

Capítulo 3

Transporte eletrônico em cavidades mesoscópicas caóticas com guias ideais: uma análise via método Tight-Binding

3.1 Modelo Tight-Binding

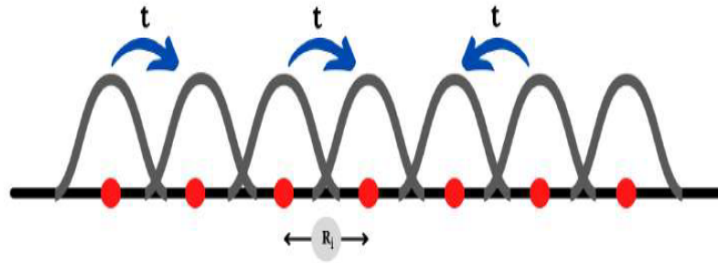
Um dos métodos padrão utilizados para resolver problemas de potenciais periódicos, encontrado na teoria de transporte eletrônico em sólidos é o LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*) ou Método Tight-Binding (TB) [17]. Este foi desenvolvido por Felix Bloch (1928) em sua tese de doutorado, para o estudo de estruturas eletrônicas dos sólidos, e consiste em fazer uma combinação linear de orbitais atômicos, localizados nos vários átomos do cristal. É um modelo muito conveniente e transparente para a descrição de estruturas eletrônicas em moléculas e sólidos.

O Método TB é um modelo semiempírico, computacionalmente rápido e uma ferramenta muito eficaz para descrever o movimento dos elétrons em sólidos. Isso justifica a sua utilização para o estudo de sistemas grandes, onde a célula primitiva apresenta alguns milhares de átomos. Ele é baseado na representação dos estados quânticos de uma partícula no cristal como uma combinação linear dos orbitais localizados sobre os sítios atômicos [45].

O Modelo TB de um sistema é obtido através da discretização do hamiltoniano de sua rede, de modo que todos os seus sítios representem apenas um átomo, ou uma região com alguns átomos, mas que deva ser pequena em comparação às características físicas relevantes [17]. Um

potencial do tipo $v(\vec{r} - \vec{R}_i)$ é criado em cada sítio i da rede de Bravais, o potencial total é dado por $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_i} v(\vec{r} - \vec{R}_i)$ e o elétron da camada mais externa (nível mais alto) está sujeito a este potencial. O elétron pode saltar para átomos vizinhos e, dessa forma percorrer toda a estrutura. Se a sobreposição e o salto são pequenos, nesse caso, cada uma das faixas de energia permitidas será formada a partir dos mesmos autoestados entre as bandas e estados localizados. Por outro lado, aumentando o parametro de salto, a banda se torna mais ampla e eventualmente se sobrepõe à proxima banda [45]. Na figura 3.1 ilustramos essa descrição.

Figura 3.1: Cadeia monoatômica com átomos idênticos (vermelho), com seu respectivo potencial $v(\vec{r} - \vec{R}_i)$, igualmente espaçados por \vec{R}_i e, os termos de *hopping* t .



Fonte: Ref. [45].

3.1.1 Hamiltoniano Tight-Binding

Consideremos um modelo que descreve um metal ou um semiconductor que é um gás de elétrons não interagentes, isto é, desprezam-se as colisões entre os elétrons, com carga $-e$ ($e > 0$) e massa efetiva m_{ef} , sujeitos a um potencial de desordem $V(\vec{r})$.

O hamiltoniano para um elétron em um átomo é expresso na forma

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_{ef}} + V(\vec{r}) \quad (3.1)$$

onde $V(\vec{r})$ descreve o potencial de confinamento dentro do condutor e o potencial de distribuição das impurezas estáticas que se encontram espalhadas no condutor.

3.1.2 Discretização do Hamiltoniano

O Modelo Tight-Binding descreve os materiais em termos de orbitais atômicos em uma rede. Em um determinado sistema, onde existem guias levando ondas planas para dentro e para

fora da região de espalhamento, o hamiltoniano tem um conjunto de graus de liberdade, sendo descrito como [4]

$$H = \sum_{ij} H_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (3.2)$$

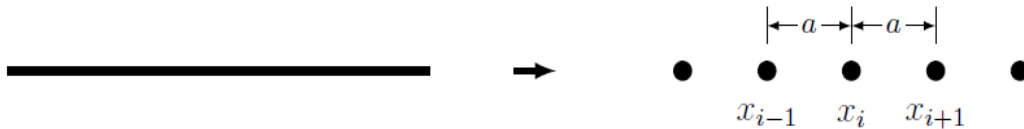
onde c_i^\dagger e c_j são, respectivamente, operadores de criação e aniquilação fermiônicos, i e j rotulam os diferentes graus de liberdade do sistema e H_{ij} são os elementos de uma matriz hermitiana infinita. Alternativamente, podemos escrever o mesmo hamiltoniano em primeira quantização da seguinte forma [4]

$$H = \sum_{ij} H_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (3.3)$$

onde os estados $|i\rangle$ correspondem tipicamente aos sítios em uma rede e aos graus de liberdade adicionais, por exemplo, orbitais e spin. Para que possamos utilizar o hamiltoniano da Eq. (3.1), no modelo TB, precisamos discretizá-lo. Por questões de simplicidade, sobretudo nas simulações realizadas, utilizamos os sítios de uma rede quadrada com parâmetro de rede constante a igual a 1. A figura 3.2 mostra graficamente essa discretização, onde cada sítio com coordenadas da rede (i, j) está no espaço real de coordenadas $(x, y) = (ai, aj)$, dessa forma:

$$|i, j\rangle \equiv |ai, aj\rangle = |x, y\rangle \quad (3.4)$$

Figura 3.2: Rede em 1D no limite contínuo, sendo graficamente discretizado. Pode-se observar o aparecimento dos sítios quantizados e igualmente espaçados de a .



Fonte: Ref. [17]

Usando o método das diferenças finitas, encontramos por aproximação [17]:

$$\frac{d\psi(x)}{dx} \approx \frac{\psi(x+a) - \psi(x-a)}{2a},$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \approx \frac{2\psi(x) - \psi(x+a) - \psi(x-a)}{a^2}. \quad (3.5)$$

A partir das Eqs. (3.4) e (3.5) verificamos que a função de onda está sendo aplicada somente nos pontos (sítios) separados por a . Logo, substituímos as coordenadas espaciais por uma rede discreta espaçada de a .

Assim, o hamiltoniano do sistema, após a discretização assume a forma

$$H\psi(x_i) = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} [2\psi(x_i) - \psi(x_i - a) - \psi(x_i + a)] = E\psi(x_i) \quad (3.6)$$

Da Eq. (3.6) podemos definir a quantidade $t = \hbar^2 / (2m_e a^2)$ que tem dimensão de energia e que depende da constante de rede a . Finalmente, temos agora todos os parâmetros necessários para expressar o hamiltoniano contínuo na forma do modelo TB. Assim, escrevendo os pontos da rede x_i como uma base $|x_i\rangle$ e tomando o limite de $a \rightarrow 0$, o operador diferencial de segunda ordem ∂_x^2 pode ser expresso como

$$\partial_x^2 = \frac{1}{a^2} \sum_{i,j} (|i+1, j\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i+1, j| - 2|i, j\rangle \langle i, j|). \quad (3.7)$$

Analogamente, para o operador diferencial de segunda ordem ∂_y^2 , temos

$$\partial_y^2 = \frac{1}{a^2} \sum_{i,j} (|i, j+1\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i, j+1| - 2|i, j\rangle \langle i, j|). \quad (3.8)$$

Substituindo os operadores diferenciais no hamiltoniano, obtemos

$$H = \sum_{ij} [(V(ai, aj) + 4t) |i, j\rangle \langle i, j| - t(|i+1, j\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i+1, j| + |i, j+1\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i, j+1|)]. \quad (3.9)$$

Observe que o fator $4t$, assim como o potencial de desordem, não tem interação com os vizinhos próximos, dessa forma, seus valores serão depositados nos sítios da rede [17]. Por outro lado, o valor da energia $-t$ representa interação entre os vizinhos, em razão desse comportamento será denominado de “energia de salto”.

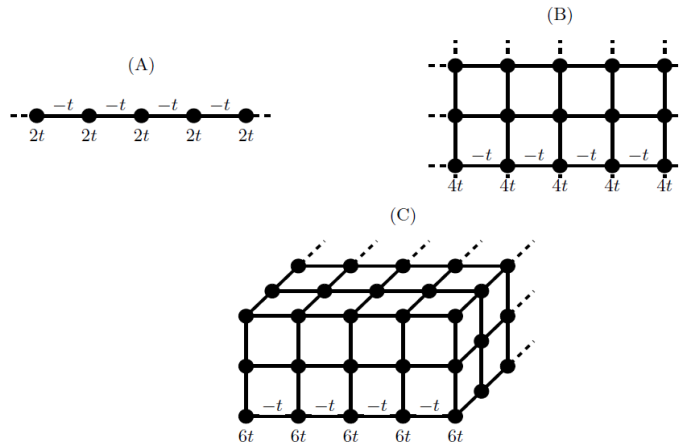
Generalizando o problema para duas e três dimensões, o hamiltoniano contínuo toma a

forma diferencial

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{ef}} \nabla^2. \quad (3.10)$$

Na figura 3.3, podemos observar que a energia nos sítios cresce de acordo com a dimensão da rede. Para redes 1D, a energia nos sítios é $2t$, para redes 2D, a energia é $4t$, e para redes 3D, a energia é igual a $6t$. A energia de salto, por sua vez, não depende da dimensão da rede, tendo sempre o mesmo valor $-t$. No presente trabalho, utilizamos o parâmetro de $4t$, pois usamos uma rede bidimensional.

Figura 3.3: Representação gráfica de redes em 1-D (A), 2-D (B) e 3-D (C). As energias localizadas nos sítios tem uma dependência de dimensionalidade. O mesmo não ocorre com a energia de salto $-t$, entre os sítios vizinhos, que está em todas as direções x, y, z .



Fonte: Ref. [17]

3.2 Transporte eletrônico através de uma cavidade conectada por guias ideais

Conforme discutido na seção 2.5.1, sabemos que para descrever o espalhamento quântico caótico, a matriz \mathbf{S} pode ser modelada usando a TMA. Existem dois formalismos equivalentes para esse fim, a saber, a abordagem da Matriz de espalhamento e a abordagem Hamiltoniana. No primeiro, a matriz \mathbf{S} é modelada diretamente como uma matriz aleatória unitária com medida de probabilidade descrita pelo kernel de Poisson. Por outro lado, na última, estocasticidade é incorporada na matriz \mathbf{S} através do hamiltoniano que descreve o centro de espalhamento. Considerando um acoplamento perfeito entre os canais abertos e o centro espalhador, o kernel de Poisson se reduz à medida de Harr sobre matrizes unitárias e, conseqüentemente, a matriz \mathbf{S}

pertence a um dos conjuntos circulares de Dyson. No contexto de sistemas mesoscópicos, isso é denominado de *cavidades caóticas com contatos pontuais* (guias ideais, com probabilidade de tunelamento $\tau_j = 1$ para todos os j). [13].

3.2.1 Autovalores de transmissão e propriedades de transporte

Para nosso problema, assumimos que a cavidade mesoscópica (um ponto quântico) sob investigação está conectada a dois guias ideais, que suportam n e m canais abertos. A matriz \mathbf{S} , nesse caso, tem dimensão N_T , onde $N_T = n + m$ é o numero total de canais abertos. Além disso, conforme abordado anteriormente, ela pertence à classe ortogonal ($\beta = 1$) ou unitária ($\beta = 2$) do ensemble circular de Dyson, dependendo das simetrias apresentadas pelo sistema. É conveniente considerar a estrutura de blocos da matriz de espalhamento \mathbf{S} em termos de matrizes de transmissão (t, t') e reflexão (r, r')

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} r_{n \times n} & t_{n \times m} \\ t'_{m \times n} & r'_{m \times m} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Devido à unitariedade da matriz \mathbf{S} , as matrizes $tt^\dagger, t't'^\dagger, 1 - rr^\dagger$ e $1 - r'r'^\dagger$ têm os mesmos autovalores diferentes de zero. Introduzindo $T = tt^\dagger$ como a matriz de transferência, os autovalores de T , denotados como T_1, \dots, T_n , onde $n = \min(n, m)$, são chamados autovalores de transmissão [1, 13]. A partir da distribuição de probabilidade das matrizes de espalhamento, pode-se determinar a densidade de probabilidade conjunta dos autovalores de transmissão.

Para guias ideais, a densidade de probabilidade conjunta de autovalores de transmissão pode ser derivada do ensemble circular de matrizes de espalhamento [1, 9, 13] e é dada por

$$P^{(\beta)}(T_1, \dots, T_n) = C_n^{(\beta)} |\Delta_n(T_1, \dots, T_n)|^\beta \prod_{j=1}^n T_j^\alpha, \quad (3.12)$$

onde $\alpha = \beta(m - n + 1)/2 - 1$, n e m são os números de canais nos guias da esquerda e direita, respectivamente, e $\Delta_n(T_1, \dots, T_n) = \prod_{1 \leq j < k \leq n} |T_k - T_j|^\beta$ é o determinante de Vandermonde. A constante de normalização $C_n^{(\beta)}$ pode ser calculada usando a Integral de Selberg [32] e é dada por

$$C_n^{(\beta)} = \prod_{j=0}^{n-1} \frac{\Gamma\left(\frac{\beta}{2} + 1\right) \Gamma\left(\frac{\beta}{2}(n + j - 1) + \alpha + 2\right)}{\Gamma\left(\frac{\beta}{2}j + 1\right) \Gamma\left(\frac{\beta}{2}j + \alpha + 1\right) \Gamma\left(\frac{\beta}{2}(j + 1) + 1\right)}. \quad (3.13)$$

Uma vez que a densidade de probabilidade conjunta dos autovalores de transmissão é conhecida, podemos calcular observáveis físicos de transporte importantes. Neste trabalho, investigamos principalmente duas propriedades — condutância de Landauer e potência do ruído de disparo. Nas próximas seções, fornecemos alguns detalhes sobre essas propriedades e seus resultados exatos para pontos quânticos com guias ideais.

3.2.2 Condutância

A condutância (adimensional) de Landauer em termos dos autovalores de transmissão é dada por [1, 13]

$$g \equiv \frac{G}{G_0} = \sum_{j=1}^n T_j, \quad (3.14)$$

onde $G_0 = 2e^2/h$ se levarmos em consideração o spin do elétron. Essa expressão também é conhecido como a fórmula de Landauer. Em termos dos elementos da matriz de espalhamento s_{ij} , a fórmula de Landauer torna-se [5]

$$g \equiv \sum_{i=1}^n \sum_{j=n+1}^m |s_{ij}|^2. \quad (3.15)$$

A condutância de Landauer é uma quantidade muito importante quando se trata de pontos quânticos. Vários fenômenos característicos tais como flutuações universais da condutância e a localização fraca podem ser estudados através das estatísticas de condutância de Landauer.

Distribuição da Condutância

A distribuição de condutância (adimensional) é dada por [5, 9]

$$F_g^{(\beta)}(g) = \int_0^1 \dots \int_0^1 \delta\left(g - \sum_j T_j\right) P^{(\beta)}(T_1, \dots, T_n) dT_1 \dots dT_n. \quad (3.16)$$

Tomando a transformada de Laplace da equação acima, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{F}_g^{(\beta)}(s) &= \int_0^1 \dots \int_0^1 e^{-s(\sum_j T_j)} P^{(\beta)}(T_1, \dots, T_n) dT_1 \dots dT_n \\ &= \int_0^1 \dots \int_0^1 C_n^{(\beta)} |\Delta_n(T_1, \dots, T_n)|^\beta \prod_{j=1}^n e^{-sT_j} T_j^\alpha dT_1 \dots dT_n \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde $\tilde{F}_g^{(\beta)}(s) = \mathcal{L} \left\{ F_g^{(\beta)}(g) \right\}$ é a transformada de Laplace de $F_g^{(\beta)}(g)$.

Resolver essa integral não parece possível na configuração geral. Entretanto, essa tarefa foi realizada na Ref. [9] para os casos onde o número de canais nos guias é relativamente pequeno, que é o nosso objeto de estudo, uma vez que estamos particularmente interessados nos casos com números de canais pequenos, onde as distribuições são em grande parte não gaussianas. Em particular, consideramos os números de canais abertos como $(n, m) = (1, 1), (1, 2), (1, 3), (2, 2), (2, 3)$ e $(3, 3)$ para os casos em que $\beta = 1$ (ECO) e $\beta = 2$ (ECU).

Portanto, seguindo a Ref. [9], apresentamos os resultados exatos para as distribuições da condutância.

Resultados para ECO ($\beta = 1$)

- $n = 1$ e $m = 1, 2, 3$

$$F_g^{(1)}(g) = \frac{m}{2} g^{\frac{m}{2}-1}, \quad 0 \leq g \leq 1. \quad (3.18)$$

- $n = 2$ e $m = 2$

$$F_g^{(1)}(g) = \frac{3}{2} [g - 2(g-1)^{1/2} \Theta(g-1)], \quad 0 \leq g \leq 2. \quad (3.19)$$

- $n = 2$ e $m = 3$

$$F_g^{(1)}(g) = \frac{3}{2} [g^2 - 4(g-1) \Theta(g-1)], \quad 0 \leq g \leq 2. \quad (3.20)$$

- $n = 3$ e $m = 3$

$$F_g^{(1)}(g) = \begin{cases} \frac{6}{7} g^{7/2}, & 0 \leq g \leq 1, \\ \frac{3}{28} [35g^3 - 175g^2 + 273g - 125 - 8(g-2)^{5/2}(g+5) \Theta(g-2)], & 1 \leq g \leq 3. \end{cases} \quad (3.21)$$

Resultados para ECU ($\beta = 2$)

- $n = 1$ e $m = 1, 2, 3$

$$F_g^{(2)}(g) = m g^{m-1}, \quad 0 \leq g \leq 1. \quad (3.22)$$

- $n = 2$ e $m = 2$

$$F_g^{(2)}(g) = \begin{cases} 2g^3, & 0 \leq g \leq 1, \\ -2(g-2)^3, & 1 \leq g \leq 2. \end{cases} \quad (3.23)$$

- $n = 2$ e $m = 3$

$$F_g^{(2)}(g) = \begin{cases} \frac{6}{5} g^5, & 0 \leq g \leq 1, \\ \frac{6}{5} (g-2)^3 (g^2 + 6g - 6), & 1 \leq g \leq 2. \end{cases} \quad (3.24)$$

- $n = 3$ e $m = 3$

$$F_g^{(2)}(g) = \begin{cases} \frac{3}{14} [g^8 - 3(g-1)^4 (g^4 - 4g^3 + 62g - 228g + 309) \Theta(g-1)], & 0 \leq g \leq 2, \\ \frac{3}{14} (g-3)^8, & 2 \leq g \leq 3. \end{cases} \quad (3.25)$$

3.2.3 Potência do Ruído de Disparo

A teoria do espalhamento também pode ser empregada para outras propriedades de transporte como flutuações temporais da corrente, que fornecem informação adicional sobre o processo de transporte. As flutuações da corrente elétrica em torno de seu valor médio são chamadas, de maneira geral, de *ruído*. Há dois tipos principais de ruído elétrico, a saber, o ruído térmico, relacionado às flutuações dos números de ocupação dos reservatórios, e o ruído de disparo, que se origina da discreteza da carga elétrica [46]. À temperatura zero, apenas o ruído de disparo está presente, ao passo que o ruído térmico domina para temperaturas altas. O ruído de disparo é, portanto, um fenômeno intrinsecamente de não-equilíbrio e fornece informações sobre a correlação entre as cargas devido ao princípio de Pauli [47].

A potência do ruído de disparo está relacionada aos autovalores de transmissão (à temperatura zero) da seguinte forma [13]:

$$p \equiv \frac{P}{P_0} = \sum_{j=1}^n T_j(1 - T_j) \quad (3.26)$$

onde $P_0 = 2eVG_0$.

Convém notar que a potência do ruído de disparo não é proporcional à condutância, mas à soma dos produtos das probabilidades de transmissão e de reflexão dos canais. Além disso, $V = 0$ implica $P = 0$, o que demonstra seu caráter de não-equilíbrio [46].

Distribuição da potência do ruído de disparo

A distribuição de probabilidade da potência do ruído de disparo já é conhecida na literatura para $\beta = 1, 2$ no caso onde há um único canal presente em um dos guias (digamos, à esquerda) [48]. No entanto, seguindo as Referências [13] e [5], vamos apresentar os resultados exatos da distribuição da potência do ruído de disparo para os casos $n = 1$ e $n = 2$ mantendo m arbitrário.

Resultados para COE ($\beta = 1$)

- **Caso $n = 1$ e $m \geq 1$**

$$F_p^{(1)}(p) = \frac{m}{2\sqrt{1-4p}} \left[\left(\frac{1 - \sqrt{1-4p}}{2} \right)^{m/2-1} + \left(\frac{1 + \sqrt{1-4p}}{2} \right)^{m/2-1} \right] \Theta(p)\Theta(1-4p). \quad (3.27)$$

- **Caso $n = 2$ e $m \geq 2$**

Usando as Eqs. (3.12) e (3.26), a PDF para a potência do ruído de disparo pode ser expressa em termos de uma única integral como

$$F_p^{(1)}(p) = \frac{m(m^2 - 1)}{8} \int_0^1 dx \frac{x^{(m-3)/2}}{\sqrt{1-4(p-x+x^2)}} \times \left[x_-^{(m-3)/2} |x_- - x| + x_+^{(m-3)/2} |x_+ - x| \right] \Theta(x_-)\Theta(x_+), \quad (3.28)$$

onde

$$x_{\pm} = \left[1 \pm \sqrt{1 - 4(s - x + x^2)} \right] / 2. \quad (3.29)$$

Resultados para CUE ($\beta = 2$)

- **Caso $n = 1$ e $m \geq 1$**

$$F_p^{(2)}(p) = \frac{m}{\sqrt{1-4p}} \left[\left(\frac{1 - \sqrt{1-4p}}{2} \right)^{m-1} + \left(\frac{1 + \sqrt{1-4p}}{2} \right)^{m-1} \right] \Theta(p) \Theta(1-4p). \quad (3.30)$$

- **Caso $n = 2$ e $m \geq 2$**

Analogamente, usando as Eqs. (3.12) e (3.26), a expressão para a distribuição da potência de ruído de disparo pode ser expressa em termos de uma única integral na forma

$$F_p^{(2)}(p) = \frac{m(m^2 - 1)}{8} \int_0^1 dx \frac{x^{m-2}}{\sqrt{1-4(p-x+x^2)}} \times [x_-^{m-2}(x_- - x)^2 + x_+^{m-2}(x_+ - x)^2] \Theta(x_-) \Theta(x_+), \quad (3.31)$$

onde x_{\pm} é dado pela Eq. (3.29). A integral acima pode ser resolvida explicitamente para diferentes valores de m caso a caso. Para $m = 2$, por exemplo, obtemos

$$F_p^{(2)}(p) = \begin{cases} 3(1-2p) [\pi - 4 \tan^{-1}(\sqrt{1-4p})], & 0 \leq p < \frac{1}{4} \\ 3(1-2p)\pi, & \frac{1}{4} < p \leq \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.32)$$

3.3 Kwant

Kwant é um pacote python de código fonte aberto que permite calcular propriedades de transporte de sistemas quânticos de qualquer dimensão e geometria que possam ser descritos por um modelo Tight-Binding. Este pacote utiliza, por padrão, a abordagem da função de onda e soluciona problemas de espalhamento via matriz \mathbf{S} para qualquer sistema de interesse [4]. Portanto, uma vez que o usuário informa ao Kwant o Hamiltoniano discretizado (que em nosso caso, é o dado pela (3.9)), a rede de Bravais, a geometria do centro espalhador, e a geometria dos eletrodos, é possível extrair as propriedades físicas do sistema de interesse utilizando comandos simples. Dessa forma, dedicamos esta seção à descrição da forma como as simulações que deram

origem a este trabalho foram realizadas.

Nesta dissertação, usamos a biblioteca Kwant para estudar as distribuições da condutância de Landauer e a potência do ruído de disparo em duas geometrias que são conhecidas por serem classicamente caóticas, a saber, um quarto de estádio de Bunimovich e um quarto de bilhar de Sinai. Usamos Kwant para definir essas geometrias com parâmetro de rede $a = 1$ e conectarmos os dois guias aos sistemas caóticos em questão. Afim de examinar o caso de guias ideais, atribuímos ao guias valores dos parâmetros V e t iguais aos dos bilhares, ou seja, $V = 0$ e $t = 1$. Além disso, para a implementação, em kwant, do campo magnético aplicado perpendicularmente aos sistemas, introduzimos nos termos de *hopping* um termo conhecido na literatura como fator de Peierls [13, 49] dado por

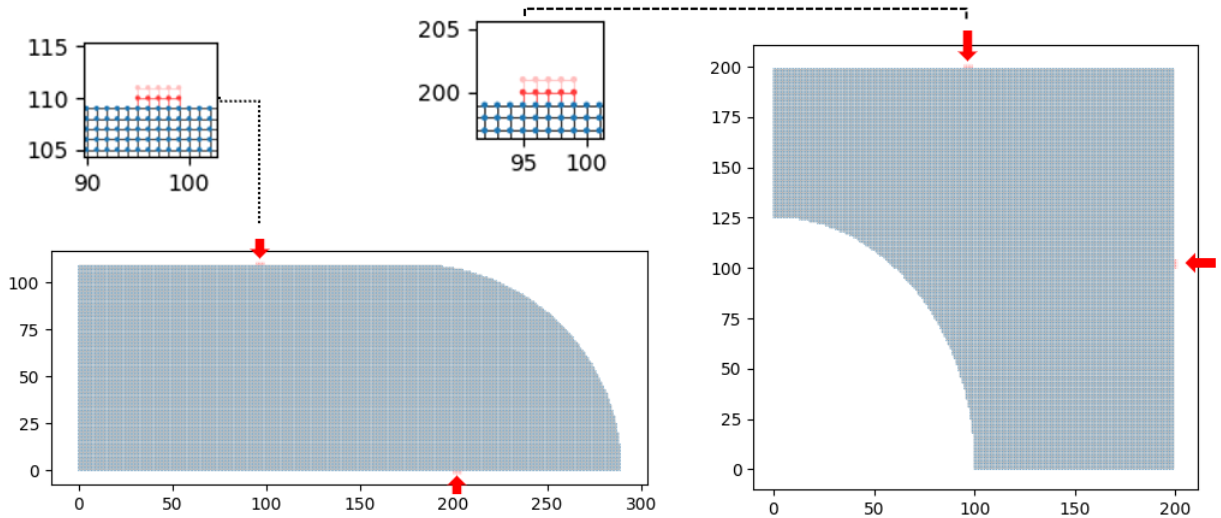
$$\theta = \int_k^l \vec{A} d\vec{l} \quad (3.33)$$

onde usamos a condição de calibre $\vec{A} = (-B_y, 0, 0)$, de modo que o campo magnético é dado por $\vec{B} = (0, 0, B)$, o qual será medido em termos do fluxo magnético adimensional $\phi = \Phi/\Phi_0$, onde $\Phi = Ba^2$ é o fluxo magnético através de uma área a^2 e $\Phi_0 = h/e$ é o quantum de fluxo [13, 50]. Na Eq. (3.33), k e l referem-se às posições dos sítios da rede onde o salto é implementado. Os resultados obtidos nas simulações via Kwant, realizadas na presença e ausência de campo magnético, são comparadas com as previsões analíticas da TMA para os ensembles circulares ortogonal e unitário, respectivamente.

3.3.1 Simulações via Kwant

Para nossas simulações de transporte eletrônico caótico usando Kwant, consideramos dois tipos de bilhares com guias conectados a eles — um quarto de estádio de Bunimovich e um quarto de bilhar de Sinai. Os dois são bem conhecidos por apresentarem comportamento caótico. Escolhendo a rede de modo que tenha tamanho unitário, o quarto de estádio consiste em uma parte retangular de tamanho 180×110 com um quarto de círculo de raio 110. Os guias são anexados nas posições (95, 100) e (200, 205). O quarto de bilhar de Sinai compreende uma região quadrada de tamanho 200×200 com uma parte elíptica de eixos 100 e 125 removida. Os guias para o Sinai estão anexados em (100, 200) e (200, 95). Os dois guias conectados à cavidade, são definidos usando simetria translacional e são responsáveis pelo espalhamento. As imagens desses sistemas estão ilustrados na figura 3.4.

Figura 3.4: Sistemas caóticos usados para estudar as propriedades de transporte quântico: um quarto de estádio de Bunimovich (à esquerda) e um quarto de bilhar do Sinai (à direita). As setas apontam para os guias (em vermelho) conectados aos sistemas de bilhares.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

A espessura dos guias em ambos os sistemas pode ser variada para controlar o número de canais. Aqui, quando a largura do guia tem 5 unidades de comprimento, o número de canais é 1. O número de canais determina o tamanho da matriz \mathbf{S} . Por isso é interessante explorar os casos envolvendo pequenos números de canais, pois estes mostram forte comportamento não gaussiano nas distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo, conforme mostraremos mais a frente. Em particular, mantemos o número de canais em um dos guias fixos em 1 e variamos o número de canais no outro guia (aumentando a largura). Por exemplo, para obtermos a matriz \mathbf{S} de dimensão 2×2 , assumimos que cada um dos guias deve comportar um único canal, ou seja, $n = 1$ e $m = 1$ para a faixa de energia escolhida [5, 13].

Uma vez que o sistema está configurado, a matriz \mathbf{S} pode ser extraída fazendo uso da função `kwant.smatrix` no software Kwant. Essa função retorna a matriz de espalhamento do sistema construído usando os valores de energia e campo magnético desejados. Além disso, ela também é usada para calcular tanto a condutância quanto a potência do ruído de disparo com o auxílio das Eqs. (3.11), (3.14) e (3.26). A partir da matriz \mathbf{S} , podemos calcular a matriz de transferência e os autovalores de transmissão.

Neste trabalho, geramos um conjunto de matrizes de espalhamento \mathbf{S} variando a energia da partícula incidente de 0,4 a 0,6 (tendo em mente que o tamanho da matriz \mathbf{S} não muda para essa faixa de energia), simulando assim um total de 10.000 matrizes de espalhamento bem como

de valores da condutância e potência do ruído de disparo em configurações de guias diferentes, ou seja, mudamos ligeiramente as posições dos guias a cada 2.500 realizações. Depois calculamos a condutância e a potência do ruído de disparo para cada matriz \mathbf{S} no conjunto. Com isso, obtemos facilmente as distribuições da condutância e potência do ruído de disparo para $B = 0$ e $B = 1 \times 10^{-3}$, afim de corresponder aos resultados analíticos da TMA para $\beta = 1$ e $\beta = 2$, respectivamente. Escolhemos o valor de B citado acima para o caso $\beta = 2$ em razão dos bilhares caóticos em análise apresentarem uma boa concordância com as previsões TMA. Para valores de campos magnéticos superiores ($\lesssim 4 \times 10^{-3}$), observamos um desvio significativo de $\beta = 2$. Os resultados das simulações são apresentados na seção a seguir.

A título de curiosidade: neste trabalho os resultados são oriundos dos cálculos de simulação computacional em linguagem *Python 3.9.1*, uma vez que essa linguagem é gratuita, popular e possui uma grande quantidade de bibliotecas científicas. Além disso, fizemos uso de um notebook Intel Core i3-5005U CPU @2.00GHz, 1 TB de HD e memória ram de 4 GB, com sistema operacional Windows 10. Os principais códigos usados para a obtenção dos observáveis físicos de interesse neste trabalho podem ser consultados no GitHub (EdivanAs).

3.4 Resultados Kwant e Previsões da TMA

Nesta seção, comparamos os resultados analíticos da TMA descritos nas subseções 3.2.2 e 3.2.3 com os resultados obtidos através das simulações com Kwant para $\beta = 1$ e $\beta = 2$.

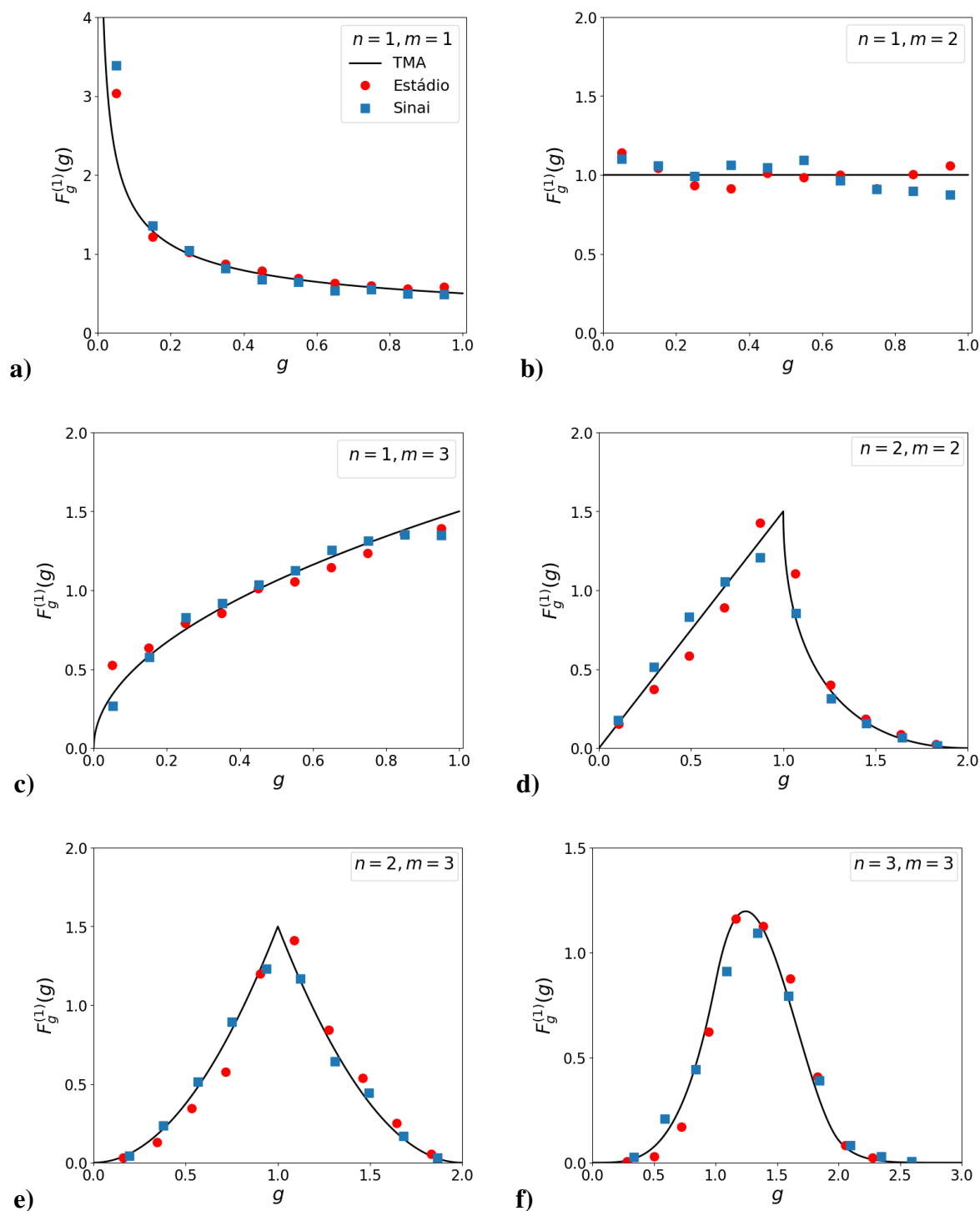
3.4.1 SRT Preservada ($\beta = 1$)

Nesse caso, onde a Simetria de Reversão Temporal (SRT) é preservada ($\beta = 1$), o campo magnético é obviamente zero e queremos mostrar como as distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo mudam com o aumento do número de canais nos guias. Assumimos que $n \leq m$, quando aumentamos o número de canais. Os gráficos das propriedades de transporte para diferentes valores n, m são dados nas Figuras 3.5 e 3.6, respectivamente. Note que encontramos resultados em concordância com as previsões da TMA. No entanto, observando cuidadosamente, podemos perceber algumas flutuações no comportamento dos dados da simulação sobre as curvas da TMA. Isso pode ser devido à discretização dos sistemas de bilhares em termos de redes, contudo, seria necessário um estudo mais criterioso sobre esse comportamento.

3.4.2 SRT Quebrada ($\beta = 2$)

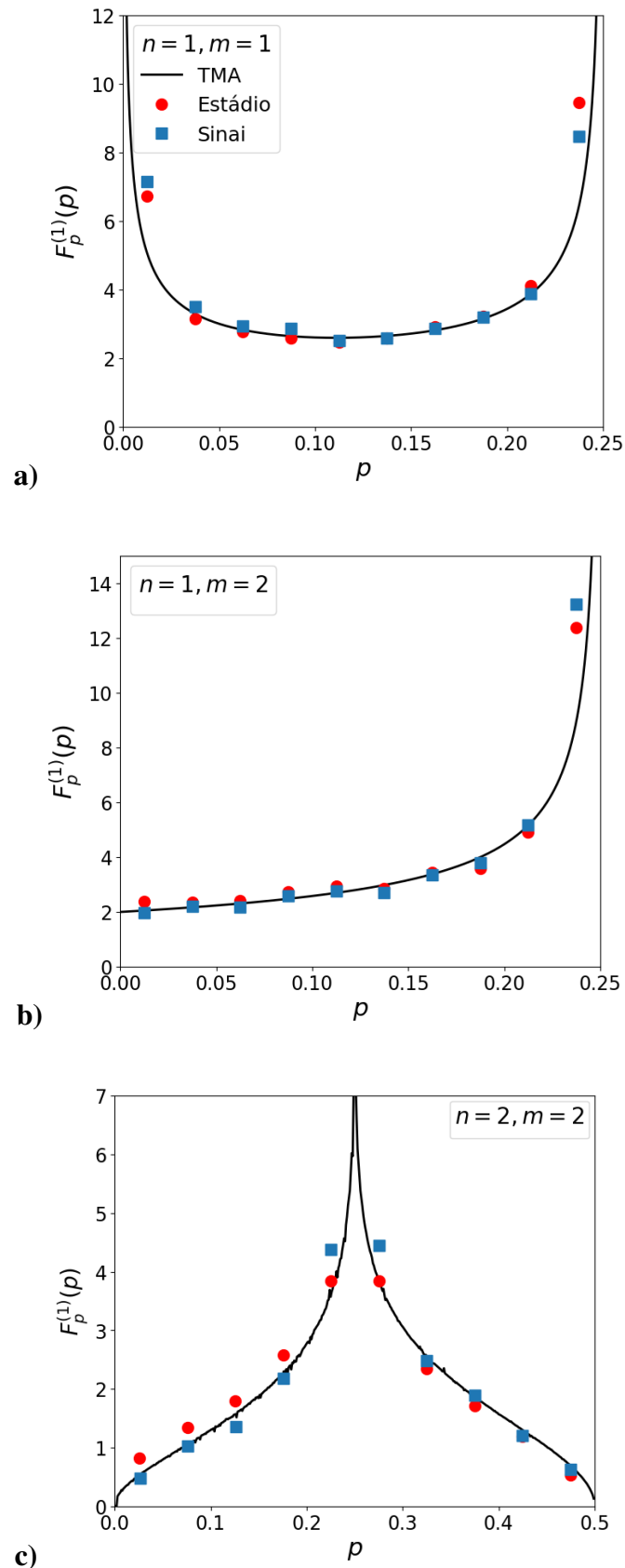
Para o caso em que SRT é quebrada ($\beta = 2$), o campo magnético aplicado em ambos os sistemas caóticos é igual a 1×10^{-3} . Queremos novamente ver como as distribuições da condutância e do ruído de disparo se comportam com o aumento do número de canais no condutor. Novamente, assumimos que $n \leq m$, ao aumentar o número de canais. Os gráficos das propriedades de transporte em estudo para diferentes valores n, m são apresentados nas Figuras 3.7 e 3.8. Mais uma vez, encontramos uma boa concordância entre as simulações e os resultados analíticos da TMA. Além disso, aqui também percebemos algumas flutuações no comportamento dos dados da simulação sobre as curvas da TMA, semelhantes ao caso anterior.

Figura 3.5: Gráficos das distribuições da condutância para $B = 0$ para as seguintes combinações de canais abertos: a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$, c) $n = 1, m = 3$, d) $n = 2, m = 2$, e) $n = 2, m = 3$ e f) $n = 3, m = 3$. Os símbolos representam as simulações com Kwant e as curvas sólidas a TMA para $\beta = 1$.



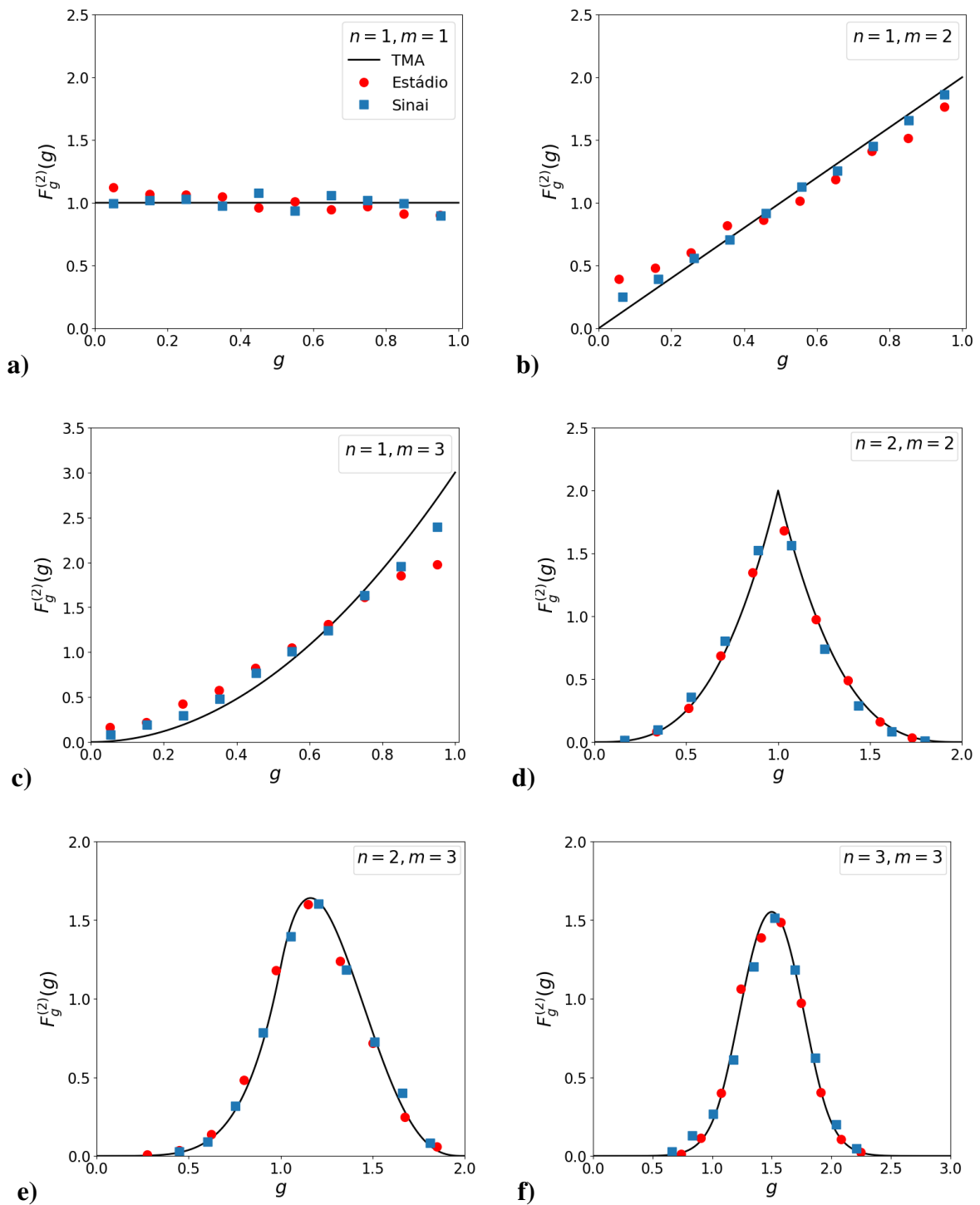
Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Figura 3.6: Gráficos das distribuições da potência do ruído de disparo para $B = 0$ para várias combinações de canais abertos a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$ e c) $n = 2, m = 2$. Os símbolos representam as simulações Kwant e as curva sólidas a TMA para $\beta = 1$.



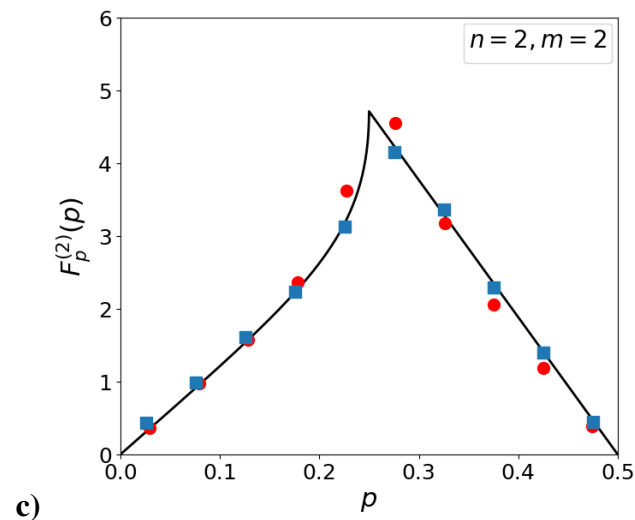
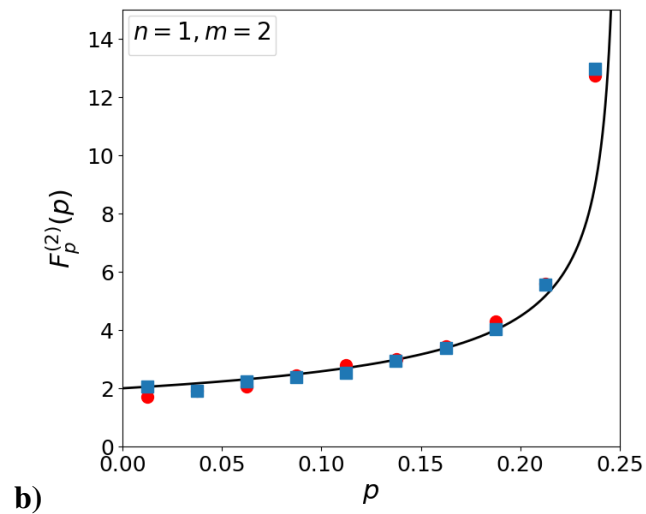
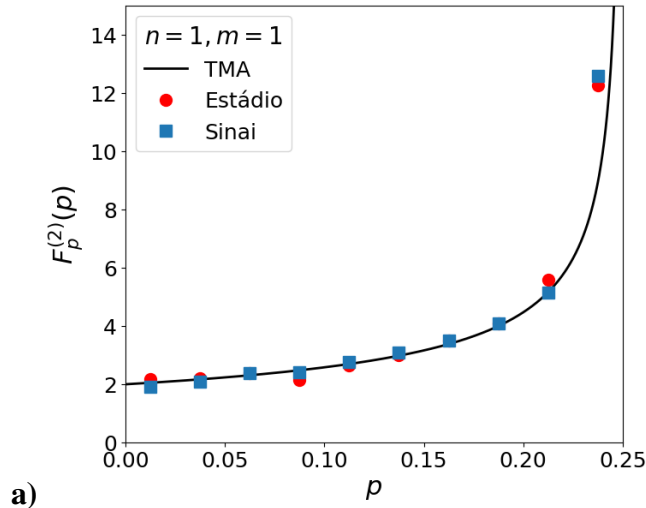
Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Figura 3.7: Gráficos das distribuições da condutância para $B = 1 \times 10^{-3}$ para as seguintes combinações de canais abertos: a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$, c) $n = 1, m = 3$, d) $n = 2, m = 2$, e) $n = 2, m = 3$ e f) $n = 3, m = 3$. Os símbolos representam as simulações com Kwant e as curvas sólidas a TMA para $\beta = 2$.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Figura 3.8: Gráficos das distribuições da potência do ruído de disparo para $B = 1 \times 10^{-3}$ para várias combinações de canais abertos: a) $n = 1, m = 1$, b) $n = 1, m = 2$ e c) $n = 2, m = 2$. Os símbolos representam as simulações Kwant e a curva sólida a TMA para $\beta = 2$.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

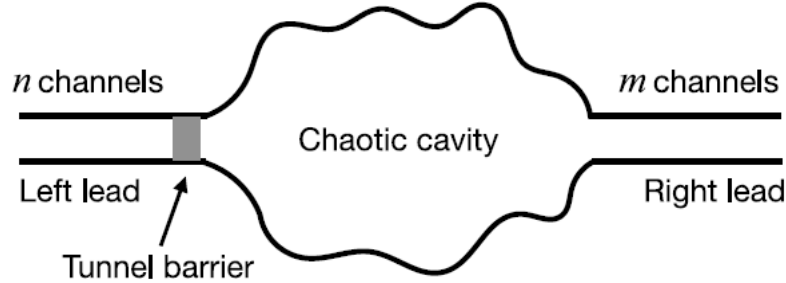
Capítulo 4

Transporte eletrônico em cavidades mesoscópicas caóticas com um guia ideal e um não ideal: uma análise via método Tight-Binding

Neste capítulo, estudaremos as estatísticas da condutância e potência do ruído de disparo em cavidades mesoscópicas conectadas a guias não ideais, ou seja, com barreiras de tunelamento. Motivados pelo trabalho recém-publicado por Santos Kumar e Ashoter Dheer [14], intitulado “*Statistics of conductance and shot noise power in chaotic mesoscopic cavities with one ideal and one nonideal lead*”, onde são obtidos resultados para as estatísticas da condutância e potência do ruído de disparo para o caso $\beta = 2$ da TMA e comparados com simulações numéricas de Monte Carlo, aplicamos os resultados obtidos para essas propriedades de transporte e os comparamos com simulações de matrizes de espalhamento usando Kwant.

Para uma melhor compreensão acerca desse tema, faremos uma breve exposição dos resultados obtidos no trabalho supracitado. Em seguida, abordaremos as simulações via Kwant e, por fim, focaremos nos resultados obtidos através das simulações e as previsões da TMA, conforme fizemos no capítulo anterior.

Figura 4.1: Esquema de uma cavidade caótica conectada a dois guias suportando n e m canais abertos. O guia não ideal à esquerda compreende uma barreira de potencial, enquanto o guia à direita é ideal, ou seja, sem barreira de tunelamento.



Fonte: Ref. [14].

4.1 Distribuição Conjunta dos Autovalores de Transmissão

Consideramos uma cavidade mesoscópica caótica (por exemplo, um ponto quântico) acoplada ao mundo externo (reservatórios de elétrons) usando dois guias, um deles possui barreira de tunelamento presente e outro é balístico (Veja o esquema da figura 4.1). Esses dois guias são anexados para suportarem n e m canais, respectivamente. O número total de canais abertos é, portanto, $N_T = n + m$, com a suposição $n \leq m$. As probabilidades de tunelamento (transparências) para o guia da esquerda são denotadas por τ_1, \dots, τ_n . Para o guia ideal, obviamente temos $\tau_{n+1} = \dots = \tau_{n+m} = 1$. Assumindo a abordagem da TMA para o caso com simetria de reversão temporal quebrada ($\beta = 2$), a densidade conjunta de autovalores de transmissão ($\{T\} \equiv T_1, \dots, T_n$), conforme obtida por Vidal, Jaroz e Kanzieper, é dada por [51, 52]

$$\mathcal{P}(\{T\}) = \frac{1}{n!} C \Delta_n(\{T\}) \det[f_j(T_k)]_{j,k=1}^n, \quad (4.1)$$

onde

$$f_j(T_k) = T_k^\nu {}_2F_1(m+1, m+1; 1; (1-\tau_j)(1-T_k)), \quad (4.2)$$

com ${}_2F_1(a, b; c; x)$ sendo a função hipergeométrica de Gauss [53] e $\Delta_n(\{T\}) = \prod_{1 \leq j < k \leq n} (T_k - T_j)$ o determinante de Vandemonte. A constante C na normalização geral $C/n!$ é dada por

$$C = \frac{(n+m)!}{m! \Delta_n(\{\tau\})} \prod_{j=1}^n \frac{(m!)^2 \tau_j^{n+m}}{(m+j)!(m-j)!}. \quad (4.3)$$

Equivalentemente, a fórmula de integração de Andriéief [54] fornece uma representação determinantal para o fator C como

$$C = (\det[h_{j,k}]_{j,k=1}^n)^{-1}, \quad (4.4)$$

onde

$$\begin{aligned} h_{j,k} &= \int_0^1 T^{k-1} f_j(T) dT \\ &= B(k + \nu, 1) {}_2F_1(m + 1, m + 1; k + \nu + 1; 1 - \tau_j) \end{aligned} \quad (4.5)$$

sendo $B(a, b)$ a função beta [55] e $\nu = m - n$ o parâmetro de retangularidade ou assimetria.

4.2 Estatísticas da condutância e potência do ruído de disparo

Nesta seção, usamos a distribuição de autovalores de transmissão obtida na seção anterior para obtermos as estatísticas da condutância de Landauer e potência do ruído de disparo, que são os observáveis físicos de interesse neste trabalho.

4.2.1 Condutância

A condutância de Landauer, em unidades de e^2/h é dada por [1, 14, 56]

$$g = \sum_{j=1}^n T_j \quad (4.6)$$

Essa equação é uma estatística linear de autovalores de transmissão e, portanto, sua média pode ser obtida usando a densidade de níveis [14].

Média da Condutância

A condutância média pode ser obtida através da densidade de níveis $\mathcal{R}_1(T)$ [8, 14] como

$$\langle g \rangle = \int_0^1 T \mathcal{R}_1(T) dT = \int_0^1 T \mathcal{K}(T, T) dT. \quad (4.7)$$

sendo $\mathcal{K}(T, T)$ o kernel da correlação da densidade de níveis [8].

A referência [14] encontrou o seguinte resultado para a integral anterior

$$\langle g \rangle = C \sum_{i=1}^n \det [h_{j,k} + \delta_{ik}]_{j,k=1}^n \quad (4.8)$$

onde $h_{j,k}$ é dado pela Eq. (4.5), e δ_{ik} é a função delta de Kronecker [57].

Distribuição da condutância e função característica

A função densidade de probabilidade (PDF) da condutância pode ser calculada como [14]

$$F_g(g) = \int_0^1 \dots \int_0^1 \delta \left(g - \sum_{j=1}^n T_j \right) \mathcal{P}(\{T\}) dT_1 \dots dT_n \quad (4.9)$$

Note que a expressão acima tem um limite finito $[0, n]$, ou seja, a função densidade é diferente de zero apenas neste domínio.

Na referência [14], essa integral é resolvida para o caso de apenas um canal no guia não ideal, ou seja, $n = 1$. Além disso, na mesma referência, encontramos uma generalização para os casos de $n > 1$ em termos de uma função característica. Vejamos, então, quais são esses resultados.

- **Caso $n = 1$**

A densidade de probabilidade conjunta de autovalores de transmissão (Eq. (4.1)) se torna

$$\mathcal{P}(T) = m\tau_1^{m+1} T^{m+1} {}_2F_1(m+1, m+1; 1; (1-\tau_j)(1-T)) \quad (4.10)$$

Substituindo a equação anterior na equação (4.9), obtemos a PDF da condutância como sendo

$$\begin{aligned} F_g(g) &= m\tau_1^{m+1} \int_0^1 \delta(g-T) T^{m-1} {}_2F_1(m+1, m+1; 1; (1-\tau_j)(1-T)) dT \\ &= m\tau_1^{m+1} g^{m-1} {}_2F_1(m+1, m+1; 1; (1-\tau_j)(1-g)) \times \int_0^1 \left[\frac{\partial \Theta(T-g)}{\partial T} \right] dT \\ &= m\tau_1^{m+1} g^{m-1} {}_2F_1(m+1, m+1; 1; (1-\tau_j)(1-g)) [\Theta(1-g) - \Theta(-g)] \\ &= m\tau_1^{m+1} g^{m-1} {}_2F_1(m+1, m+1; 1; (1-\tau_j)(1-g)), \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde usamos as seguintes propriedades da função delta

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta(a-u) = \delta(u-a) \\ f(u)\delta(u-a) = f(a)\delta(u-a) \\ \delta(u-a) = \frac{\partial \Theta(u-a)}{\partial u} \end{array} \right.$$

sendo Θ a função de Heaviside. Agora, pode-se observar que $[\Theta(1-g) - \Theta(-g)]$ é não nulo apenas para $0 \leq g \leq 1$, o que é consistente com o limite $[0, n]$ para o caso geral de n mencionado abaixo da Eq. (4.9) [14].

• **Caso $n > 1$**

Avaliamos a função característica da condutância, por exemplo, consideramos a transformada de Fourier ($g \rightarrow \kappa$) de

$$F_g(g) = \frac{C}{n!} \int_0^1 \dots \int_0^1 \delta\left(g - \sum_{i=1}^n T_i\right) \Delta_n(\{T\}) \times \det[f_j(T_k)]_{j,k=1}^n dT_1 \dots dT_n. \quad (4.12)$$

Temos, portanto,

$$\begin{aligned} \tilde{F}_g(\kappa) &= \int_{-\infty}^{+\infty} F_g(g) e^{i2\pi g \kappa} dg \\ &= \frac{C}{n!} \int_0^1 \prod_{i=1}^n T_i^\nu e^{i2\pi \kappa T_i} \Delta_n(\{T\}) \\ &\quad \times \det[{}_2F_1(m+1, m+1, 1; (1-\tau_j)(1-T_k))]_{j,k=1}^n dT_1 \dots dT_n. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Usando a fórmula de integração de Andréief [54] para calcular a integral acima em termos de determinantes, obtemos [14]

$$\tilde{F}_g(\kappa) = C \det[\Phi_{j,k}(\kappa)]_{j,k=1}^n, \quad (4.14)$$

onde

$$\Phi_{j,k}(\kappa) = \int_0^1 T^{\nu+k-1} e^{i2\pi g \kappa T} {}_2F_1(m+1, m+1, 1; (1-\tau_j)(1-T)) dT. \quad (4.15)$$

Para obtermos a PDF da condutância, devemos tomar a transformada inversa de Fourier da

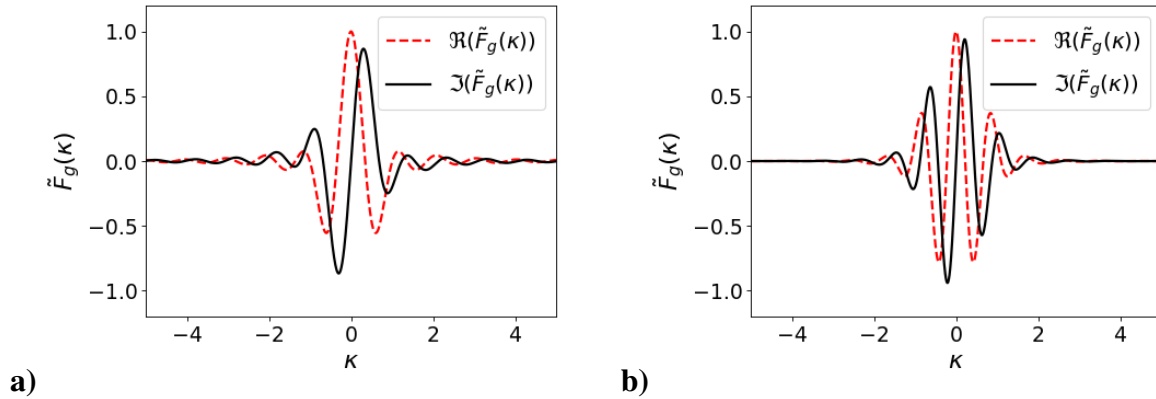
Eq. (4.14),

$$F_g(g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{F}_g(\kappa) e^{-i2\pi g\kappa} d\kappa \quad (4.16)$$

Analicamente, não é viável resolver essa integral, entretanto, recorreremos a uma abordagem de cálculo numérico e usamos uma soma truncada para aproximar o valor da integral acima. Estimamos um intervalo, por exemplo $[-L, L]$, em que $\tilde{F}_g(\kappa)$ apresenta um valor significativo. A partir daí, o intervalo é discretizado em termos de *bins* de largura $\delta\kappa$, de modo que a soma seja de $\kappa = -L$ a L em passos de $\delta\kappa$. Dessa forma, o valor aproximado da PDF da condutância pode ser escrito na forma [14]

$$F_g(g) \approx \sum_{-L}^L \tilde{F}_g(\kappa) e^{-i2\pi g\kappa} \delta\kappa. \quad (4.17)$$

Figura 4.2: Gráficos da Função característica da condutância para a) $n = 2, m = 2, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,57$, b) $n = 3, m = 3, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,62, \tau_3 = 0,63$.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Na figura 4.2, mostramos a parte real e imaginária de $\tilde{F}_g(\kappa)$ para dois conjuntos de valores de parâmetros. Podemos ver que nestes dois gráficos, L pode ser escolhido como sendo igual a 5, uma vez que além de -5 e 5 , a função característica já foi a zero, ou seja, já amorteceu plenamente. Em nossas implementações dessa abordagem, descobrimos que os resultados finais são bastante robustos a variações moderadas na escolha do comprimento de corte L e dos passos $\delta\kappa$.

4.2.2 Potência do Ruído de Disparo

Conforme vimos na seção 3.2.3, a potência do ruído de disparo dada pela Eq. (3.26), assim como a condutância, é uma estatística linear de autovalores de transmissão. Logo, podemos examinar algumas estatísticas interessantes como a média, a variância e a distribuição da potência do ruído de disparo. Neste trabalho, focamos apenas na distribuição da potência do ruído de disparo.

Distribuição da potência do ruído de disparo e função característica

A PDF da potencia do ruído de disparo pode ser calculada por [14]

$$F_p(p) = \int_0^1 \dots \int_0^1 \delta(p - \sum_{j=1}^n T_j(1 - T_j)) \mathcal{P}(\{T\}) dT_1 \dots dT_n \quad (4.18)$$

A densidade acima tem um suporte finito em $[0, n/4]$.

De forma análoga ao que fizemos na seção anterior, vamos tratar os casos em que $n = 1$ e em seguida apresentar o caso para $n > 1$.

- **Caso $n = 1$**

Conforme demonstrado na Ref. [14] a expressão analítica de forma fechada para a PDF da potência de ruído de disparo é

$$F_p(p) = \frac{m\tau_1^{m+1}}{\sqrt{1-4p}} \left[p_+^{m-1} {}_2F_1(m+1, m+1, 1; (1-\tau_1)p_-) + p_-^{m-1} {}_2F_1(m+1, m+1, 1; (1-\tau_1)p_+) \right], \quad (4.19)$$

onde

$$p_{\pm} = \frac{(1 \pm \sqrt{1-4p})}{2}. \quad (4.20)$$

- **Caso $n > 1$**

Adotamos a abordagem da função característica como no caso da condutância de Landauer. Portanto, seguindo o mesmo raciocínio, para a PDF da potência de ruído de disparo, temos a função característica correspondente como,

$$\tilde{F}_p(\omega) = C \det [\Psi_{j,k}(\omega)]_{j,k=1}^n, \quad (4.21)$$

sendo

$$\Psi_{j,k}(\omega) = \int_0^1 T^{v+k-1} e^{i2\pi\omega T(1-T)} {}_2F_1(m+1, m+1, 1; (1-\tau_j)(1-T)) dT. \quad (4.22)$$

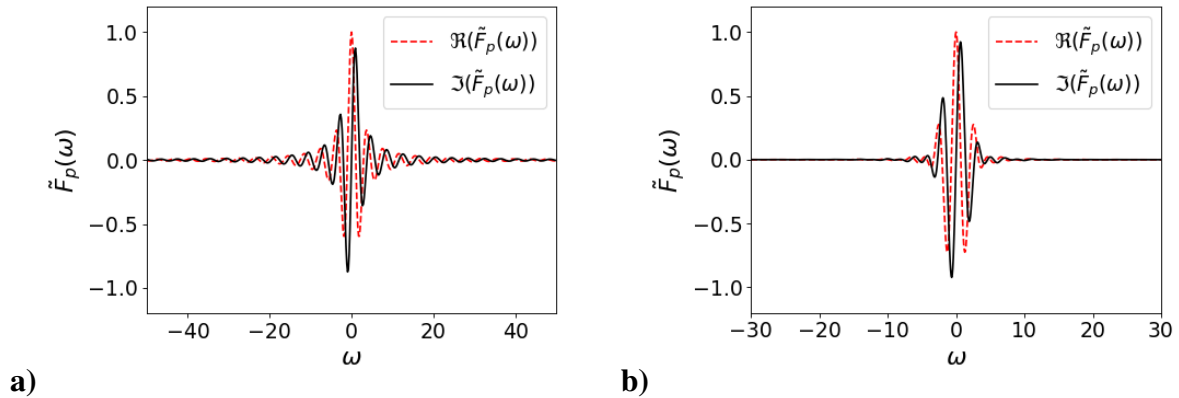
Portanto, a PDF da potência do ruído de disparo pode agora ser obtida como [14]

$$F_p(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{F}_p(\omega) e^{-i2\pi p\omega} d\omega \quad (4.23)$$

$$F_p(p) \approx \sum_{-L}^L \tilde{F}_p(\omega) e^{-i2\pi p\omega} \delta\omega. \quad (4.24)$$

onde L e $\delta\omega$ são decididos de forma semelhante aos do caso da distribuição da condutância. Na figura 4.3, mostramos gráficos da função característica $\tilde{F}_p(\omega)$ para dois conjuntos de parâmetros.

Figura 4.3: Gráficos da Função característica da potência do ruído para a) $n = 2, m = 2, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,57$, b) $n = 3, m = 3, \tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,62, \tau_3 = 0,63$.



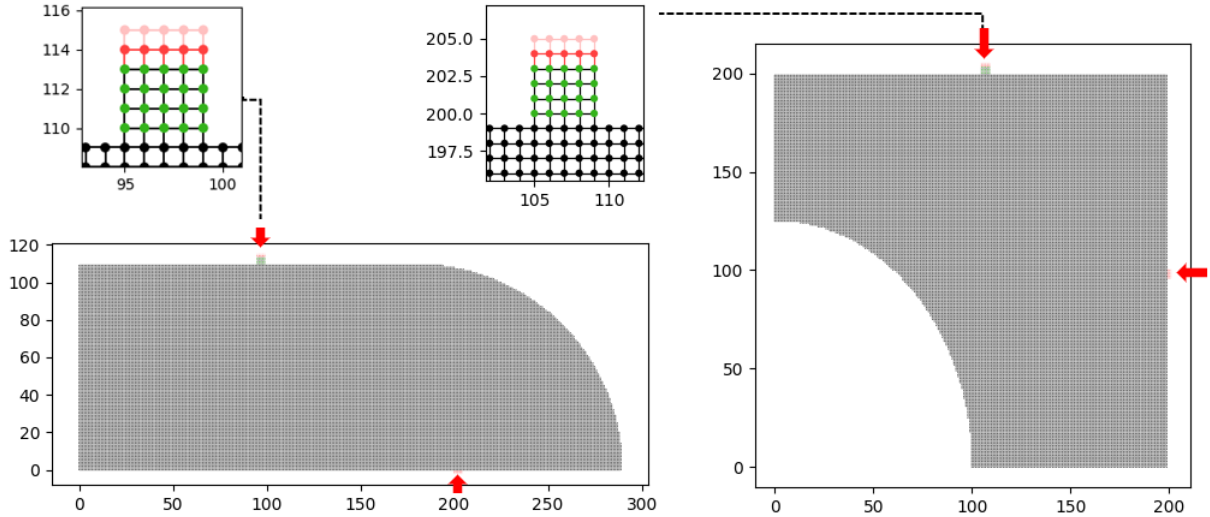
Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

4.3 Simulações via Kwant

Nesta seção, pretendemos verificar a consistência dos resultados derivados na seção anterior dentro da estrutura da TMA comparando-os com os resultados obtidos a partir da simulação das matrizes de espalhamento usando, agora, o método Tight-Binding.

Para nossas simulações envolvendo cavidades mesoscópicas caóticas com um guia ideal

Figura 4.4: Bilhares caóticos com uma barreira de potencial (no formato de uma fita retangular na cor verde) em um dos guias (superior). Na esquerda, temos o quarto do estádio de Bunimovich e à direita, o quarto de bilhar do Sinai. As setas apontam para os guias (em vermelho) conectados aos sistemas de bilhares.



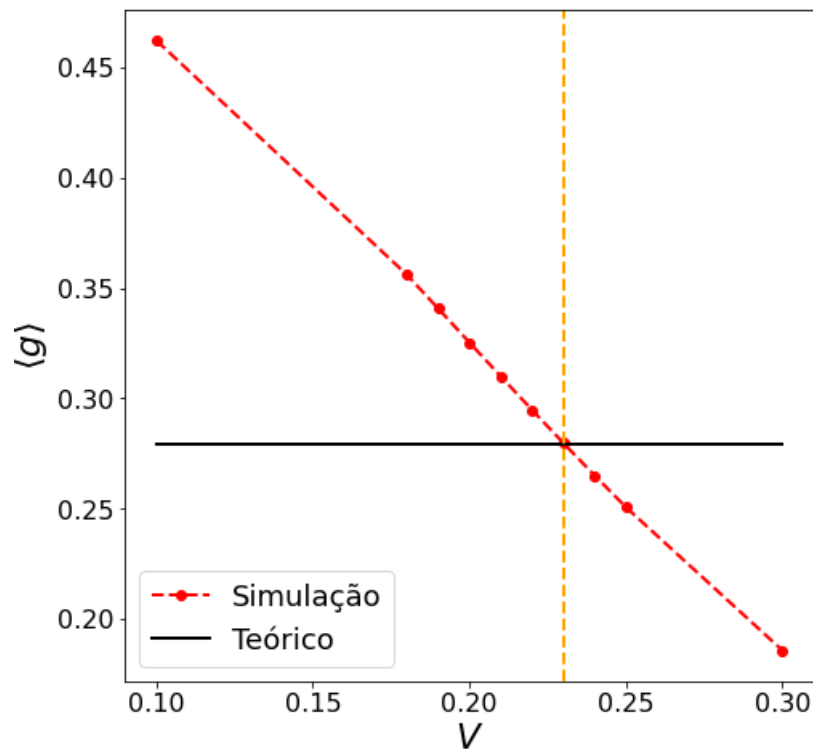
Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

e outro não ideal, consideramos os mesmos sistemas caóticos descritos na seção 3.3.1, contudo, introduzimos em ambos os sistemas uma barreira de tunelamento em um dos guias, digamos o da esquerda, a fim de configurar a situação apresentada na figura 4.1. Essa barreira possui potencial V e comprimento igual a 4 unidades. A largura da barreira varia de acordo com o número n de canais abertos, por exemplo. Assumimos que o guia conectado à barreira suporta n canais abertos. Na cavidade, por sua vez, o potencial é nulo, conforme visto anteriormente. Na figura 4.4. ilustramos os sistemas caóticos com a barreira de tunelamento.

Assim como fizemos para o caso de guias ideais, aqui, criamos um conjunto de matrizes de espalhamento variando a energia de 0,4 a 0,6, sob a aplicação de um campo magnético de 1×10^{-3} ($\beta = 2$), simulando 10.000 matrizes, bem como valores da condutância e da potência do ruído de disparo. Depois, obtemos as distribuições desses observáveis físicos para, finalmente, podermos compará-las com as previsões da TMA.

Para a implementação das simulações com Kwant, tivemos que escolher arbitrariamente um valor para o potencial V na barreira com o intuito de gerar dados de simulações que melhor representassem as distribuições da condutância e do ruído de disparo para os parâmetros τ_j (transparências) para diferentes números de canais abertos n , m . Tomamos como ponto de partida, o caso $n = 1$ e $m = 1$ com $\tau_1 = 0,44$ (probabilidade de tunelamento) para a condutância, conforme apresentado a Ref. [14]. Realizamos diversas simulações com potenciais da ordem de

Figura 4.5: Gráfico da média téorica da condutância e da média da simulação em função do potencial V na barreira para o caso $n = 1$, $m = 1$ e $\tau_1 = 0,44$. A linha vertical na cor laranja sinaliza o valor do potencial $V = 0,23$.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

10^1 , 10^{-1} , 10^{-2} e 10^{-3} . No entanto, em nossa análise, descobrimos que os potenciais da ordem de 10^{-1} , mais especificamente entre 0,20 a 0,30, apresentaram distribuições da condutância e potência do ruído de disparo que melhor se aproximavam dos resultados analíticos da TMA para o caso mencionado acima.

Após essas constatações, resolvemos então, calcular a média téorica da condutância (Eq. (4.8)) e compará-la com a média da simulação para ambos os sistemas caóticos (veja a figura 4.5). Concluímos, então, que o potencial $V = 0,23$ é o melhor valor para o caso $n = 1$, $m = 1$ e $\tau_1 = 0,44$. Portanto, fixamos o valor desse potencial para a barreira de tunelamento nos sistemas caóticos e prosseguimos realizando as simulações para as seguintes combinações de canais abertos $(n, m) = (1, 1), (1, 2), (2, 2), (2, 3), (2, 4)$ e $(3, 3)$ tanto para a condutância quanto para a potência do ruído de disparo.

Por fim, de posse dos resultados das simulações, nosso trabalho se restringiu a encontrar

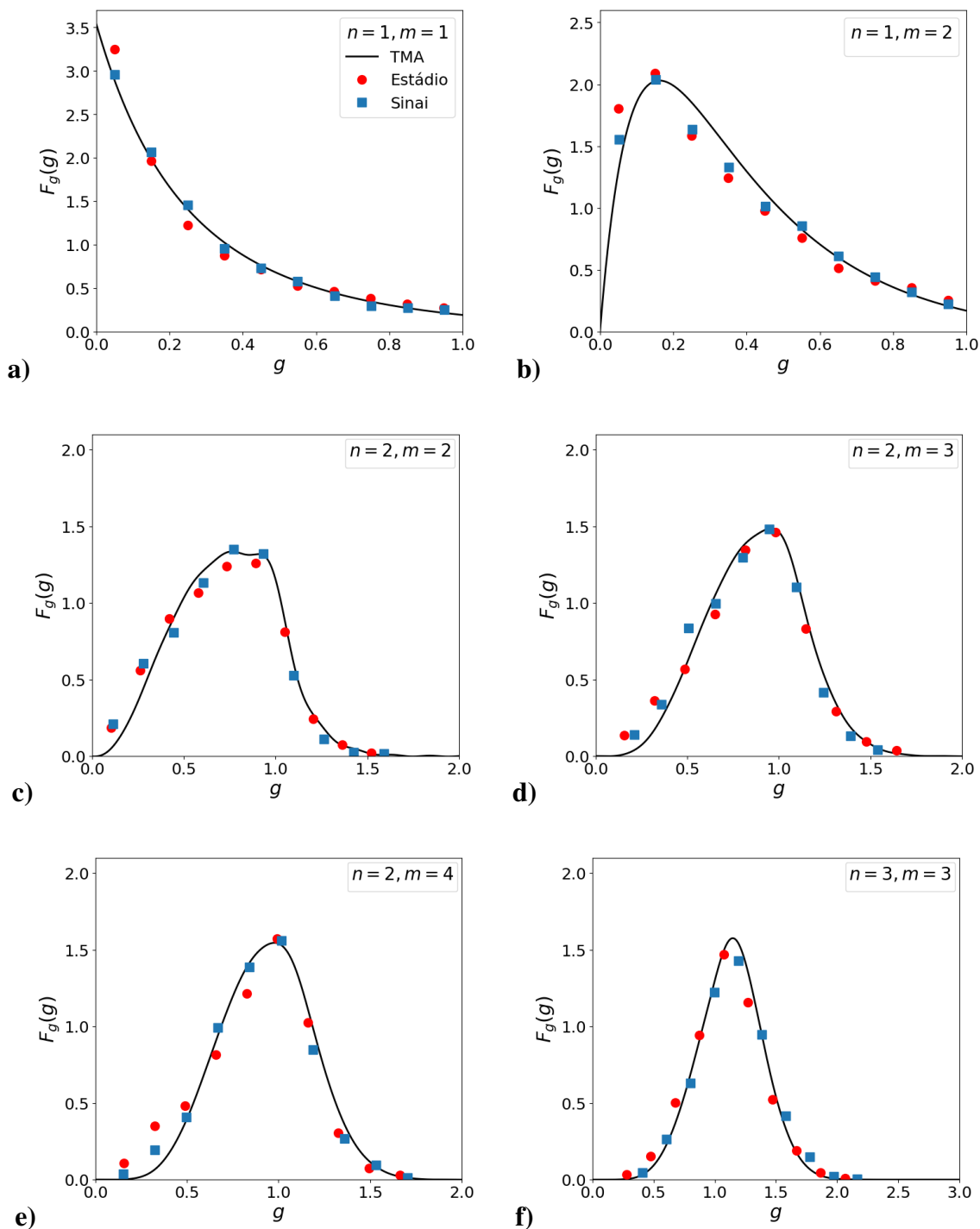
os parâmetros de transparências τ_j para cada número n de canais abertos conectados à barreira, que reproduzissem uma boa concordância entre os resultados analíticos obtidos nas subseções 4.2.1 e 4.2.2 e as simulações com Kwant. Portanto, considerando que os sistemas físicos em estudo apresentam as mesmas características (energia, campo magnético, potencial na barreira e número de canais n no guia da barreira), concluímos que os termos de transparências τ_j usados nas distribuições da condutância devem ser os mesmos usados para a potência do ruído de disparo. Os resultados encontrados são apresentados na seção a seguir.

4.4 Resultados Kwant e Previsões da TMA

A comparação entre os resultados das simulações com Kwant (com $B = 1 \times 10^{-3}$) e os resultados analíticos da TMA derivados nas subseções 4.2.1 e 4.2.2 para as distribuições da condutância e da potência do ruído de disparo são mostrados nas Figs. 4.6 e 4.7. Como pode ser observado, os resultados de nossas simulações via método TB estão em boa concordância com as previsões da TMA. Além disso, assim como no caso de guias ideais, discutido no Capítulo 3, uma observação cuidadosa parece revelar flutuações dos pontos de dados da simulação sobre as curvas analíticas da TMA. Essa flutuação pode ser resultado da discretização dos sistemas de bilhares em termos de redes, porém, seria necessário examinar cuidadosamente esse comportamento.

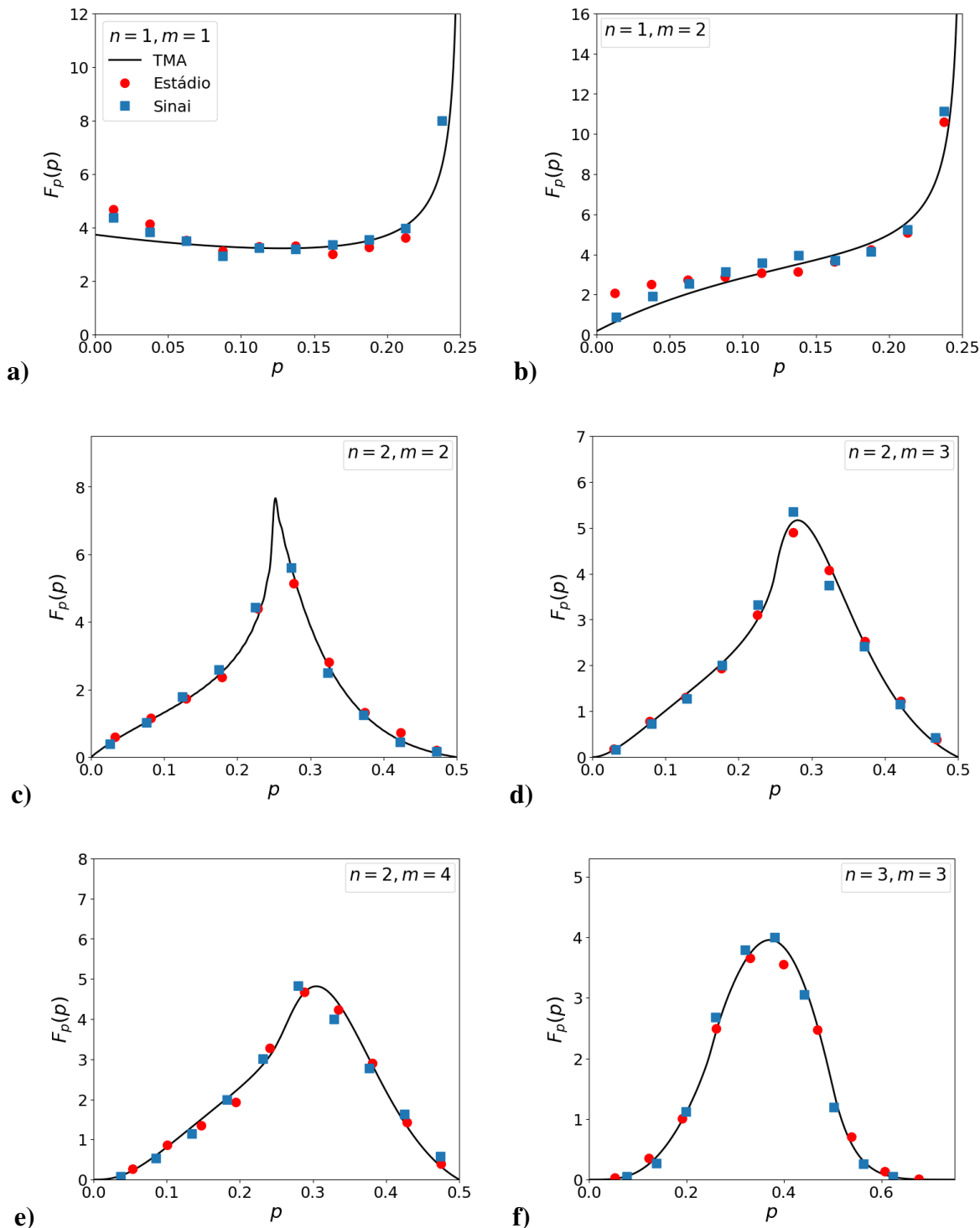
Note que para n pequeno, verifica-se que as curvas para casos não ideais são muito diferentes daquelas do caso ideal vistas anteriormente na Figura 3.7. Para o caso ideal, sabemos que as distribuições são muito bem aproximadas por gaussianas para $n \geq 4$ [9, 58]. Portanto, à medida que n aumenta, as distribuições para o caso não ideal também se tornam mais próximas de gaussianas, embora com média menor em comparação com as das gaussianas dos casos ideais.

Figura 4.6: Distribuições da condutância para várias combinações de n e m conforme indicado. Os valores de transparência usados nos gráficos são $\tau_1 = 0,44$ para (a) e (b) ; $\tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,57$ para (d), (e), (f) e $\tau_1 = 0,61, \tau_2 = 0,62, \tau_3 = 0,63$ para (g). Os símbolos representam as simulações Kwant e as curva sólidas os resultados analíticos da TMA.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Figura 4.7: Distribuições da potência do ruído de disparo para várias combinações de n e m conforme indicado. Os valores de transparência usados nos gráficos são os mesmos usados na Figura 4.6. Os símbolos representam as simulações Kwant e as curva sólidas os resultados analíticos da TMA.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Através deste trabalho, aprendemos os fundamentos básicos da Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA) e suas aplicações nos fenômenos de transporte quântico em sistemas mesoscópicos. Em particular, investigamos com sucesso as distribuições da condutância de Landauer e da potência do ruído de disparo de um ponto quântico. Um resumo dos resultados obtidos nesta dissertação segue abaixo:

- Simulamos duas cavidades mesoscópicas (com guias ideais) usando sistemas de bilhares caóticos em Kwant e estudamos a condutância de Landauer e a Potência do Ruído de disparo na ausência e presença de campo magnético externo. Os resultados das simulações em Kwant foram comparados com as previsões baseadas na TMA para conjuntos ortogonal ($\beta = 1$) e unitariamente invariantes ($\beta = 2$) e, obtemos, uma boa concordância, ratificando os estudos presentes na literatura [5, 13].
- Examinamos em detalhes os observáveis de transporte de carga em uma cavidade caótica conectada a um guia não ideal e um ideal, quando é aplicado um campo magnético externo que quebra a simetria de reversão temporal (SRT). Além disso, encontramos uma concordância muito boa entre os resultados analíticos da TMA deduzidos na Ref. [14] com simulações numéricas do Modelo Tight-Binding com base na matriz de espalhamento.
- Implementamos com sucesso o Kwant — uma ferramenta computacional para resolver problemas de transporte quântico. Usando Kwant, testamos os resultados analíticos da TMA conhecidos e mostramos uma boa correspondência entre a TMA e o modelo Tight-Binding que é utilizado em Kwant.

Considerando que há muito espaço para mais trabalhos a serem feitos na aplicação da

TMA para transporte quântico, o trabalho ainda pode ser bastante explorado para obter resultados semelhantes para $\beta = 4$ (em cavidades com guias ideais) bem como para $\beta = 1$ e $\beta = 4$ (em cavidades com um guia não ideal e um ideal, por exemplo, uma vez que a distribuição conjunta de autovalores de transmissão está disponível para esses casos [1].

Referências Bibliográficas

- [1] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, 69:731–808, Jul 1997.
- [2] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of majorana fermions and topological superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1037–1066, Sep 2015.
- [3] Y. Alhassid. The statistical theory of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, 72:895–968, Oct 2000.
- [4] Christoph W Groth, Michael Wimmer, Anton R Akhmerov, and Xavier Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6):063065, 2014.
- [5] Rohit Subbarayan Chandramouli. Investigation of quantum transport phenomena in mesoscopic systems using random matrix theory, 2018.
- [6] D Agassi, H.A Weidenmüller, and G Mantzouranis. The statistical theory of nuclear reactions for strongly overlapping resonances as a theory of transport phenomena. *Physics Reports*, 22(3):145–179, 1975.
- [7] Pier A Mello, Pedro Pereyra, and Thomas H Seligman. Information theory and statistical nuclear reactions. i. general theory and applications to few-channel problems. *Annals of Physics*, 161(2):254–275, 1985.
- [8] Santosh Kumar and Akhilesh Pandey. Jacobi crossover ensembles of random matrices and statistics of transmission eigenvalues. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 43(8):085001, 2010.
- [9] Santosh Kumar and Akhilesh Pandey. Conductance distributions in chaotic mesoscopic cavities. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 43(28):285101, 2010.

-
- [10] A Pandey and ML Mehta. Gaussian ensembles of random hermitian matrices intermediate between orthogonal and unitary ones. *Communications in Mathematical Physics*, 87(4):449–468, 1983.
- [11] Michael V Berry and Marko Robnik. Statistics of energy levels without time-reversal symmetry: Aharonov-bohm chaotic billiards. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 19(5):649, 1986.
- [12] Zhida Yan and R Harris. Stadium in a magnetic field: Time-reversal invariance symmetry breaking and energy level statistics. *EPL (Europhysics Letters)*, 32(5):437, 1995.
- [13] Rohit Subbarayan Chandramouli, Rohit Kumar Srivastav, and Santosh Kumar. Electronic transport in chaotic mesoscopic cavities: A kwant and random matrix theory based exploration. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 30(12):123120, 2020.
- [14] Ashutosh Dheer and Santosh Kumar. Statistics of conductance and shot noise power in chaotic mesoscopic cavities with one ideal and one nonideal lead. *Physica B: Condensed Matter*, 639:413939, 2022.
- [15] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [16] Yuli V Nazarov and Yaroslav M Blanter. *Quantum transport: introduction to nanoscience*. Cambridge university press, 2009.
- [17] Tiago Henrique Verçosa de Lima. Densidade de máximos da condutância em nanofios, 2018.
- [18] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 60:848–850, Feb 1988.
- [19] Francisco Assis Gois de ALMEIDA. Algoritmos numéricos de matrizes aleatórias aplicados a sistemas mesoscópicos. 2010.
- [20] Elenilda Josefa de Oliveira et al. Transporte quântico decoerente em sistemas mesoscópicos. 2015.

-
- [21] DA Wharam, Trevor John Thornton, R Newbury, M Pepper, H Ahmed, JEF Frost, DG Hasko, DC Peacock, DA Ritchie, and GAC Jones. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *Journal of Physics C: solid state physics*, 21(8):L209, 1988.
- [22] Thiago Conrado de Vasconcelos et al. Efeitos quânticos em graus de liberdade eletrônicos e fotônicos em dispositivos mesoscópicos caóticos. 2020.
- [23] José Jaédson Barros da Silva. Implementação numérica da teoria quântica de circuitos. 2019.
- [24] Pier A Mello and Harold U Baranger. Interference phenomena in electronic transport through chaotic cavities: an information-theoretic approach. *Waves in random media*, 9(2):105, 1999.
- [25] Rolf Landauer. Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1(43):8099, 1989.
- [26] Rolf Landauer. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical magazine*, 21(172):863–867, 1970.
- [27] M Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Physical review letters*, 57(14):1761, 1986.
- [28] Pier A Mello and Narendra Kumar. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations. A Maximum Entropy Viewpoint*. Oxford University Press, 2004.
- [29] Anderson Luiz da Rocha e Barbosa. Estatística de contagem de carga e efeitos de interferência em sistemas mesoscópicos. 2009.
- [30] PW Brouwer and CWJ Beenakker. Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems. *Journal of Mathematical Physics*, 37(10):4904–4934, 1996.
- [31] Ailton Fernandes de Macedo Júnior. Propriedades universais de transporte em pontos quânticos com simetria quiral. Master's thesis, Universidade Federal de Pernambuco, 2002.
- [32] ML Mehta. *ML: Random matrices*, 1991.

- [33] Varlei Rodrigues and Daniel M Ugarte. Quantização da condutância: Um experimento simples para o ensino de física. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 21(2), 1999.
- [34] Alberto Carlos Bertuola, Mahir Saleh Hussein, and Mauricio Porto Pato. Técnicas e construções de ensembles de matrizes aleatórias e estatísticas correlatas. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 28:333–340, 2006.
- [35] E Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions, *the annals of mathematics*, vol. 62, no. 3, pp. 548–564, 1955.
- [36] Freeman J Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. i. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):140–156, 1962.
- [37] UNIVERSITÄT GRAZ. <https://physik.uni-graz.at/de/itp/sst/images/e-raster-mikroskop.png>. Acesso em: 12 fev. 2023.
- [38] HIT. <https://www.hit.ac.il/.upload/sciences/kanzieper/2.jpg>. Acesso em: 12 fev. 2023.
- [39] J Napolitano and JJ Sakurai. Mecânica quântica moderna, tradução técnica: Silvio Renato Dahmen, 2013.
- [40] Jukka P Pekola, Juha J Vartiainen, Mikko Möttönen, Olli-Pentti Saira, Matthias Meschke, and Dmitri V Averin. Hybrid single-electron transistor as a source of quantized electric current. *Nature Physics*, 4(2):120–124, 2008.
- [41] Edward V Shuryak and JJM Verbaarschot. Random matrix theory and spectral sum rules for the Dirac operator in QCD. *Nuclear Physics A*, 560(1):306–320, 1993.
- [42] Jacobus Verbaarschot. Spectrum of the QCD Dirac operator and chiral random matrix theory. *Physical Review Letters*, 72(16):2531, 1994.
- [43] Alexander Altland and Martin R Zirnbauer. Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures. *Physical Review B*, 55(2):1142, 1997.
- [44] Marília Santos Melo de Barros. Método diagramático aplicado ao bilhar de Dirac caótico. 2014.
- [45] Darlene Pereira Freitas. Propriedades eletrônicas de um wormhole de grafeno. 2022.

- [46] Helder Silvério Borba. Teoria de circuitos para a estatística de contagem de carga. Master's thesis, Universidade Federal de Pernambuco, 2005.
- [47] Francisco Ariaildo da Costa Sá. Cavidades balísticas caóticas com contato não ideal: Resultados exatos via funções hipergeométricas de argumento matricial.
- [48] M. H. Pedersen, S. A. van Langen, and M. Büttiker. Charge fluctuations in quantum point contacts and chaotic cavities in the presence of transport. *Phys. Rev. B*, 57:1838–1846, Jan 1998.
- [49] Rudolph Peierls. Zur theorie des diamagnetismus von leitungselektronen. *Zeitschrift für Physik*, 80(11-12):763–791, 1933.
- [50] Nathan Lima PESSOA. Caracterização de séries temporais em sistemas físicos: do transporte eletrônico em condutores mesoscópicos à dinâmica da pandemia de covid-19. 2022.
- [51] Pedro Vidal and Eugene Kanzieper. Statistics of reflection eigenvalues in chaotic cavities with nonideal leads. *Physical Review Letters*, 108(20):206806, 2012.
- [52] Andrzej Jarosz, Pedro Vidal, and Eugene Kanzieper. Random matrix theory of quantum transport in chaotic cavities with nonideal leads. *Physical Review B*, 91(18):180203, 2015.
- [53] EW Weisstein. Hypergeometric function. from mathworld—a wolfram web resource, 2015. URL\url {<http://mathworld.wolfram.com/HypergeometricFunction.html>}.[Online].
- [54] C Andréief. Note sur une relation entre les intégrales définies des produits des fonctions. *Mém. de la Soc. Sci. Bordeaux*, 2(1):1–14, 1883.
- [55] Eric W Weisstein. Beta function. <https://mathworld.wolfram.com/>, 2002.
- [56] R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 1(3):223–231, 1957.
- [57] Wolfram Research. <https://reference.wolfram.com/language/ref/kroneckerdelta.html>, 2017. Acesso em: 08 dez. 2022.
- [58] B. A. Khoruzhenko, D. V. Savin, and H.-J. Sommers. Systematic approach to statistics of conductance and shot-noise in chaotic cavities. *Phys. Rev. B*, 80:125301, Sep 2009.