



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Departamento de Física

Pós-graduação em Física Aplicada

Bilhar de Dirac Caótico: Uma Abordagem Via Teoria de Matrizes Aleatórias

Aguinaldo José do Nascimento Junior

Dissertação de Mestrado

Recife - PE
10 de Março de 2014

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Departamento de Física

Aguinaldo José do Nascimento Junior

Bilhar de Dirac Caótico: Uma Abordagem Via Teoria de Matrizes Aleatórias

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em
Física Aplicada do Departamento de Física da Universi-
dade Federal Rural de Pernambuco como requisito par-
cial para obtenção do grau de Mestre em Física.*

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

Recife - PE
10 de Março de 2014

À minha família

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus por tudo que ele tem realizado na minha vida, especialmente nesses dois últimos anos, pois, quando eu achava que não dava para continuar, ele me carregou nos braços, me abençoou e me ajudou na caminhada.

Também agradeço a toda minha família, em especial aos meus pais Aginaldo e Lourdes, pois me deram todo apoio nesta jornada de graduação e mestrado, me ajudando em todos os aspectos e me dando todo o amor que um filho pode receber.

Também sou muito grato a minha esposa Roseane por estar sempre ao meu lado, por entender a minha necessidade de estudar por horas intermináveis, por muitas vezes me chamar na madrugada, pois sentado à mesa eu já dormia sobre os livros e por sua dedicação incondicional.

Meus sinceros agradecimentos, também, a todos os colegas que convivi, no DF, ao longo desses anos, em especial aos amigos que me ajudaram assim que cheguei: Wellington (companheiro desde a graduação), Edinaldo (o mais chorão e inteligente de todos) e os dois Carlos, Eduardo e Alberto, ambos companheiros do grupo de física mesoscópica, com estes, foram bons momentos de troca de informação científica, dúvidas “infinitas”, dor de cabeça e compartilhamento das soluções dos problemas referentes as ferramentas computacionais, aprendemos a sorrir em meio as dificuldades, mas para alcançar esse feito, adotamos a metáfora “hoje sou costas, a manhã serei chicote”.

Aos funcionários do departamento de física e aos professores, sempre disponíveis, Adalto José, Aílton Macedo e Pedro Hugo que foram meus formadores nas principais disciplinas do mestrado e veem ajudando no meu conhecimento acadêmico desde a graduação, fica aqui, meu obrigado por tudo.

Gostaria de agradecer de forma bastante especial ao professor Anderson Luiz, primeiramente pela amizade, pois dificilmente se encontra pessoas de tamanha humildade e gentileza, principalmente no meio acadêmico. Depois pela orientação, tamanha dedicação me ajudou a gostar e aprender o que ainda era desconhecido (a física mesoscópica) e promover o meu desenvolvimento profissional.

Por fim, agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

*“O matemático joga um jogo no qual ele mesmo inventa as regras,
enquanto o físico joga um jogo no qual as regras são inventadas pela
natureza.”*

— P.A.M. DIRAC

Resumo

Nesta dissertação, estudamos o transporte eletrônico quântico através de uma cavidade quântica caótica com simetria de sub-rede (SSR) ou simetria quirial. O pré-requisito para a simetria quirial é a presença da estrutura de rede bipartida com duas sub-redes interconectadas. A SSR descreve sistemas com amplitudes de *hopping* aleatórios (desordem não diagonal) que são descritos pela equação de Dirac, dando origem ao nome bilhar de Dirac caótico. Por esses motivos, a matriz Hamiltoniana (\mathcal{H}) deve ser definida em forma de blocos fora da diagonal. Relacionamos a condutância à matriz de espalhamento (\mathcal{S}), através do formalismo de Landauer-Büttiker, e desenvolvemos duas simulações numéricas independentes, baseadas na teoria de matrizes aleatórias (TMA), para gerar a matriz \mathcal{S} dos ensembles quirais. Ambas dão suporte aos resultados analíticos e são ferramentas estritamente necessárias para encontrarmos a distribuição da condutância, haja vista a não existência de resultados exatos. Os métodos numéricos que serão utilizados são: a técnica da matriz de espalhamento, associada a tabela de *Cartan* do espaço simétrico Riemanniano, a qual se utiliza da decomposição QR (Fatoração de *Gram-Schmidt*) para construção do ensemble circular, e o modelo hamiltoniano (*Mahaux-Weidenmüller*), que se utiliza do ensemble gaussiano. Os dados das duas simulações numéricas para a média, variância e distribuição da condutância, serão comparados entre si e com os resultados analíticos, quando existirem. Como continuidade de nosso trabalho, investigamos a quebra de coerência de fase no bilhar de Dirac caótico conectado a dois terminais (guias de onda ideais) acoplados a reservatórios de elétrons. A decoerência é modelada com a ligação de um terceiro guia “fictício” ao bilhar, acoplado a um outro reservatório de elétrons, de tal maneira, que em média não exista corrente através dele.

Palavras-chave: Física Mesoscópica, Transporte Eletrônico Quântico, Teoria de Matrizes Aleatórias, Método da Decomposição QR, Modelo Hamiltoniano, Simulação Numérica.

Abstract

In this work, we study the quantum electronic transport through a chaotic quantum cavity with sublattice (SLS) or chiral symmetry. The chiral symmetry is present at bipartite lattice structure with two interconnected sublattices. The SSL describes systems with random *hopping* amplitudes (off disorder diagonal) which are described by the Dirac equation giving rise to the name chaotic Dirac billiard. In these case, the Hamiltonian matrix (\mathcal{H}) must be defined as an off block diagonal matrix. The conductance can be written in function of the scattering matrix (\mathcal{S}) within the Landauer-Büttiker formalism, therefore we develop two independent numerical simulations, based on random matrix theory (RMT), to obtain the \mathcal{S} matrix with chiral symmetry². Both numerical methods are used to give support to analytical results and to analyze the distribution of conductance for which there are no analytical expressions. The numerical methods, which been implemented, are: the scattering matrix formalism associated with the *Cartan* table of Riemannian symmetric spaces, which utilizes the QR decomposition (Gram-Schmidt factorization) to build of the circular ensemble, and the Hamiltonian model (Mahaux-Weidenmüller) which utilizes Gaussian ensembles. The data were obtained by the two numerical simulations to the mean, variance and distribution of conductance and are compared with each other and with analytical results, when they exist. In addition, we investigated the breaking of phase coherence in the chaotic Dirac billiard connected to two terminals (ideal waveguides) coupled to electron reservoirs. The decoherence is modeled with the binding of a third “fictitious” terminal to the billiard, coupled to a another electron reservoir, so that on average there is no current through it.

Keywords: Mesoscopic Physics, Quantum Electronic Transport, Random Matrix Theory, QR Decomposition Method, Hamiltonian Model, Numerical Simulation.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Física Mesoscópica	2
1.1.1	Regimes de Transporte	3
1.2	Bilhar Quântico	4
1.2.1	Gás de Elétrons Bidimensional	4
1.2.2	Pontos Quânticos	5
1.2.3	Bilhar e Caos	7
1.3	Bilhar de Dirac	7
1.3.1	Simetria de sub-rede	8
1.3.2	Grafeno	9
1.3.3	Isolantes Topológicos	11
1.4	Fenômenos em Sistemas Mesoscópicos	12
1.4.1	Quantização da Condutância	13
1.4.2	Localização Fraca	16
1.4.3	Flutuação Universal da Condutância	18
1.5	Formalismo de Espalhamento	20
1.5.1	Teoria e Matriz de Espalhamento	21
1.5.2	Simetrias da Matriz \mathcal{S}	24
1.5.2.1	Unitariedade	25
1.5.2.2	Reversão temporal	25
1.6	Teoria de Landauer-Büttiker	29
1.6.1	Condutância	31
1.7	A Dissertação	31
1.7.1	Capítulo 2	32
1.7.2	Capítulo 3	32
1.7.3	Capítulo 4	32
1.7.4	Capítulo 5	33
2	Teoria de Matrizes Aleatórias, Ensemble de Wigner-Dyson e o Bilhar Quântico	34
2.1	Teoria de Matrizes Aleatórias	34
2.2	Ensembles Gaussianos	35
2.3	Abordagem Hamiltoniana	37
2.3.1	Geração numérica	38
2.4	Abordagem da Matriz de Espalhamento \mathcal{S}	39

2.4.1	Ensemble Circular	40
2.4.2	Técnica da Decomposição QR (Fatoração de Gram-Schmidt)	41
2.4.2.1	Decomposição QR aplicada à simetria Wigner Dyson	42
2.5	Resultados Analíticos	44
2.5.1	Média da Condutância	45
2.5.2	Variância da condutância	46
2.6	Resultados Numéricos	47
3	Bilhar de Dirac Caótico	50
3.1	Simetria Quiral	50
3.1.1	Hamiltoniano desordenado com simetria quiral	51
3.2	Modelo Hamiltoniano	52
3.2.1	Geração Numérica	53
3.3	Matriz de Espalhamento	54
3.4	Decomposição QR Aplicada à Simetria Quiral	55
3.5	Resultados Analíticos	56
3.5.1	Média da condutância	57
3.5.2	Flutuação universal da condutância	58
3.6	Resultados Numéricos	60
3.7	Comparação com o Caso Wigner-Dyson	63
4	Descoerência no Bilhar de Dirac Caótico	67
4.1	Formulação do Problema	67
4.1.1	Correção de Localização e Anti-localização Fraca	69
4.2	Flutuação Universal da Condutância	71
4.3	Distribuição da Condutância	74
5	Conclusões e Perspectivas	76
A	Distribuição Gaussiana de Matrizes Aleatórias	77
B	Distribuição Gaussiana da Matriz Aleatória Quiral	80
C	Relação de Simetria da Matriz \mathcal{S}	82

Lista de Figuras

- 1.1 Na junção entre o AlGaAs e o GaAs, podemos ver o perfil das bandas de condução (linha superior), e valência (linha inferior) e suas respectivas energias, E_C e E_V além da energia de Fermi, E_F , (a) antes e (b) depois da transferência de carga, onde observamos a formação do gás de elétrons bidimensional *2DEG*. 5
- 1.2 Desenho esquemático e a imagem de um ponto quântico lateral feito no aprisionamento de elétrons na junção entre o AlGaAs e o GaAs. 6
- 1.3 Em (a), a rede bipartida é hexagonal, em forma de um favo de mel. Em (b) a rede é irregular e em (c) não há bipartição. Sítios da sub-rede *A* são representados por bolas pretas, enquanto, sítios da sub-rede *B* são representados por bolas brancas. As bolas cinzas representam os sítios que não pertencem a nenhuma sub-rede. 8
- 1.4 No topo da figura, vemos a representação de uma mono-camada de grafeno (átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal *2D*) dando origem a fulerenos quase-*0D*, nanotubos de carbono quase-*1D* e grafite *3D*, respectivamente da esquerda para à direita. 9
- 1.5 (Esquerda) estrutura de banda da monocamada de carbono. As bandas de valência ($E < 0$) e de condução ($E > 0$) formam os cones. Os cones marcados por pontos brancos (pretos) são conectados por vetores da rede recíproca, então eles são equivalentes. (Direita) sub-rede triangular do grafeno. Cada átomo na sub rede (*A*) tem 3 vizinhos próximos na sub-rede *B* e vice-versa. 10
- 1.6 (Esquerda) micrografia eletrônica de um transistor de grafeno. O pequeno ponto quântico (*Quantum dot*) no centro é conectado a regiões de contato (*Contact regions*) através de estritas constrições. (Direita) esquema mostrando um hipotético transistor baseado em um ponto quântico de grafeno. 11
- 1.7 Representação do modelo de reservatórios do formalismo de Landauer. A amostra bidimensional se comporta como uma região espalhadora e é conectada a guias ideais semi-infinitos contendo canais de propagação abertos acoplados a reservatórios de elétrons. 12
- 1.8 (a) Ilustração do ponto de contato quântico construído sobre *2DEG*, os triângulos formam a constrição. (b) A quantização da condutância pode ser obtida considerando a constrição como um guia de onda, no qual um pequeno número de modos transversais de propagação (canais) podem atravessar a constrição. 13

- 1.9 Condutância do ponto de contato quântico como função da voltagem de porta aplicado na constrição. Observamos o comportamento tipo escada da condutância, revelando a quantização da condutância em semicondutores onde $\lambda_F \approx 30nm$. 14
- 1.10 À esquerda temos a imagem da microscopia de força atômica de um dispositivo de uma camada de grafeno entre dois eletrodos supercondutores de alumínio. À direita vemos a representação esquemática desse experimento. 15
- 1.11 Condutância, G , em relação a voltagem de porta, V_G , em alto campo magnético, $B = 10T$ e temperatura $T = 100mK$ mostrando as séries de degraus em valores semi-inteiros de $4e^2/h$, característica da anomalia do EHQ em uma camada de grafeno. 16
- 1.12 Resultado numérico da flutuação da condutância normalizada em e^2/h como função da mudança de fase no modelo teórico de distribuição de impurezas. 17
- 1.13 (Esquerda) condutância medida em $T = 50mK$ para um ponto quântico em forma de um bilhar tipo *stadium*. (Direita) medição da condutância em $T \approx 1.5K$ para dois diferentes dispositivos de uma única camada de grafeno, a curva inferior corresponde ao experimento descrito na figura 1.10. 18
- 1.14 À esquerda, temos a condutância em função do campo magnético B para um fio de ouro quase-unidimensional. À direita, vemos a distribuição da condutância $P(G)$ construída a partir da figura anterior. Percebemos que $P(G)$ é gaussiana em torno da média $\langle G \rangle$ e dominada, essencialmente, pela variância $var(G)$. 19
- 1.15 Flutuação da condutância em função do voltagem de porta de um ponto quântico de um isolante topológico entre fonte e dreno de portadores de cargas. 20
- 1.16 Duas medições subsequentes da condutância em função do campo magnético a $T \approx 1,5K$ para um dispositivo de uma única camada de grafeno, como descrito na figura 1.10. 20
- 1.17 Condutância de um ponto quântico de grafeno acoplado a fonte e dreno de portadores de carga, como função da voltagem de porta. 20
- 1.18 Cavidade caótica bidimensional conectada a L guias de onda ideais. 22
- 1.19 À esquerda, temos uma trajetória clássica que para em $t = 0$ e à direita o movimento é revertido $\vec{p}_{t=0} \rightarrow -\vec{p}_{t=0}$. 26
- 2.1 Fatoração QR (Gram-Schmidt) da matriz aleatória sem correção de fase. O histograma de fases foi plotado para uma matriz aleatória de dimensão $N_T = 50$ e (10^6) realizações. 43
- 2.2 Histograma de fases corrigidas. Desse modo, a matriz unitária, obtida pela decomposição QR, é distribuída uniformemente com a medida de Haar 43
- 2.3 Representação de uma cavidade balística caótica modelada por um bilhar quântico. 44

- 2.4 A média (acima) e a variância (abaixo) da condutância são plotados em unidades de $2e^2/h$ e $4e^4/h^2$, respectivamente. (a-b) contatos simétricos $N = N_1 = N_2$ e (c-d) contatos assimétricos com $N_1 = 2$ e $0 < N_2 \leq 10$. As linhas pontilhadas, que estão sobrepostas na figura, são obtidas pelas simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e pelo Modelo Hamiltoniano (MH). As linhas sólidas são os resultados exatos. 47
- 2.5 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar quântico e simétrico dos ensembles de Wigner-Dyson em unidades de $2e^2/h$. Os pontos e as linhas representam respectivamente as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e o Modelo Hamiltoniano (MH) com 10^6 realizações da matriz \mathcal{S} . As colunas, da esquerda para direita, correspondem a $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 , enquanto as linhas, de cima para baixo, correspondem a $\beta = 1, 2$ e 4 . 48
- 3.1 Fatoração QR (Gram-Schmidt) da matriz aleatória simplética sem correção de fase, à esquerda, e com fase corrigida, à direita. O histograma, de fases, normalizado foi plotado para uma matriz aleatória de dimensão $N = 100$, por conta da duplicidade do ensemble simplético, e um milhão (10^6) de realizações. 56
- 3.2 A média (acima) e a variância (abaixo) da condutância são plotados em unidades de $4e^2/h$ e $8e^4/h^2$, respectivamente. (a-b) contatos simétricos $N = N_1 = N_2$ e (c-d) contatos assimétricos com $N_1 = 2$. As linhas pontilhadas são obtidas pelas simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e pelo Modelo Hamiltoniano (MH). As linhas sólidas são os resultados exatos 3.24 e 3.31. 60
- 3.3 O ensemble de 3×10^4 elementos de G para o caso ortogonal ($\beta = 1$). Da esquerda para a direita temos os números de canais $N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 respectivamente. A figura diz respeito à um único método numérico. 61
- 3.4 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar de Dirac dos ensembles quirais em unidades de $4e^2/h$. Os pontos e as barras representam respectivamente as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e o Modelo Hamiltoniano (MH) com 10^6 realizações da matriz \mathcal{S} . As colunas, da esquerda para direita, correspondem a $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 , enquanto as linhas, de cima para baixo, correspondem a $\beta = 1, 2$ e 4 . 62
- 3.5 A figura indica a comparação entre a variância $var(G)$ (em unidades de $8e^4/h^2$) do bilhar de Dirac dos ensembles quirais (CH) e a variância $var(G)_{wd}$ (em unidades de $4e^4/h^2$) do bilhar caótico de Wigner-Dyson (WD), ambos com terminais simétricos, $N = N_1 = N_2$. 65
- 3.6 A figura mostra a comparação da distribuição da condutância $P(G)$ no regime quântico extremo ($N_1 = N_2 = 1$), entre o bilhar de Dirac caótico (coluna da direita) em unidades de $4e^2/h$, com o bilhar quântico caótico (coluna da esquerda) em unidades de $2e^2/h$. 66

- 4.1 Modelo esquemático da descoerência por inclusão de um terceiro guia. O sistema é um bilhar de Dirac caótico aberto com um guia adicional, cuja tensão é escolhida para fazer o fluxo de corrente, em média, igual a zero. O guia adicional, portanto, induz defasagem sem perda de partículas. 68
- 4.2 Correção de (a) Localização fraca e (b) anti-localização como função do número de canais de quebra de fase, N_ϕ , para o regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, na escala linear e log-log (painel menor). Os símbolos representam as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (\square QR) e o Modelo Hamiltoniano (\bullet MH) para um ensemble quirral com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação. 70
- 4.3 Variância da condutância como função de N_ϕ no regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, na escala linear e log-log (painel menor). As curvas, de cima para baixo, especificam o comportamento de $\beta = 1, 2, 4$, respectivamente. Os símbolos representam as simulações numéricas (\square QR) fatoração de Gram-Schmidt e (\bullet MH) o Modelo Hamiltoniano para um ensemble quirral com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação. 72
- 4.4 A razão entre as variâncias da condutância para $N_\phi \gg 1$ elas tendem para 2,5 devido ao $\text{chECO}/\text{chECU}$, e 0,44 devido ao chECS/ECU , como obtido na equação 4.17. Os símbolos representam as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (\blacksquare QR) e o Modelo Hamiltoniano (\bullet MH) para um ensemble quirral com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação. 73
- 4.5 Distribuição da condutância para o bilhar de Dirac (coluna da direita) e para o bilhar quântico caótico (coluna da esquerda). A distribuição $P(G)$ tende a gaussiana com N_ϕ aumentando. Mostramos o resultado para N_ϕ variando de 0 a 5. Os símbolos são as simulações numéricas \circ QR (fatoração de Gram-Schmidt) e $+$ MH (Modelo Hamiltoniano) para os ensembles quirrais e de Wigner-Dyson, ambos com 10^6 realizações. 75

Lista de Tabelas

2.1	Classes de universalidade da teoria da matriz aleatória	37
2.2	Classificação de Dyson dos ensembles circulares	41
2.3	A Tabela de Cartan dos espaços simétricos Riemannianos descreve as condições impostas as três classes de simetria Wigner-Dyson, Quiral e BDG e os respectivos vínculos impostos aos ensembles. No nosso caso, mostramos e estudamos apenas as duas primeiras.	41
3.1	Resumo dos resultados para as médias e variâncias da condutância nos casos Quiral e Wigner-Dyson, ambos, considerados no limite quântico extremo.	63

Lista de Nomenclaturas e Símbolos

$(E_x^{(l)})$	Energia longitudinal
$(E_{y,n}^{(l)})$	Energia transversal
\bar{N}_ϕ	Número de canais abertos no terceiro terminal
β	Índice de Dyson
$\chi_n(y_l)$	Função de onda Transversal
δG	Correção de localização fraca
ϵ_F	Energia de Fermi
λ	Parâmetro numérico
λ_F	Comprimento de onda de Fermi
$\langle G \rangle$	Média da condutância
\mathcal{C}	Operador de conjugação complexa
\mathcal{H}	Hamiltoniano
\mathcal{S}	Matriz de espalhamento
$\mathbb{1}$	Matriz identidade
μ	Potencial eletroquímico
$\Psi(\vec{r})$	Função de onda
τ	Tempo de relaxação do momento
τ_D	Tempo de permanência
τ_ϕ	Tempo de defasagem (descoerência)
τ_{erg}	Tempo ergódico
Θ	Operador antiunitário de reversão temporal
$\varphi_n(x_l)$	Função de onda longitudinal
$\vec{\sigma}$	Vetor de três componentes das matrizes de Pauli

\vec{r}	Vetor posição
ξ	Comprimento de localização
$AlGaAs$	Arseneto de gálio dopado com alumínio
$C_{1,2}$	Matrizes de projeção
G	Condutância
$G_0 = 2e^2/h$	Quântum de condutância
$GaAs$	Arseneto de gálio
h, \hbar	Constante de Planck e $\hbar \equiv h/2\pi$
I	Corrente elétrica
K e K'	Pontos de Dirac
k_F	Número de onda de Fermi
K_n	Número de onda transversal
k_n	Número de onda longitudinal
l	caminho livre médio
L_ϕ	Comprimento de Coerência de Fase
l_e	Caminho livre médio elástico
l_{in}	Caminho livre médio inelástico
m	Massa
N_T	Número total de canais no terminal
$P(G)$	Distribuição da condutância
v_F	Velocidade do elétron no nível de Fermi
$var(G)$	Variância da condutância
W	Largura da constrição
$2DEG$	Gás de elétrons bidimensional
EHQ	Efeito Hall quântico
IT	Isolantes topológicos

Introdução

O prefixo “nano” - deriva da palavra grega “nanos” que significa anão - é expresso em notação científica moderna como sendo um bilionésimo (10^{-9}) de uma certa escala. Assim, um nanosegundo (ns), por exemplo, equivale a um bilionésimo de segundo, uma escala de tempo bastante empregada na área de telecomunicações e em algumas áreas da eletrônica. Lembramos também da molécula de DNA e de alguns vírus, que possuem respectivamente diâmetro e comprimento na ordem de nanômetros (nm), uma escala de comprimento onde os processos da miniaturização da eletrônica se enquadra, conceituando o que conhecemos como nanociência e nanotecnologia, ciência e tecnologia que objetiva a construção e controle dos objetos e dos dispositivos à escala atômico-molecular. Obviamente, todo este “nano mundo”, se assim podemos chamar, só pôde ser explorado graças ao desenvolvimento da mecânica quântica, a partir do século XX. Hoje podemos dizer, que a física da matéria condensada se encarrega de estudar a nanociência, que por sua vez, encara o transporte quântico como parte essencial e intelectualmente desafiadora [1], fazendo com que pesquisas e tecnologias, voltadas para o controle da matéria e fabricação de dispositivos em pequenas escalas, sejam cada dia mais desenvolvidas.

Nesta dissertação, estamos interessados no ramo da nanociência chamado física do transporte eletrônico quântico. Essa área da ciência tem como objetivo o estudo teórico e experimental das propriedades de diferentes regimes do transporte eletrônico em dispositivos nanoestruturados.

Para compreender melhor os fenômenos de transporte eletrônico quântico em nanoestruturas, devemos analisar sistemas onde os efeitos ondulatórios dos elétrons são absolutamente relevantes, de modo que possam afetar os observáveis físicos do transporte eletrônico. Podemos então dizer, que tais sistemas possuem propriedades que não dependem, necessariamente, do seu material, estrutura ou da sua composição atômica [1]. Além disso, não podem ser explicados pela física clássica. Essas propriedades são chamadas de *propriedades universais* do transporte quântico.

Efeitos ondulatórios tem atraído o interesse de muitos físicos ao longo dos anos, seja em um sistema de um único corpo com elétrons não interagentes se movendo em um meio desordenado com distribuição aleatória ou em um núcleo de muitos corpos, inicialmente pouco explorados por sua complexidade e às vezes de pouco interesse físico. Estudos de tais sistemas tiveram algumas de suas características primeiramente observadas na década de 30, na física nuclear, onde a dimensão linear típica é da ordem de alguns fermis ($1\text{fm} = 10^{-15}\text{ m}$) [2].

Sistemas dinâmicos de uma partícula com características semelhantes ao problema dos núcleos de muitos corpos tem sido estudados pela comunidade de caos quântico, com

a finalidade de entender como a natureza da dinâmica clássica influencia as propriedades quânticas [2]. É nesse tipo de contexto que encontramos a palavra *Mesoscópica*, introduzida por *Van Kampen* em 1981 [3], devido ao grande interesse em sistemas com dimensão intermediária, “Meso”, entre o microscópico e o macroscópico. A ideia era criar uma meso escala, um reino diferente que só poderia ser explicado pela síntese da teoria quântica, governante do mundo micro, e a teoria clássica, governante do mundo macro [1]. No entanto, atividades experimentais a partir do final da década de 80, não revelaram qualquer fronteira nítida entre a meso e a micro escala. Desta forma, o termo mesoscópico passou a se referir ao *crossover* entre os regimes de transporte quântico e clássico. Por outro lado, o termo transporte quântico tornou-se mais abrangente referindo-se às propriedades de transporte eletrônico em estruturas de escalas diminutas [1].

A partir de então, introduziremos a física mesoscópica, alguns dos fenômenos presentes no transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos e o formalismo teórico construído para seu estudo. A ideia inicial é apresentar conceitos fundamentais muito bem estabelecidos na literatura, antes de abordamos o objeto de estudo desta dissertação, o bilhar de Dirac caótico aberto. A nossa abordagem para o transporte eletrônico quântico nesse objeto possibilitou a publicação do artigo [4], no *Physical Review B*.

1.1 Física Mesoscópica

Inicialmente a física mesoscópica concentrou-se no estudo de assinaturas quânticas no transporte semiclássico em nanoestruturas [3, 5]. Esses pequenos condutores, chamados de mesoscópicos, são muito maiores do que objetos microscópicos, como átomos, mas não grande o suficiente para serem ôhmicos, comportamento obtido caso suas dimensões sejam muito maiores que o comprimento de onda de *de Broglie*, o caminho livre médio e o comprimento de relaxação de fase [6] (também chamado de comprimento de coerência de fase), três escalas de comprimento características dos sistemas eletrônicos, às quais abordaremos posteriormente.

O transporte de elétrons nos denominados dispositivos mesoscópicos, foram primeiramente realizados em condutores metálicos. Posteriormente, a maior parte do trabalho foi realizada em heteroestruturas semicondutoras de *GaAs/AlGaAs* [7] - arseneto de gálio e arseneto de gálio dopado com alumínio - de modo que, experimentos feitos a baixas temperaturas garantiam o comportamento não ôhmico nessas estruturas, ou seja, a fase da onda do elétron permanece coerente ao longo do sistema de interesse, conduzindo a uma variedade de novos fenômenos [8]. Mais recentemente, novos materiais foram sendo descobertos, como grafeno e os isolantes topológicos, ampliando a gama de possibilidades experimentais e teóricas [9, 10]. Então, podemos considerar o dispositivo mesoscópico como um sistema de transporte de fase coerente [2]. Levando em conta esse fato, é bastante instrutivo observar os diversos regimes de transporte mesoscópico analisando as escalas de tempo e de comprimento característicos. Faremos isso logo em seguida.

1.1.1 Regimes de Transporte

Podemos introduzir as várias escalas de tempo e de comprimento, que definem e caracterizam os diferentes regimes mesoscópicos, a partir de uma amostra de um metal desordenado de tamanho linear L , mantido a uma temperatura suficientemente baixa [2]. Nessas condições, participam do transporte somente elétrons com energias próximas à energia de Fermi, $\epsilon_F = (\hbar k_F)^2/2m$, onde k_F é o número de onda de Fermi. O transporte eletrônico em metais a baixas temperaturas, apresenta várias características devido aos efeitos de interferência entre as funções de onda. Esses efeitos dependem das escalas fundamentais que são:

- **Comprimento de Onda de Fermi, λ_F .** Está relacionado ao nível de Fermi e é definido pela relação $\lambda_F = 2\pi/k_F$. Esta é a menor escala de comprimento, variando de alguns angstroms em metais a centenas de angstroms em heteroestruturas semicondutoras.
- **Caminho Livre Médio Elástico, l_e .** Distância média percorrida pelo elétron antes de ter seu momento inicial destruído por colisões elásticas. Essa importante e elementar escala de comprimento, varia de alguns angstroms em ligas amorfas a uma dezena de microns em heteroestruturas semicondutoras e é definida como $l_e = v_F\tau$. Onde v_F é a velocidade do elétron no nível de Fermi, e τ é o tempo de relaxação do momento.
- **Caminho Livre Médio Inelástico, l_{in} .** Similar ao l_e , mas com colisões inelásticas, $l_{in} = v_F\tau_\phi$, devido ao espalhamento por elétrons, por fônons e com impurezas da amostra. Nesse limite determinamos τ_ϕ , que é o tempo de defasagem (descoerência), ou de quebra de fase.
- **Comprimento de Localização, ξ .** Relacionado à extensão espacial das funções de onda eletrônicas. Para condutores metálicos, essas funções se estendem por toda a amostra. No entanto, em isolantes, as funções são localizadas e decaem exponencialmente a partir do centro de localização.
- **Comprimento de Coerência de Fase, L_ϕ .** É a distância média que os elétrons viajam antes de perderem a coerência de fase de sua função de onda. A partir desse comprimento, podemos caracterizar os processos de transporte em condutores mesoscópicos. Efeitos de transporte que dependem da interferência de funções de onda eletrônicas podem ser utilizados para determinar o tempo de descoerência. Portanto, podemos definir L_ϕ em duas condições: $L_\phi = v_F\tau_\phi$, para sistemas com alta mobilidade, ou seja, ($\tau_\phi \sim \tau$), e $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$, para sistema com baixa mobilidade ($\tau_\phi \gg \tau$) onde $D = v_F^2\tau/d$ é a constante de difusão, d é a dimensão do gás de elétrons e o movimento dos elétrons, neste último caso, é considerado não balístico, definição que veremos logo em seguida.

Para um condutor mesoscópico típico a baixa temperatura temos $l_e < L_\phi < l_{in}$. Portanto, pode-se definir três regimes, experimentalmente distintos, para o transporte coerente de condutores mesoscópicos em termos das escalas de comprimento, como:

1. **Regime Balístico ou Guia de Onda** - ($\lambda_F < L \ll l_e$). Os elétrons movem-se sem sofrer espalhamento elástico. Como exemplo, temos as cavidades caóticas de micro-ondas e pontos quânticos, que explicaremos na próxima seção.
2. **Regime Difusivo** - ($\lambda_F \ll l_e \ll L < L_\phi$). A onda atravessa a amostra sem perder a coerência, pois, sofre diversas colisões elásticas e não inelásticas. É característico de fios quânticos desordenados.
3. **Regime Localizado** - O comprimento da amostra encontra-se entre o comprimento de localização e o comprimento de coerência de fase ($\xi < L < L_\phi$). Esse regime é assim chamado, porque as funções de onda eletrônicas ficam localizadas, de modo que a amostra se comporta como um isolante.
4. **Amostra macroscópica** - ($\lambda_F \ll l_e \ll L_\phi \ll L$), a amostra se divide em sub-amostras mesoscópicas de tamanho L_ϕ do tipo difusivo. Assim, a onda se propaga de forma coerente dentro de cada sub-amostra, mas não existe coerência de fase de sub-amostra para sub-amostra.

As escalas características de comprimento e de tempo, aqui resumidas, assim como os regimes de transporte, podem ser revistas com mais detalhes nas referências [2, 6, 7].

Além das condições e possíveis regimes de transporte em sistemas mesoscópicos que acabamos de ver, devemos conhecer a importância das heteroestruturas semicondutoras de *GaAs/AlGaAs* no que diz respeito a fabricação de dispositivos mesoscópicos e aos principais trabalhos desenvolvidos nesta área de transporte quântico.

1.2 Bilhar Quântico

Antes de explicarmos o nosso objeto de estudo, o bilhar de Dirac, e as nossas reais pretensões nesta dissertação, falaremos sobre o bilhar quântico, ou “bilhar de Schrödinger”, que modela uma estrutura chamada de ponto quântico e é construído a partir do gás de elétrons bidimensional (*2DEG*). Posteriormente, abordaremos os fenômenos mesoscópicos, bastante compreendidos na literatura.

1.2.1 Gás de Elétrons Bidimensional

Um dos desenvolvimentos mais importantes em semicondutores, tanto do ponto de vista da física quanto da indústria de dispositivos, tem sido a realização de estruturas nas quais o comportamento da eletrônica é essencialmente bidimensional (2D). Isso significa que pelo menos para algumas fases de funcionamento do dispositivo os portadores de carga estão confinados num potencial, de tal modo, que o seu movimento numa direção é limitado e, conseqüentemente, quantizado. Isso é exatamente o que ocorre na fina camada de condução formada na interface dos heterocompostos semicondutores, que citamos anteriormente. Os elétrons são confinados na interface entre o GaAs e AlGaAs, onde se movem sem perder a coerência de fase. Essa estrutura é conhecida como gás de

elétrons bidimensional (*2DEG*) [6]. Como se trata de uma estrutura semicondutora com impurezas, é necessário conhecer os processos de dopagem, além de lembrar das condições referentes às bandas de energia. Portanto, para uma revisão rápida, recomendamos a referência [1].

A figura 1.1 mostra uma representação do *2DEG*. A banda proibida (*band gap*) em AlGaAs é maior do que em GaAs. Em ambos os materiais o nível de Fermi localiza-se dentro do *gap* de energia, (figura 1.1 (a)). Por variação da dopagem é possível deslocar o nível de Fermi dentro da banda proibida. Quando os materiais são aproximados, os elétrons saltam para o GaAs, deixando o AlGaAs carregado positivamente. Devido ao espaço deixado pelas cargas, um nível unificado de potencial eletroquímico é estabelecido e uma camada de inversão (curvamento das bandas de energia) é formada na interface, como podemos ver na figura 1.1 (b). No equilíbrio, a energia de Fermi é constante em toda parte, e na interface da heteroestrutura, aparece um poço de potencial que deixa os elétrons confinados, formando o *2DEG* [6].

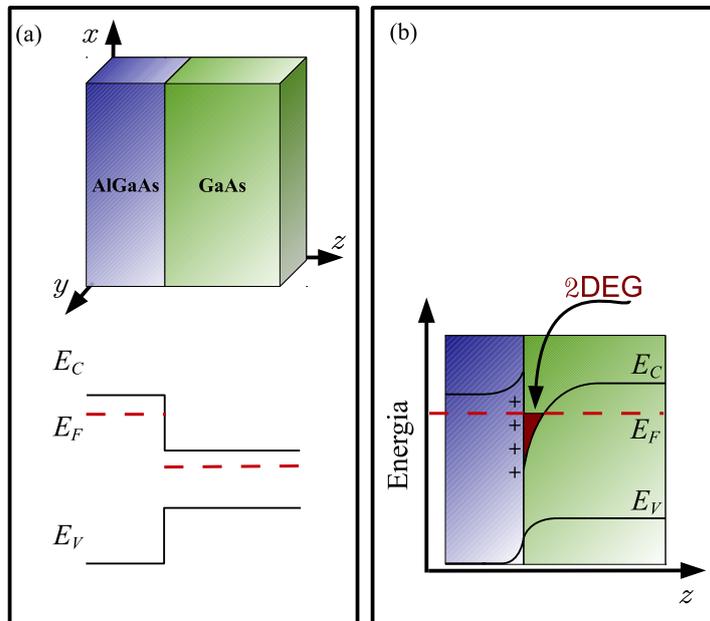


Figura 1.1 Na junção entre o AlGaAs e o GaAs, podemos ver o perfil das bandas de condução (linha superior), e valência (linha inferior) e suas respectivas energias, E_C e E_V além da energia de Fermi, E_F , (a) antes e (b) depois da transferência de carga, onde observamos a formação do gás de elétrons bidimensional *2DEG*.

1.2.2 Pontos Quânticos

Com o advento dos heterocompostos semicondutores e total controle do *2DEG*, ficou cada vez mais possível observar e compreender o transporte eletrônico em microestruturas mesoscópicas de alta mobilidade, suficientemente pequenas e livres de impurezas, para assegurar que o $l_e \gg L$, ou seja, os dispositivos balísticos, ao invés de apenas sistemas

desordenados, nos quais os elétrons se movimentam difusivamente. Além disso, o potencial confinante pode ser extremamente bem controlado, e é possível fabricar dispositivos de formas muito diferentes, entre eles, os chamados pontos quânticos balísticos.

O ponto quântico nada mais é do que uma cavidade quântica de dimensões sub micrométricas [8], pequenos dispositivos que contêm uma pequena quantidade de elétrons livres, normalmente construído pela formação do *2DEG* na região de interface de uma heteroestrutura semicondutora [11], figura 1.2. A coerência de fase da mecânica quântica

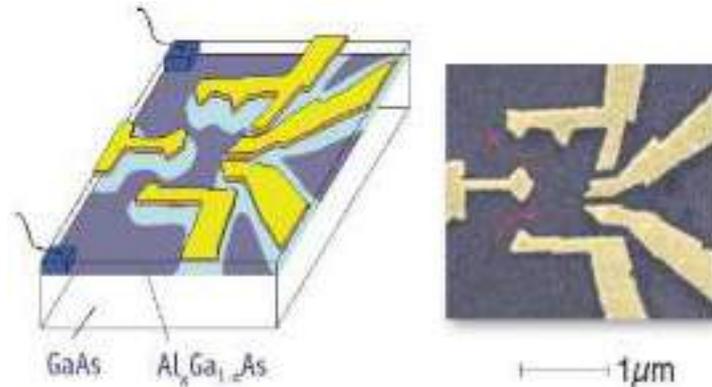


Figura 1.2 Podemos ver respectivamente da esquerda para a direita um desenho esquemático e a imagem de um ponto quântico lateral feito no aprisionamento de elétrons na junção entre o AlGaAs e o GaAs. As estruturas mais claras são os eletrodos que controlam o acoplamento entre o ponto e os reservatórios e recebem uma voltagem em suas extremidades causando o movimento dos elétrons nas regiões mais escuras. Figura retirada de [12]

afeta fortemente as propriedades eletrônicas do ponto quântico, por isso, o termo “quântico”. Além disso, o movimento clássico dentro da cavidade pode ser considerado como caótico¹ em longas escalas de tempo comparadas ao tempo ergódico², τ_{erg} , uma escala de tempo relevante a pontos balísticos [11]. O tamanho e a forma dessas estruturas, além do número de elétrons que elas contêm, podem ser controlados com precisão. A física de pontos quânticos mostra muitos paralelos com o comportamento de ocorrência natural de sistemas quânticos em física atômica e nuclear. Como em um átomo, os níveis de energia em um ponto quântico se tornam quantizados devido ao confinamento dos elétrons [13]. Ao contrário de átomos, no entanto, os pontos quânticos podem ser facilmente conectados a eletrodos (partes mais claras na figura 1.2) que além de confinar os elétrons dentro da cavidade também definem os pontos de contato que acoplam o ponto quântico aos reservatórios de elétrons, este conceito explicaremos com detalhes posteriormente.

As propriedades de transporte de um ponto quântico podem ser medidas pelo acoplamento de guias de onda conectados a dois reservatórios de elétrons, “fonte” e “dreno” de elétrons, fazendo com que uma corrente passe através do ponto aberto. Podemos portanto, modelar o ponto quântico por um bilhar quântico, também chamado de “bilhar de

¹O caos é originalmente um fenômeno clássico devido a grande sensibilidade das trajetórias do sistema a pequenas variações nas condições iniciais.

²Tempo acima do qual a dinâmica é ergódica

Schrödinger”, eles são o paradigma para sistemas hamiltonianos simples que caracterizam dinâmicas complexas [14]. O sistema aberto pode ser considerado caótico, se o acoplamento é suficiente fraco para que o tempo médio de permanência dos elétrons dentro da cavidade, τ_{dwell} , exceda o τ_{erg} e assim, a dinâmica do sistema continua sendo universal [8].

1.2.3 Bilhar e Caos

Os bilhares são modelos matemáticos para muitas situações físicas onde uma ou mais partículas se movem livremente, sofrendo colisões, em uma região delimitada. Eles são sistemas dinâmicos muito utilizados para o estudo do caos clássico, e também do caos quântico [15–17]. Portanto são empregados como sistemas modelos para o estudo da dinâmica clássica e quântica.

Fundamentalmente o caos é uma propriedade da mecânica clássica, pois, a maioria dos movimentos são altamente sensíveis a pequenas variações no estado inicial do sistema [18] tornando-o imprevisível. A sensibilidade em questão, resulta da não linearidade dos sistemas dinâmicos clássicos. Porém, a equação de Schrödinger linear descreve a dinâmica na mecânica quântica, e a não linearidade que o caos necessita não existe.

Entretanto, o princípio da correspondência da mecânica quântica assegura que um sistema quântico vai para um sistema clássico no limite em que a constante de Planck vai a zero. Então, uma forma de entender um sistema quântico caótico é vê-lo como um sistema cuja dinâmica clássica correspondente é caótica. Nesse caso a dinâmica quântica é denominada caos quântico [19].

Nesta dissertação investigamos as propriedades de transporte do bilhar de Dirac caótico aberto, bilhar mesoscópico com um tipo de simetria específica chamada de simetria quiral ou de sub-rede. Tudo isso explicaremos em seus detalhes nos próximos capítulos.

1.3 Bilhar de Dirac

O Bilhar de Dirac tem recebido uma crescente atenção da comunidade científica, pois complementa o bilhar clássico e quântico (bilhar de Schrödinger), que tomaram palco central em estudos elucidando o crossover quântico-a-clássico em dispositivos regulares e caóticos [14]. Bilhares de Dirac são diferentes dos sistemas de onda caóticos que imitam a mecânica quântica, além disso, também são descritos pela relação de dispersão linear (óptica, micro-ondas e cavidades acústicas) [20]. Além dessas considerações, o bilhar de Dirac caótico descreve novos dispositivos, cujas funções de onda dos elétrons incidentes são descritas pela equação de Dirac sem massa [21] da correspondente mecânica quântica relativística, em vez da equação de Schrödinger [14, 20]. Esses novos materiais, materiais de Dirac, possuem bandas de condução e de valência que se tocam em um conjunto isolados de pontos, chamados de pontos de Dirac (ou vales), de maneira que o espectro de energia próximo a esses pontos é linear, e a baixas energias as propriedades desses materiais são bem descritas por um conjunto $2D$ de férmions de Dirac sem massa [22] (partículas de spin $1/2$).

Os novos materiais em questão, assim como o bilhar de Dirac, possuem uma simetria específica chamada de simetria de sub-rede (SSR). Ela, pode ser quebrada, especialmente, caso o termo de massa não seja nulo [23, 24].

1.3.1 Simetria de sub-rede

No estudo das propriedades do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos desordenados, sobrevivem apenas a simetria de reversão temporal (SRT), simetria partícula buraco (SPB) e a simetria quiral, também conhecida como simetria de sub-rede (SSR) [25, 26]. Elas dão origem a dez classes de simetria, que são divididas entre três classes de matrizes aleatórias, Wigner-Dyson [27], Quiral [28, 29] e BdG (Bogoliubov-de Gennes) [30]. Nos próximos capítulos, abordaremos matrizes aleatórias e as classes de simetria Wigner-Dyson e quiral.

Na SSR, um conjunto de átomos pode se dividir em dois grupos, um grupo chamado de sub-rede A e outro de sub-rede B . As sub-redes são idênticas e interconectadas de tal maneira que os sítios de uma estão ligados apenas aos sítios da outra, ou seja, a estrutura é bipartida, resultando num espectro de energia simétrico em torno da energia de Fermi [31]. Dessa forma, o hamiltoniano contém apenas elementos de matrizes entre os dois grupos, mas não pertencentes ao mesmo grupo [32].

Podemos observar, na figura 1.3, dois exemplos de uma rede bipartida e um exemplo

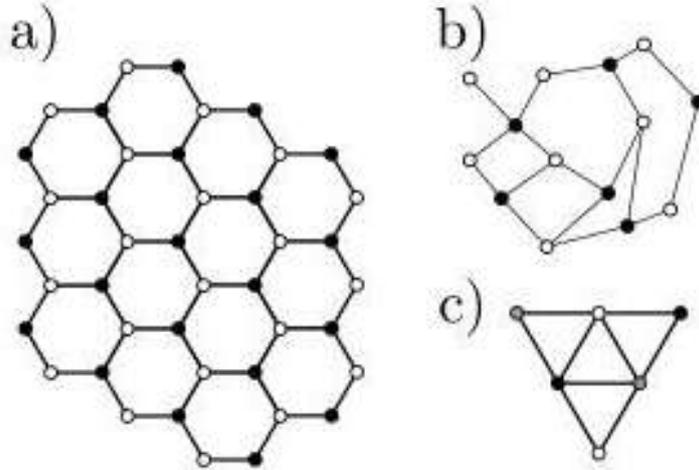


Figura 1.3 Em (a), a rede bipartida é hexagonal, em forma de um favo de mel. Em (b) a rede é irregular e em (c) não há bipartição. Sítios da sub-rede A são representados por bolas pretas, enquanto, sítios da sub-rede B são representados por bolas brancas. As bolas cinzas representam os sítios que não pertencem a nenhuma sub-rede. Figura retirada de [32].

de uma rede sem bipartição. Em (a), a rede bipartida é hexagonal, em forma de um favo de mel, típico de uma rede de grafeno, um material intrinsecamente $2D$ [33] que explicaremos posteriormente. Em (b), a rede é irregular e em (c) não há bipartição. Sítios da sub-rede A são representados por bolas pretas e os da sub-rede B por bolas brancas. As bolas cinzas representam os sítios que não pertencem a nenhuma sub-rede.

A seguir, apresentaremos os principais exemplos desses sistemas, que são: algumas categorias de isolantes topológicos e estruturas de grafeno. Estudos de sistemas de elétrons $2D$ baseados em grafeno e de isolantes topológicos $2D$ e $3D$ estão entre os temas atuais mais interessantes e ativos na física de materiais [34].

1.3.2 Grafeno

Grafeno é o nome dado a uma mono-camada plana de átomos de carbono dispostos em uma rede de “favo de mel” (estrutura hexagonal) bidimensional ($2D$). Além disso, é a base para materiais de grafite de todas as outras dimensões, como os fulerenos quase- $0D$ e os nanotubos de carbono quase- $1D$, como podemos ver na figura 1.4. De modo geral,

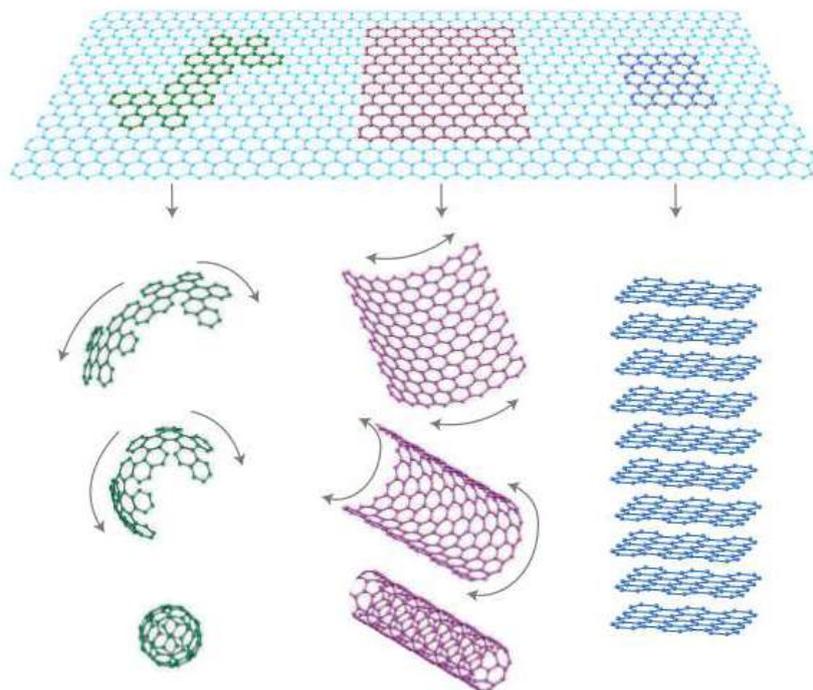


Figura 1.4 No topo da figura, vemos a representação de uma mono-camada de grafeno (átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal $2D$) dando origem a fulerenos quase- $0D$, nanotubos de carbono quase- $1D$ e grafite $3D$, respectivamente da esquerda para à direita. Figura retirada de [35].

podemos dizer que o grafeno é amplamente utilizado para descrever as propriedades de vários materiais à base de carbono [35].

No grafeno, os portadores de carga possuem uma característica singular, eles imitam partículas relativísticas, embora o hamiltoniano microscópico do átomo de carbono não seja relativístico [36]. Portanto, as propriedades eletrônicas do grafeno são descritas pela equação de Dirac da mecânica quântica relativística (hamiltoniano de Dirac sem massa) ao invés da equação de Schrödinger que governa o mundo da matéria condensada [35].

A estrutura eletrônica do grafeno (estrutura de banda $E(k_x, k_y)$), é tal como a de um semiconductor sem *gap*, com bandas de valência ($E < 0$) e de condução ($E > 0$) que se tocam em dois pontos não equivalentes K e K' comumente chamados de vales [37] ou pontos de Dirac, que pertencem à duas sub-redes de carbono equivalentes A e B [38], do espaço recíproco [14], como exemplificado na figura 1.5. A energia de portadores de carga

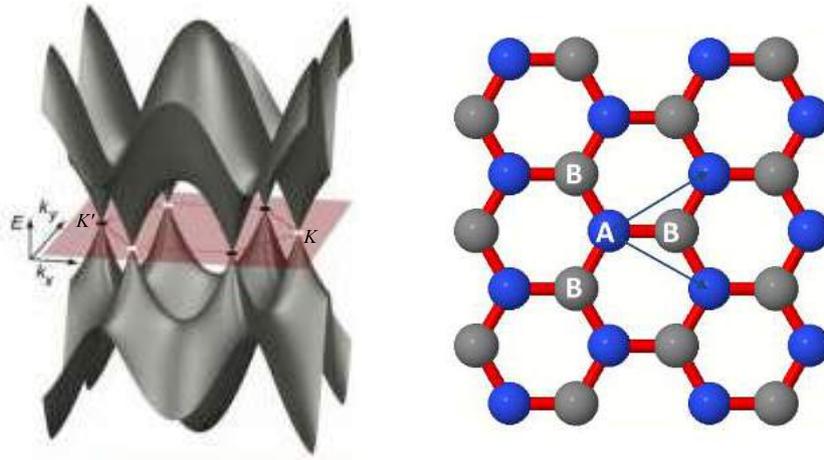


Figura 1.5 (Esquerda) estrutura de banda da mono-camada de carbono. As bandas de valência ($E < 0$) e de condução ($E > 0$) formam os cones. Os cones marcados por pontos brancos (pretos) são conectados por vetores da rede recíproca, então eles são equivalentes. Figura adaptada de [36]. (Direita) sub-rede triangular do grafeno. Cada átomo na sub rede (A) tem 3 vizinhos próximos na sub-rede B e vice-versa. Figura retirada de [39].

desaparece nesses pontos e dispersa-se linearmente com o momento na sua vizinhança, formando o chamado cone de Dirac [37]. Podemos observar a formação desses cones na figura 1.5 da esquerda.

Assim como nas heteroestruturas de AlGaAs, também é possível construir cavidades (nanoestruturas) de grafeno [40]. Também neste caso, vários estudos já podem ser encontrados na literatura, por exemplo os efeitos dos diferentes tipos de borda sobre a densidade eletrônica de estados espectrais, que foram investigados na referência [41] e os efeitos dos diferentes tipos de borda sobre as propriedades estatísticas (no limite semi-clássico) tanto da energia espectral do bilhar de grafeno fechado quanto da condutância da cavidade de grafeno, ambos abordados na referência [24]. Os resultados obtidos, motivaram por exemplo, os experimentos para as propriedades das funções de onda do bilhar de micro-ondas análogo ao bilhar de Dirac [42].

Portanto, podemos concluir que as excepcionais propriedades eletrônicas do grafeno possibilitam vários estudos e aplicações. Além dos que já citamos, indicamos outros exemplos, como os vários estudos do bilhar de Dirac caótico em pontos quânticos de grafeno [14, 20], e o transistor, também baseado em ponto quântico de grafeno [43], que podemos observar na figura 1.6.

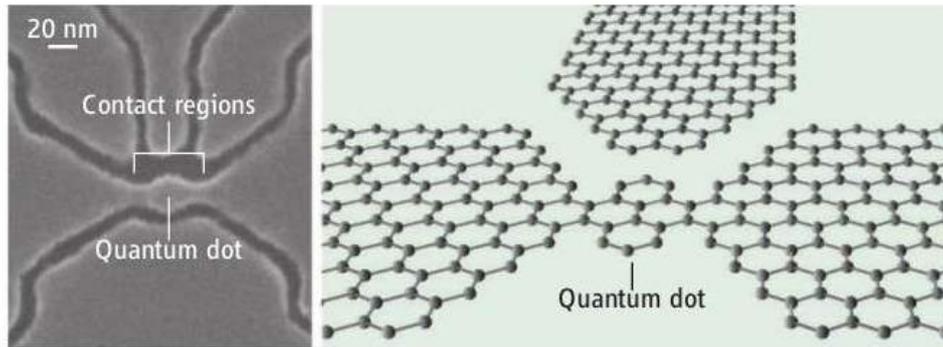


Figura 1.6 (Esquerda) micrografia eletrônica de um transistor de grafeno. O pequeno ponto quântico (*Quantum dot*) no centro é conectado a regiões de contato através de estritas constricções. (Direita) esquema mostrando um hipotético transistor baseado em um ponto quântico de grafeno. Figura retirada de [43]

1.3.3 Isolantes Topológicos

No início dos anos 80, a descoberta do efeito Hall quântico (EHQ) caracterizou um novo estado da matéria, diferente dos que já eram conhecidos pela física da matéria condensada e que eram descritos pela abordagem de Landau [10, 44, 45]. Essa descoberta, revelou um estado, dito ser, topologicamente distinto dos outros. Posteriormente, considerações similares as do EHQ deram origem aos isolantes topológicos (IT), materiais eletrônicos com forte interação spin-órbita, que possuem um *gap* no interior (*bulk*), ou seja, possuem um interior que é como um isolante, mas possuem estados de condução protegidos por simetria de reversão temporal em sua borda ou superfície [10, 46]. Nesse sentido, os estados da borda, que conduzem corrente, persistem mesmo na presença de impurezas [45], diferente do que ocorre nos estados ordinários da matéria. Esses estados, em todas as superfícies, são chamados de estados de superfície de Dirac [47].

Assim como o grafeno, os IT 2D (rede quadrada) e 3D são fontes de estudo de pesquisadores teóricos e experimentais, e têm sido aplicados em uma enormidade de sistemas [46], assim como na concepção de dispositivos mesoscópicos. Por exemplo, os pontos quânticos e pontos de contato, que são promissores tanto em pesquisas fundamentais sobre modos topológicos confinados quanto para spintrônica e aplicações em informação quântica devido à nova estrutura eletrônica dos estados de superfície [47], cuja dinâmica é governada pelo mesmo hamiltoniano de Dirac sem massa. A principal diferença entre o grafeno e a superfície de um isolante topológico 3D é a falta de spin e degenerescência do vale no último caso [48].

No que diz respeito aos sistemas mesoscópicos, foram observados na última década, uma riqueza de fenômenos interessantes, particularmente, detectados experimentalmente, em estruturas de bilhar quântico e bilhar de Dirac. Na próxima seção, conheceremos alguns desses principais fenômenos.

1.4 Fenômenos em Sistemas Mesoscópicos

Como vimos anteriormente, a física mesoscópica está relacionada a um regime de transporte onde a coerência de fase eletrônica durante o processo de transmissão de carga é um ingrediente fundamental. Essa propriedade de transporte revela surpresas, como: a quantização da condutância, observada experimentalmente quando a resistência de um condutor balístico revelou-se ser diferente de zero e quantizada como função de sua largura [49, 50]; a localização fraca [51, 52]; a flutuação universal da condutância [53]; entre outros fenômenos importantes.

Landauer [54], introduziu o conceito do problema de transporte eletrônico numa rede unidimensional. No tratamento de Landauer, uma corrente constante é injetada na amostra mesoscópica, que é vista como um centro espalhador, implicando que a condutância pode ser interpretada como uma medida do coeficiente de transmissão. Para garantir um fluxo constante através da amostra, Landauer introduziu o conceito de reservatórios ideais, figura 1.7, que são conectados à região de espalhamento caótico (amostra) por guias de condução perfeitos, caracterizados por um número N de modos transversais (canais) de propagação, e tem a função de gerar uma força termodinâmica através de um gradiente de potencial eletroquímico, μ , levando a um regime de transporte. Os reservatórios são

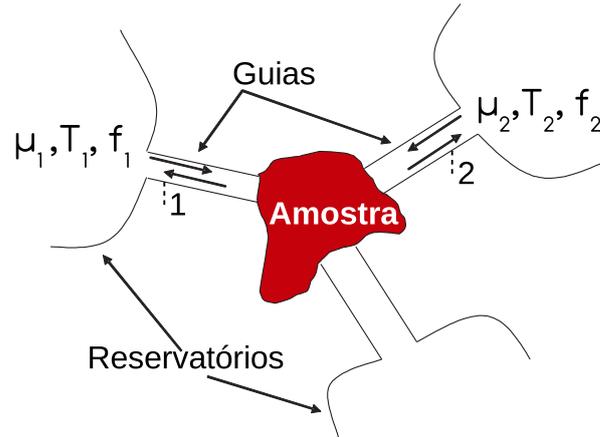


Figura 1.7 Representação do modelo de reservatórios do formalismo de Landauer. A amostra bidimensional se comporta como uma região espalhadora e é conectada a guias ideais semi-infinitos contendo canais de propagação abertos acoplados a reservatórios de elétrons. Esses, são mantidos em equilíbrio termodinâmico e descritos por funções distribuição $f_i(T, \mu_i)$. Um fluxo de corrente atravessa a amostra quando uma diferença de potencial eletroquímico, $\Delta\mu$, é estabelecida entre os reservatórios. Figura adaptada de [55].

formalmente descritos por suas funções de distribuição de equilíbrio

$$f_i(T, \mu_i) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu_i)/k_B T} + 1} \quad (1.1)$$

onde $i = 1, 2, \dots, n$ é número de reservatórios, μ_i são os potenciais eletroquímicos e T é a temperatura, que assumiremos ser a mesma em todos os reservatórios. Além disso, eles são

um ingrediente indispensável na formulação de Landauer, pois, introduz características, como irreversibilidade e dissipação, que estão sempre presentes nos experimentos [56].

Nesta dissertação, utilizaremos o tratamento de Landauer, para o bilhar de Dirac acoplado a reservatórios de elétrons por dois e três guias de onda. Descreveremos o comportamento da média, variância e distribuição da condutância, além das correções de localização e anti-localização fraca (que explicaremos posteriormente). Portanto, abordaremos em maiores detalhes alguns dos fenômenos mesoscópicos associados a nossa pesquisa.

1.4.1 Quantização da Condutância

Considerando a temperatura igual a zero, Landauer [54] introduziu a condutância (G), devido ao espalhamento elástico de um obstáculo caracterizado pelos coeficientes de transmissão (T) e reflexão (R) para o caso de quatro terminais e um único canal aberto em cada um deles. Posteriormente a medição de G em dois terminais foi estendida para o caso de N canais abertos [57, 58]

$$G = (e^2/\pi\hbar)Tr(tt^\dagger) = (2e^2/h)Tr(tt^\dagger), \quad (1.2)$$

onde t é a matriz de transmissão e a fórmula em si é conhecida como fórmula de Landauer-Büttiker que explicaremos melhor nas próximas seções.

Com o resultado da alta mobilidade atingível no gás de elétrons bidimensional ($2DEG$) em heteroestruturas de GaAs/AlGaAs, como a da figura 1.1, tornou-se possível estudar transporte balístico em pequenos dispositivos. O fenômeno conhecido como quantização da condutância constatou a validade da fórmula de Landauer-Büttiker. Observado primeiramente em 1988 [49, 59], quando se introduziu “*Gates*” (eletrodos carregados negativamente) no $2DEG$, como na figura 1.8(a). Esses eletrodos formam uma constrição

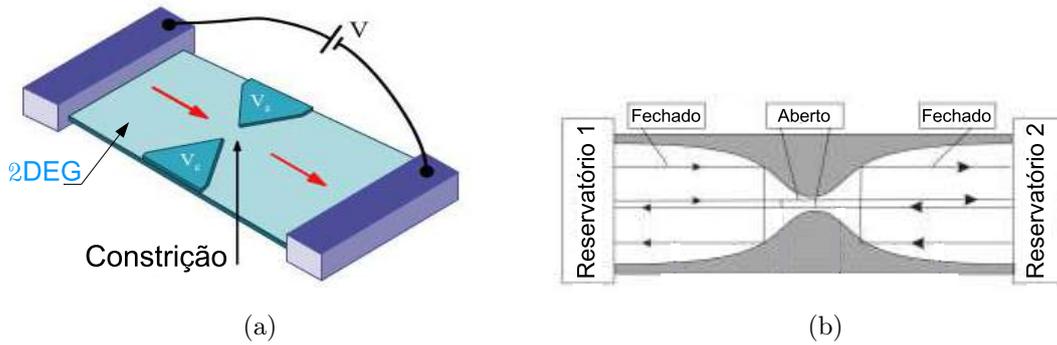


Figura 1.8 (a) Ilustração do ponto de contato quântico construído sobre $2DEG$, os triângulos formam a constrição. Figura adaptada de [60]. (b) A quantização da condutância pode ser obtida considerando a constrição como um guia de onda, no qual um pequeno número de modos transversais de propagação (canais) podem atravessar a constrição. Figura adaptada de [1].

de largura ajustável W e comprimento L , com abertura muito menor do que o livre caminho médio, além disso, eles separam o $2DEG$ em duas partes, formando o ponto de

contato quântico. A variação na largura da constricção é controlada através da voltagem de porta aplicada ao ponto de contato e provoca uma barreira de potencial efetiva dependente do canal de propagação. Em uma dada energia, somente alguns canais podem ultrapassar a barreira, os quais são abertos, nesse caso os elétrons conseguem ultrapassar a constricção, caso contrário eles são refletidos como na figura 1.8(b) [1]. Uma diferença de potencial V entre os reservatórios, por exemplo, faz surgir uma corrente elétrica I através da constricção.

Foi observado na referência [49] que à medida que W diminui a condutância G decresce em forma de degraus de altura $2e^2/h$ (o fator 2 é devido a degenerescência de spin), conforme podemos observar na figura 1.9.

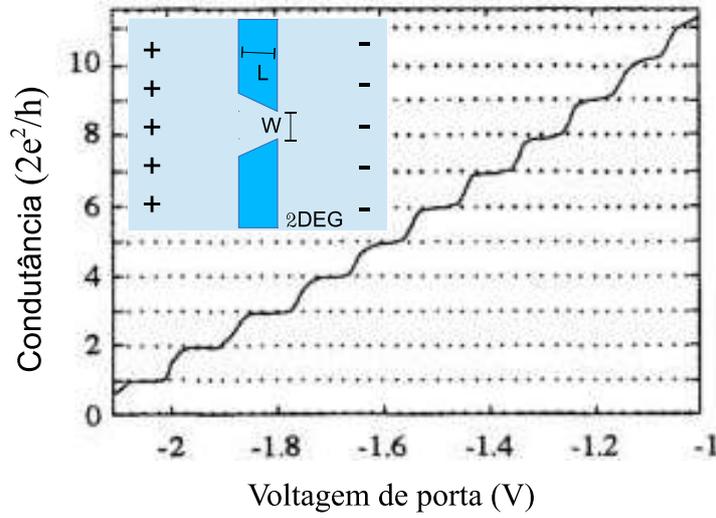


Figura 1.9 Condutância do ponto de contato quântico como função da voltagem de porta aplicada na constricção. Observamos o comportamento tipo escada da condutância, revelando a quantização da condutância em semicondutores onde $\lambda_F \approx 30nm$. Figura adaptada de [6, 49].

Desta maneira, foi possível obter

$$G = \left(\frac{2e^2}{h} \right) k_F W / \pi, \quad (1.3)$$

onde, $2e^2/h$ ficou conhecido como quantum de condutância G_0 e k_F é o módulo do vetor de onda de Fermi. Essa expressão é válida se $l_e \gg W$. Desta forma, podemos concluir, que o número de canais de propagação abertos N está relacionado com a largura da constricção por

$$N = \text{int} \left(\frac{k_F W}{\pi} \right) = \text{int} \left(\frac{2W}{\lambda_F} \right). \quad (1.4)$$

Para metais, por exemplo, $\lambda_F \ll W$, logo $N \gg 1$ e a resistência de contato é pequena. Já em semicondutores, $\lambda_F \approx 30nm$, o que permite a observação dos degraus. Portanto

podemos resumir a condutância da seguinte forma

$$G = \frac{I}{V} = N \frac{2e^2}{h} = NG_0. \quad (1.5)$$

Ou seja, a condutância varia com um número inteiro do quantum de condutância.

Veremos em seguida, que a condutância em estruturas de Dirac apresenta um comportamento similar ao que acabamos de descrever.

- Quantização da condutância em estruturas de Dirac

Assim como para o gás de elétrons bidimensional (*2DEG*), obtido em heteroestruturas, diversos experimentos foram realizados em estruturas de Dirac. Se tratando especialmente do grafeno “ideal” (uma única camada de átomos de carbono), muitas propriedades anômalas foram encontradas, quando comparado com o (*2DEG*). Em especial, experimentais descobriram dois fenômenos interessantes [61, 62]

1. Valor mínimo para a condutividade. Esse limite é devido à propriedade intrínseca dos férmions de Dirac *2D* sem massa, na ordem de $4e^2/h$. O fator 4 é devido à degenerescência do spin e do vale. Esse fenômeno é encontrado mesmo quando a concentração de portadores de carga tende a zero (ponto de Dirac).
2. Efeito Hall quântico semi-inteiro. A condutividade Hall (σ_{xy}) ocorre em uma sequência de múltiplos semi-inteiros da condutância mínima, $\sigma_{xy} = (4e^2/h)(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Esse Fenômeno é ocasionado, devido à existência de estados com energia nula nos níveis de Landau para férmions com massa nula.

Esse último resultado é similar ao encontrado no experimento de uma única camada de grafeno entre dois eletrodos supercondutores, como podemos ver na figura 1.10.

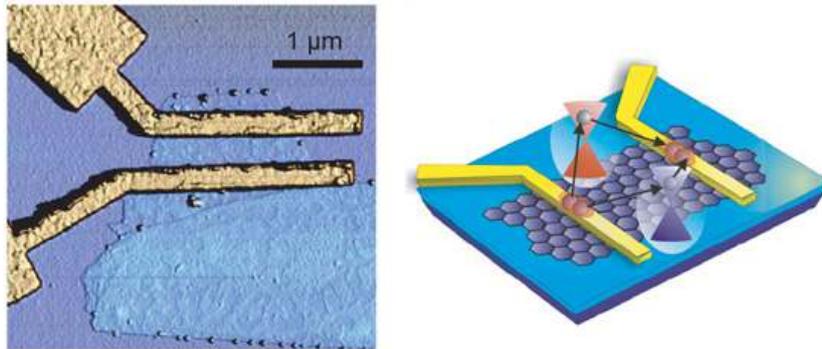


Figura 1.10 À esquerda temos a imagem da microscopia de força atômica de um dispositivo de uma camada de grafeno entre dois eletrodos supercondutores. À direita, vemos a representação esquemática desse experimento. Figura retirada de [63].

A medição de G como função da voltagem de porta, V_G , quando o campo magnético e temperatura são respectivamente $B = 10 T$ e $T = 100 mK$, mostra saltos (ver figura 1.11) idênticos ao encontrados no EHQ, como descreve a referência [63]. De acordo com o referido artigo, isso demonstra que mesmo em amostras mesoscópicas o EHQ pode ser usado para identificar os dispositivos de camada simples.

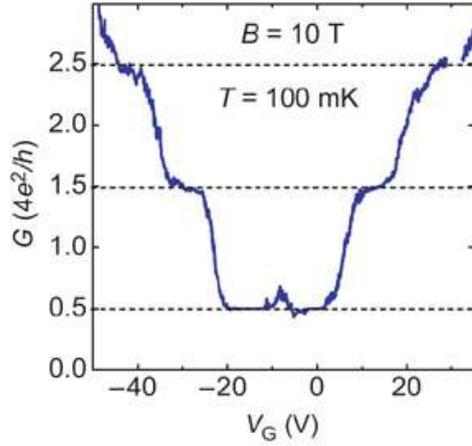


Figura 1.11 Condutância, G , em relação ao voltagem de porta, V_G , em alto campo magnético, $B = 10 T$ e temperatura $T = 100 mK$ mostrando as séries de degraus em valores semi-inteiros de $4e^2/h$, característica da anomalia do EHQ em uma camada de grafeno. Figura retirada de [63].

1.4.2 Localização Fraca

Considerando a figura 1.7 como uma cavidade mesoscópica caótica, a baixíssimas temperaturas, temos que o comprimento de coerência de fase (L_ϕ) dos elétrons supera o tamanho da amostra (L). Dessa forma, a dinâmica clássica não se aplica [64], e quanticamente um elétron ejetado em um dos guias possui probabilidade de reflexão (voltar pelo mesmo guia) diferente da probabilidade de transmissão (sair por outro guia). Em uma abordagem semiclassica, essa “anomalia” na propriedade de transporte dos elétrons é essencialmente causada por interferência quântica entre pares de trajetórias invertidas temporalmente [8], fazendo com que a condutância flutue. Para partículas sem spin, essa interferência é construtiva. A fase quântica do elétron na trajetória de retorno à origem é a mesma fase da trajetória revertida no tempo. Desse modo, a probabilidade de reflexão é maior que a de transmissão, ou seja, a condutância é menor que a condutância no limite semiclassico, dada pela lei de Ohm (G_{CL}). Esse fenômeno ficou conhecido como Localização Fraca (LF), originalmente observado em condutores desordenados com dinâmica difusiva. Para partículas com spin, o acoplamento spin-órbita gira o spin dos elétrons e produz uma interferência destrutiva, diminuindo a probabilidade de retorno e causando um aumento na condutância. Esse outro fenômeno ficou conhecido como anti-localização fraca [51, 65].

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

$$\delta G = \langle G \rangle - G_{CL}, \quad (1.6)$$

onde $\langle G \rangle$ é a média da condutância na presença da simetria de reversão temporal e G_{CL} é o resultado da média da condutância quando a simetria de reversal temporal é quebrada [6]. De acordo com a figura 1.12, temos que $\delta G < 0$ com magnitude $\delta G \sim -e^2/h$.

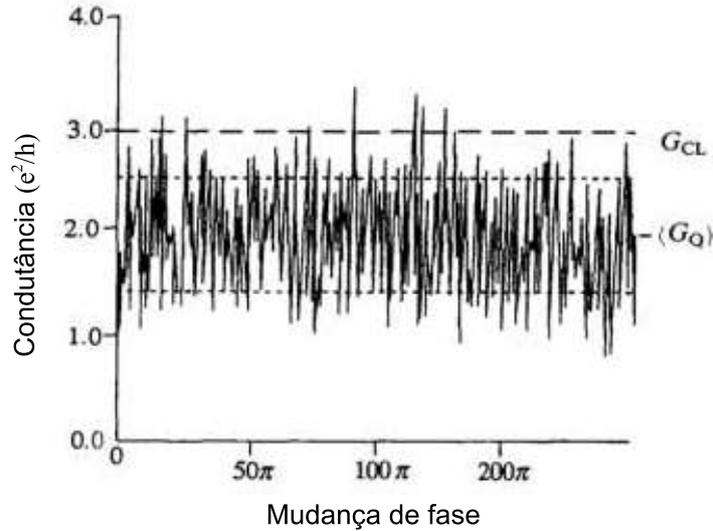


Figura 1.12 Resultado numérico da flutuação da condutância normalizada em e^2/h como função da mudança de fase no modelo teórico de distribuição de impurezas. Percebemos que a média da condutância $\langle G \rangle$ é menor que a condutância clássica G_{CL} , mostrada na figura para comparação. Figura adaptada de [6, 66].

Ambos os fenômenos, localização e anti-localização fraca, são universais. Eles dependem apenas da simetria de reversão temporal, de modo que, um campo magnético externo é suficiente para quebrar a simetria de reversão temporal e, portanto, destruir a interferência. Outros modelos teóricos como a forma do potencial desordenado e o espaçamento médio entre impurezas [66], confirmam essa universalidade.

Por completeza, mostraremos que é possível encontrar o mesmo fenômeno em outras estruturas, por exemplo, as estruturas de Dirac.

- Localização Fraca em uma Estrutura de Dirac.

Assim como para o bilhar quântico, podemos falar de localização fraca para o bilhar de Dirac. Como já vimos, o grafeno é uma estrutura de Dirac e pode ser utilizado na construção de vários dispositivos, ele possui diferenças notáveis em relação aos sistemas (2D) convencionais, especialmente pela quiralidade dos portadores de carga. Os portadores de cargas são quirais, devido ao número quântico adicional, pseudo-spin [36], decorrente do fato de que suas funções de onda são compostas das contribuições das duas sub-redes [67]. Se o pseudo-spin é conservado, o retroespalhamento de portadores é proibido e ocorre a anti-localização, ao invés da localização fraca [68, 69]. Além disso, a interferência quântica nessas estruturas é sensível tanto ao espalhamento inelástico, quanto aos mecanismos de espalhamento elástico, como defeitos topológicos que afetam a quiralidade [70]. A figura 1.13, mostra o efeito de localização fraca para uma cavidade fabricada no *2DEG* de uma heteroestrutura de *GaAs/AlGaAs*, à esquerda, e vemos a localização fraca para uma mono-camada de grafeno utilizada no experimento citado na figura 1.10, à direita.

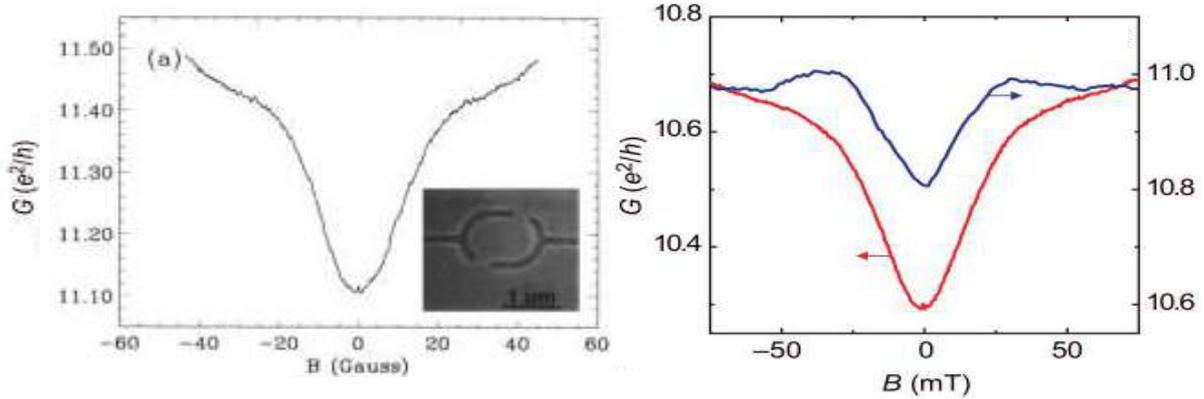


Figura 1.13 (Esquerda) condutância medida em $T = 50 \text{ mK}$ para um ponto quântico em forma de um bilhar tipo *stadium*. (Direita) medição da condutância em $T \approx 1.5 \text{ K}$ para dois diferentes dispositivos de uma única camada de grafeno, a curva inferior corresponde ao experimento descrito na figura 1.10. Figuras adaptadas de [8] e [63], respectivamente.

1.4.3 Flutuação Universal da Condutância

Os cálculos que mostram que as flutuações da condutância, da ordem de e^2/h , são características universais do transporte quântico no limite de baixas temperaturas foram primeiramente observados na referência [71].

Essas flutuações podem ser observadas de uma amostra para outra, mesmo se as amostras pertencerem a estruturas mesoscópicas feitas de um mesmo material, isso ocorre, porque a configuração de impureza é modificada no processo de construção da amostra. Do mesmo modo, também é possível observar flutuações na condutância em uma mesma estrutura mesoscópica como função do campo magnético, ou seja, a aplicação do campo magnético causa os mesmos efeitos nos padrões de interferência causados pela mudança na distribuição de impurezas [8]. Por outro lado, para uma mesma amostra, mantida a uma temperatura fixa, o padrão da flutuação não se altera.

Resultados experimentais que comprovam as flutuações da condutância, para uma amostra específica, em função do campo magnético, podem ser encontrados na referência [72], como podemos ver na figura 1.14. Observamos nesta figura, que a média, variância e a distribuição da condutância são determinadas através da flutuação da condutância. Contudo, é preciso salientar, que em certos limites muitas distribuições de interesse não tem o comportamento gaussiano como o da figura 1.14.

Na referência [8], encontramos que a amplitude das flutuações da condutância, dada pela variância da condutância, é da ordem de

$$\text{var}(G) \equiv \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 \sim \left(\frac{e^2}{h} \right)^2. \quad (1.7)$$

A variância da condutância independe do formato da amostra e da força da desordem [8]. Além disso, encontramos no mesmo artigo, alguns resultados teóricos e observações sobre

a média e variância da condutância, além da correção de localização fraca para um bilhar quântico acoplado a dois e três guias de onda.

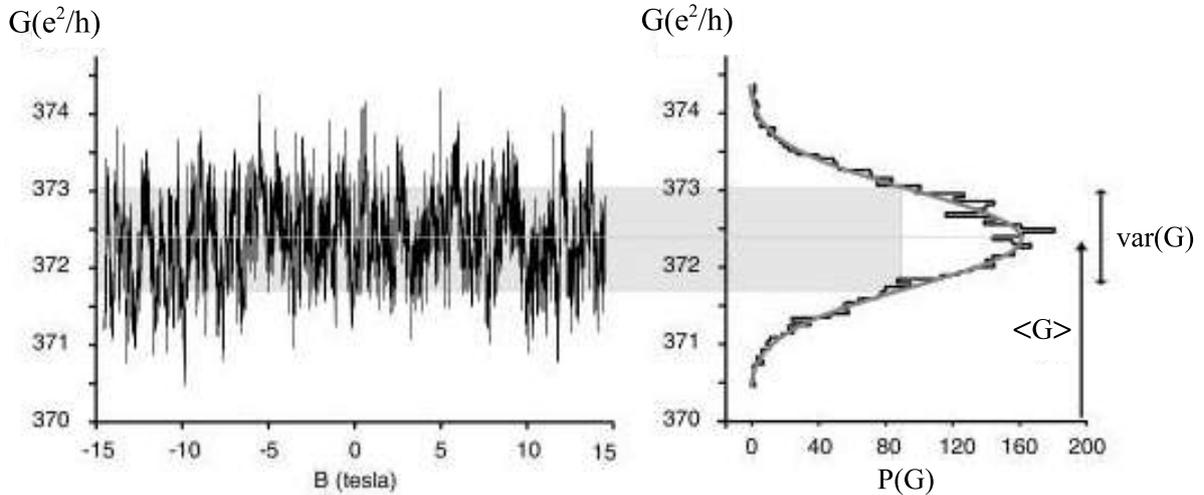


Figura 1.14 À esquerda, temos a condutância em função do campo magnético B para um fio de ouro quase-unidimensional. À direita, vemos a distribuição da condutância $P(G)$ construída a partir da figura anterior. Percebemos que $P(G)$ é gaussiana em torno da média $\langle G \rangle$ e dominada, essencialmente, pela variância $var(G)$. Figura adaptada de [72].

- Flutuação da condutância em estruturas de Dirac

Assim como nos fenômenos anteriores, também foi encontrada a flutuação da condutância em dispositivos que possuem a estrutura de Dirac. Como exemplos de experimentos onde se observou esse fenômeno citamos:

1. Os experimentos de pontos quânticos com barreiras em isolantes topológicos [47], cuja figura da flutuação da condutância em função do voltagem de porta pode ser observada na figura 1.15;
2. O grafeno entre dois contatos supercondutores [63]. Podemos ver na figura 1.16 a condutância como função do campo magnético;
3. E o ponto quântico de grafeno [73]. Na figura 1.17, podemos observar a flutuação da condutância em função da voltagem de porta tanto para o elétron como para o buraco, representando os dois cones de Dirac.

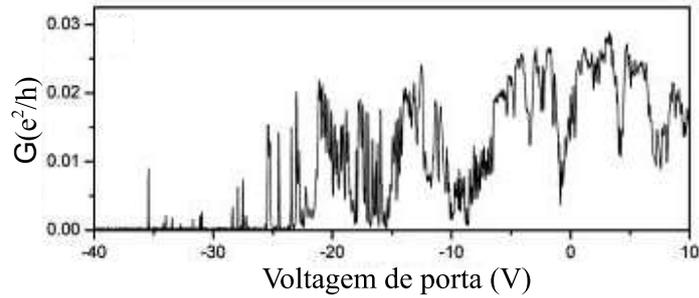


Figura 1.15 Flutuação da condutância em função do voltagem de porta de um ponto quântico de um isolante topológico entre fonte e dreno de portadores de cargas. Figura adaptada de [47].

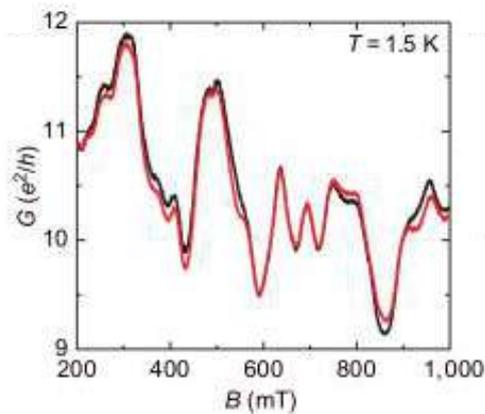


Figura 1.16 Duas medições subsequentes da condutância em função do campo magnético a $T \approx 1,5 K$ para um dispositivo de uma única camada de grafeno. Essa figura foi obtida através do experimento que citamos na figura 1.10. Figura retirada de [63].

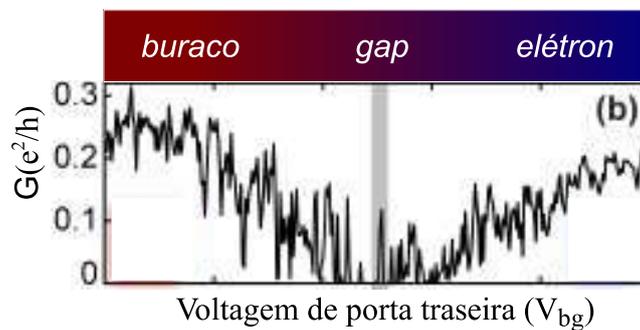


Figura 1.17 Condutância, de um ponto quântico de grafeno acoplado a fonte e dreno de portadores de carga, como função da voltagem de porta traseira (V_{bg}), *back gate voltage*. Figura adaptada de [73].

1.5 Formalismo de Espalhamento

Há muito tempo que o espalhamento de ondas em sistemas complexos vem interessando “grandes mentes” em diversas áreas da física, como a ótica, o eletromagnetismo e

a física nuclear. Essa última por exemplo, oferece vários exemplos da mecânica quântica de espalhamento por sistemas de muitos corpos complexos, como o espalhamento de um núcleon por um núcleo atômico, num modelo chamado de modelo óptico [74]. No entanto, características similares as destes problemas nucleares complexos também foram encontradas em certos sistemas “simples” de um partícula, que em contraste com os sistemas complexos podem conter resultados exatos [75].

O transporte de elétrons em microestruturas é um dos exemplos de sistemas de espalhamento simples bastante estudados ao longo dos anos. Nesse contexto, o transporte é idealizado em guias de onda, que não apenas ilustram os conceitos de transporte quântico, mas também modelam situações experimentais concretas [1]. A equivalência da teoria nuclear com a teoria de guias de onda e cavidades foi observada na referência [76]. No referido artigo, foi observado, que o núcleo causa um movimento altamente complicado na onda incidente. Movimento similar é encontrado, por exemplo, em nanoestruturas caóticas. Uma cavidade mesoscópica pode possuir desordem proveniente de diferentes tipos de defeitos inevitáveis no seu processo de fabricação. Os defeitos presentes em uma região de interação estacionária espalham os elétrons, afetando as propriedades de transporte [1].

Conforme descrito por Landauer nas referências [58, 77], a cavidade espalhadora é conectada a guias de onda acoplados a reservatórios de elétrons, desse modo, ele estabeleceu a conexão entre a probabilidade de transmissão eletrônica através da amostra e o problema de espalhamento. Nessa abordagem, as propriedades de transporte são obtidas mediante a matriz de espalhamento (matriz \mathcal{S}) correspondente [78]. No formalismo de espalhamento, um sistema mesoscópico é descrito por uma matriz \mathcal{S} que relaciona as amplitudes das funções de ondas espalhadas com as incidentes e desempenha um papel fundamental na teoria de transporte de Landauer-Büttiker [54, 79] que discutiremos na próxima seção.

1.5.1 Teoria e Matriz de Espalhamento

Para os conceitos abordados nesta subseção, seguiremos as referências [2, 75]. A teoria de espalhamento leva em consideração o problema proposto por Landauer. Nesse caso, consideramos um sistema de elétrons não interagentes, uma cavidade mesoscópica $2D$ conectada a reservatórios de elétrons, em equilíbrio termodinâmico, por L guias ideais. O l -ésimo guia ($1, \dots, L$) possui largura W_l finita, causando um confinamento transversal que produz quantização em modos propagantes e a presença de canais de propagação. Os elétrons são espalhados na cavidade, considerada estacionária no tempo, com energia de Fermi ($\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$) e satisfazem a equação de Schrödinger, que para campo magnético nulo, $B = 0$, pode ser escrita da seguinte maneira

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\vec{\nabla} \right)^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (1.8)$$

Devemos encontrar as soluções dessa equação em cada guia. Para isso introduziremos um sistema de coordenadas em cada um deles, de modo, que o vetor posição é dado por $\vec{r} = \vec{r}_l = (x_l, y_l)$. Como podemos ver na figura 1.18 a coordenada x_l representa a direção

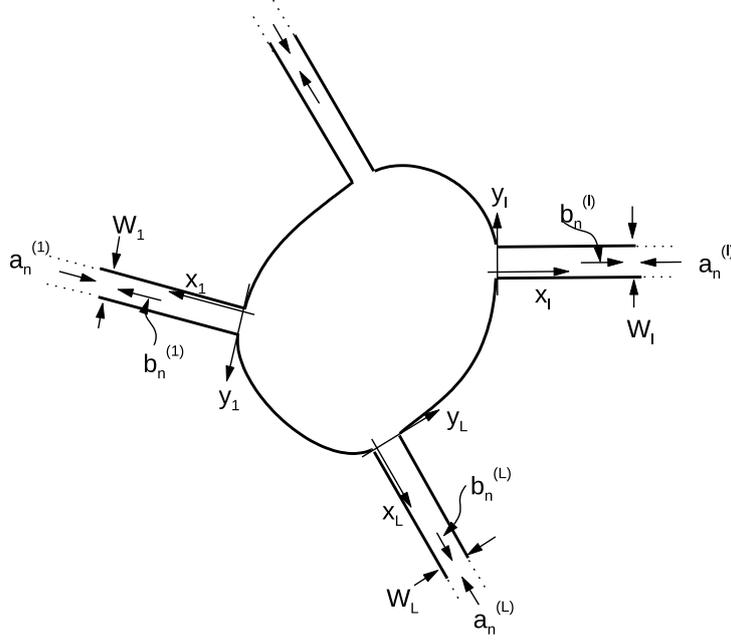


Figura 1.18 Cavidade caótica bidimensional conectada a L guias de onda ideais. As setas dentro dos guias indicam as ondas entrando a_n e saindo b_n da cavidade. Figura retirada de [75].

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

$$\Psi(x_l, 0) = \Psi(x_l, W_l) = 0, \quad (1.9)$$

além disso, como os guias são considerados ideais, o potencial real devido às impurezas, $V(\vec{r})$, é nulo, portanto, a equação de Schrödinger é separável da seguinte forma

$$\Psi_n(x_l, y_l) = \varphi_n(x_l)\chi_n(y_l), \quad (1.10)$$

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

$$\varphi_n(x_l) \propto e^{\pm ik_n^{(l)} x_l}, \quad (1.11)$$

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

$$\chi_n(y_l) = \sqrt{\frac{2}{W_l}} \text{sen}(K_n^{(l)} y_l), \quad (1.12)$$

onde,

$$K_n^{(l)} = \frac{n\pi}{W_l}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.13)$$

é o número de onda transversal. Nessa direção temos a energia

$$E_{y,n}^{(l)} = \frac{\hbar^2}{2m} [K_n(l)]^2, \quad (1.14)$$

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

$$\langle \chi_m | \chi_n \rangle \equiv \int_0^{W_l} \chi_m^*(y_l) \chi_n(y_l) dy_l = \delta_{mn}, \quad (1.15)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \chi_n^*(y) \chi_n(y') = \delta(y - y'). \quad (1.16)$$

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

$$[k_n^{(l)}]^2 + [K_n^{(l)}]^2 = k_F^2, \quad (1.17)$$

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

$$\epsilon_F = E_x^{(l)} + E_{y,n}^{(l)}. \quad (1.18)$$

Levando em consideração a energia de Fermi, apenas n canais são permitidos se $E_{y,n}^{(l)} < \epsilon_F$, ou seja, $E_x > 0$ e $k_n^{(l)}$ é real, desse modo, $e^{\pm i k_n^{(l)} x_l}$ é uma exponencial complexa, e o modo propagante é uma onda plana, chamado de canal aberto. Se

$$N_l < \frac{k_F W}{\pi} < N_l + 1, \quad (1.19)$$

então existem precisamente N_l canais abertos no l -ésimo guia. Por outro lado, se $E_{y,n}^{(l)} > \epsilon_F$, então $E_x < 0$ e $k_n^{(l)}$ é puramente imaginário e $e^{\pm i k_n^{(l)} x_l}$ é uma exponencial real dando origem a ondas de decaimento exponencial ao longo do guia. Esses modos são chamados de modos evanescentes ou canais fechados.

A grandes distâncias ao longo do guia, isto é, $x \rightarrow \infty$, apenas canais abertos contribuem para a função de onda. A forma mais geral das soluções normalizadas da equação de Schrödinger no guia l deve ser escrita como uma combinação linear

$$\Psi(\vec{r}_l) = \sum_{n=1}^{N_l} \left[a_n^{(l)} \frac{e^{-i k_n^{(l)} x_l}}{(\hbar k_n^{(l)} / m)^{1/2}} + b_n^{(l)} \frac{e^{i k_n^{(l)} x_l}}{(\hbar k_n^{(l)} / m)^{1/2}} \right] \sqrt{\frac{2}{W_l}} \text{sen}(K_n^{(l)} y_l), \quad (1.20)$$

onde m é a massa efetiva do elétron. Essas soluções normalizadas asseguram a condição de fluxo unitário.

Os coeficientes $a_n^{(l)}$ e $b_n^{(l)}$ representam, respectivamente, as amplitudes de ondas entrando e saindo do canal aberto n do guia l . Então podemos definir o vetor N_l —

dimensional que contém as N_l amplitudes das ondas incidentes na cavidade através do guia l da seguinte forma

$$\mathbf{a}^{(l)} = \begin{bmatrix} a_1^{(l)} \\ \vdots \\ a_{N_l}^{(l)} \end{bmatrix}, \quad (1.21)$$

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

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a^{(1)} \\ \vdots \\ a^{(L)} \end{bmatrix}. \quad (1.22)$$

Definições similares podem ser feitas para as ondas de saída

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b^{(1)} \\ \vdots \\ b^{(L)} \end{bmatrix}. \quad (1.23)$$

Essas amplitudes são linearmente relacionadas com a matriz de espalhamento \mathcal{S} por

$$\mathbf{b} = \mathcal{S}\mathbf{a}. \quad (1.24)$$

A matriz de \mathcal{S} pode ser representada na forma de blocos

$$\mathcal{S} = \begin{bmatrix} r_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1L} \\ t_{21} & r_{22} & \cdots & t_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{L1} & t_{L2} & \cdots & r_{LL} \end{bmatrix}, \quad (1.25)$$

onde os elementos da diagonal principal são blocos r_{ll} , matrizes $N_l \times N_l$ que contém amplitudes de reflexão dos N_l canais do l -ésimo guia nele mesmo, e os outros elementos são blocos t_{lm} , matrizes $N_l \times N_m$ que contém amplitudes de transmissão dos N_m canais do guia m para os N_l canais do guia l . A matriz \mathcal{S} é uma matriz quadrada de dimensão N_T dada por

$$N_T = \sum_{l=1}^L N_l. \quad (1.26)$$

Ela carrega toda a informação do transporte de elétrons no sistema mesoscópico. Além disso, possui vínculos, simetrias que podem ser gerais (presente em todas as matrizes \mathcal{S}) ou não. Vejamos elas.

1.5.2 Simetrias da Matriz \mathcal{S}

A conservação do fluxo de corrente implica na unitariedade da matriz de espalhamento, único vínculo geral imposto a \mathcal{S} . Em outras situações, vínculos são acrescentados a matriz \mathcal{S} . Vejamos então essas simetrias.

1.5.2.1 Unitariedade

De acordo com a referência [80], podemos escrever a densidade de corrente no guia l da seguinte forma

$$j_l \equiv \frac{\hbar}{m} \text{Im} \int_0^{W_l} \left[\Psi_l^\dagger(\vec{r}_l) \frac{\partial}{\partial x_l} \Psi_l(\vec{r}_l) \right]_{x_l=0} dy_l. \quad (1.27)$$

Substituindo na expressão acima a equação 1.20 e 1.16 encontramos

$$j_l = \sum_{n=1}^{N_l} (|b_n^{(l)}|^2 - |a_n^{(l)}|^2). \quad (1.28)$$

Ou seja, as correntes de entrada e saída em um modo particular n são proporcionais ao quadrado das magnitudes dos modos correspondentes as amplitudes $a_n^{(l)}$ e $b_n^{(l)}$ respectivamente, então, a conservação de corrente

$$\sum_{l=1}^L j_l = 0, \quad (1.29)$$

requer que [6]

$$\sum_{l=1}^L \sum_{n=1}^{N_l} |a_n^{(l)}|^2 = \sum_{l=1}^L \sum_{n=1}^{N_l} |b_n^{(l)}|^2, \quad (1.30)$$

podendo ser escrita na forma matricial utilizando as equações 1.22 e 1.23

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}, \quad (1.31)$$

substituindo a equação 1.24 ($\mathbf{b} = \mathcal{S}\mathbf{a}$) em 1.31 teremos

$$(\mathbf{a})^\dagger (\mathbf{a}) = (\mathcal{S}\mathbf{a})^\dagger (\mathcal{S}\mathbf{a}) = (\mathbf{a})^\dagger [\mathcal{S}]^\dagger [\mathcal{S}] (\mathbf{a}), \quad (1.32)$$

então

$$[\mathcal{S}]^\dagger [\mathcal{S}] = \mathbf{1} = [\mathcal{S}] [\mathcal{S}]^\dagger, \quad (1.33)$$

que é a simetria fundamental da matriz \mathcal{S} e único vínculo imposto na ausência de qualquer outra simetria.

1.5.2.2 Reversão temporal

Nos baseamos nas referências [2, 19, 80] para descrever a simetria de reversão temporal. Classicamente, a transformação $t \rightarrow -t$ expressa essa simetria, assim como a inversão do momento $\vec{p}_{t=0} \rightarrow -\vec{p}_{t=0}$, como no exemplo da figura 1.19, no qual o sentido de propagação de uma partícula submetida a um campo de força é invertido. Supondo que existam campos eletromagnéticos no sistema, as equações de Maxwell e a força de

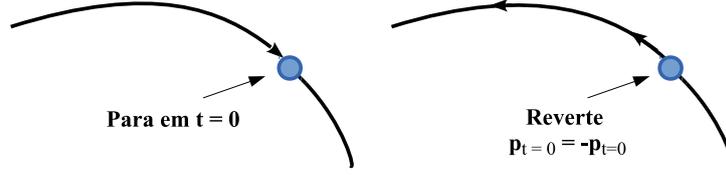


Figura 1.19 À esquerda, temos uma trajetória clássica que para em $t = 0$ e à direita o movimento é revertido $\vec{p}_{t=0} \rightarrow -\vec{p}_{t=0}$.

Lorentz são invariantes para uma trajetória revertida no tempo com as seguintes condições para o campo elétrico, campo magnético, densidade de carga, densidade de corrente e velocidade

$$\vec{E} \rightarrow \vec{E}, \quad \vec{B} \rightarrow -\vec{B}, \quad \rho \rightarrow -\rho, \quad \vec{j} \rightarrow -\vec{j}, \quad \vec{v} \rightarrow -\vec{v}. \quad (1.34)$$

Então, mantendo-se o sentido do campo magnético a simetria de reversão temporal é quebrada.

Na mecânica quântica, considerando a equação de Schrödinger dependente do tempo e $\Psi(x, t)$ como uma possível solução, é possível perceber que $\Psi(x, -t)$ não é uma solução, no entanto, $\Psi^*(x, -t)$ representa uma outra solução, a solução da equação revertida no tempo. Ou seja, a conjugação complexa possui relação com a reversão temporal. Além disso, operações de simetria são representadas por operadores. O operador antiunitário de reversão temporal, Θ , também garante o estado revertido no tempo

$$|\Psi(-t)\rangle = \Theta|\Psi(t)\rangle, \quad (1.35)$$

e satisfaz as seguintes condições para os operadores posição, momento linear e momento angular

$$\Theta\vec{X}\Theta^{-1} = \vec{X}, \quad \Theta\vec{P}\Theta^{-1} = -\vec{P}, \quad \Theta\vec{J}\Theta^{-1} = -\vec{J}.$$

Se o sistema quântico possui invariância sob reversão temporal é possível mostrar que o hamiltoniano comuta com o operador de reversão temporal

$$[\mathcal{H}, \Theta] = 0, \quad (1.36)$$

partículas sem spin e com spin $1/2$ são exemplos desses sistemas e acrescentam vínculos à matriz de espalhamento.

● Partículas sem spin

Para um sistema sem spin, a função de onda para o estado revertido no tempo, digamos em $t = 0$, é obtida por uma conjugação complexa. A forma particular de Θ depende da representação particular usada, o operador de reversão temporal na representação de coordenadas é o próprio operador \mathcal{C} de conjugação complexa

$$\Theta = \mathcal{C}. \quad (1.37)$$

Sendo $\psi(\vec{x}, t)$ solução da equação de Schrödinger, então $\psi^*(\vec{x}, -t)$ é solução da equação revertida no tempo. Levando essa análise à base de espalhamento, temos a inversão das

ondas planas nos guias. Dessa forma, a matriz de espalhamento do problema revertido no tempo é dada por

$$\mathbf{a}^* = \mathcal{S}\mathbf{b}^*, \quad (1.38)$$

a partir da qual nós encontramos

$$\mathbf{b} = (\mathcal{S}^*)^{-1}\mathbf{a}. \quad (1.39)$$

A invariância sob reversão temporal e a equação 1.24, nos leva a seguinte conclusão

$$\mathcal{S} = (\mathcal{S}^*)^{-1}, \quad (1.40)$$

ou

$$\mathcal{S}\mathcal{S}^* = \mathbf{1}. \quad (1.41)$$

Esse vínculo, juntamente com a relação da unitariedade 1.33, resulta na seguinte simetria

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}^T. \quad (1.42)$$

Nesse caso, a simetria de reversão temporal garante que a matriz \mathcal{S} é real e simétrica.

• Partículas de spin 1/2

Para sistemas com spin, devemos levar em consideração a forma geral do operador antiunitário

$$\Theta = UC, \quad (1.43)$$

onde U é o operador unitário. Além disso $\Theta^2 = \pm 1$. Isso implica que a matriz unitária U é simétrica, $\Theta^2 = 1$, para partículas de spin inteiro ou antissimétrica, $\Theta^2 = -1$, para partículas de spin 1/2. A operação de reversão temporal para um sistema de spin 1/2 resulta em

$$\Theta\vec{J}\Theta^{-1} = -\vec{J}, \quad (1.44)$$

que se mantém não apenas para o momento angular orbital, mas também para o spin. Neste caso, o operador de spin pode ter a seguinte forma [19]

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}, \quad (1.45)$$

onde $\vec{\sigma}$ é composto pelas matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.46)$$

É possível então reescrever o operador Θ como

$$\Theta = -i\sigma_y\mathcal{C}, \quad \text{onde} \quad i = \sqrt{-1}. \quad (1.47)$$

Além disso, a função de onda da partícula com spin é representada por um spinor de Pauli

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

onde $|\psi_{\pm}(\vec{r})|^2$ representa a densidade de probabilidade da partícula ser encontrada em \vec{r} com spin para cima (\uparrow) ou para baixo (\downarrow). Portanto, é possível ver como as componentes do spinor se transformam com a ação Θ

$$\Psi_{rev}(\vec{r}) = \Theta\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^*(\vec{r}) \\ \psi_{\downarrow}^*(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\psi_{\downarrow}^*(\vec{r}) \\ \psi_{\uparrow}^*(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.49)$$

Incluindo, portanto, o spin na equação 1.20, a função de onda no l -ésimo guia se apresenta na forma

$$\Psi(\vec{r}_l) = \sum_{n=1}^{N_l} \left[\begin{pmatrix} a_{n,\uparrow}^{(l)} \\ a_{n,\downarrow}^{(l)} \end{pmatrix} \frac{e^{-ik_n^{(l)}x_l}}{(\hbar k_n^{(l)}/m)^{1/2}} + \begin{pmatrix} b_{n,\uparrow}^{(l)} \\ b_{n,\downarrow}^{(l)} \end{pmatrix} \frac{e^{+ik_n^{(l)}x_l}}{(\hbar k_n^{(l)}/m)^{1/2}} \right] \sqrt{\frac{2}{W_l}} \text{sen}(K_n^{(l)}y_l). \quad (1.50)$$

Podemos escrever, também, o vetor com as amplitudes de todas as ondas que entram na cavidade

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_{1,\uparrow}^{(1)} \\ a_{1,\downarrow}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{N_L,\uparrow}^{(L)} \\ a_{N_L,\downarrow}^{(L)} \end{bmatrix}, \quad (1.51)$$

e analogamente, o vetor \mathbf{b} com as amplitudes de todas as ondas que saem da cavidade.

Podemos então, através da equação 1.49, escrever a função de onda revertida no tempo e observar que a matriz de amplitudes do sistema revertido no tempo \mathbf{a}_{rev} e \mathbf{b}_{rev} , se relaciona com \mathbf{a} e \mathbf{b} , respectivamente, pelas seguintes relações

$$\mathbf{a}_{rev} = U\mathbf{a}^*, \quad (1.52)$$

$$\mathbf{b}_{rev} = U\mathbf{b}^*, \quad (1.53)$$

onde U é a matriz antissimétrica

$$U = \mathbf{1}_{N_T} \otimes i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -1 & & \\ 1 & 0 & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & 0 & -1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}_{2N_T \times 2N_T}. \quad (1.54)$$

Dessa maneira, a matriz de espalhamento do estado revertido no tempo é dada por

$$\mathbf{a}_{rev} = \mathcal{S}\mathbf{b}_{rev}. \quad (1.55)$$

Usando as relações 1.52, 1.53 e a definição da matriz \mathcal{S} concluímos que

$$\mathcal{S}U\mathcal{S}^* = U. \quad (1.56)$$

Combinando esta equação com a condição de unitariedade, temos que

$$\mathcal{S} = -U\mathcal{S}^T U, \quad (1.57)$$

ou seja, \mathcal{S} é uma matriz unitária auto-dual³ de dimensão $2N_T$ devido aos graus de liberdade do spin. Dessa forma, pode ser escrita na linguagem dos quatérnions $\mathcal{S} = \mathcal{S}^R$, onde o R indica o dual da matriz de quatérnions.

1.6 Teoria de Landauer-Büttiker

O formalismo de Landauer-Büttiker é uma abordagem utilizada para a compreensão das peculiaridades do transporte mesoscópico. Como dissemos no segundo parágrafo da seção 1.4, Landauer, particularmente introduziu o conceito de reservatórios de elétrons que atuam como fontes e drenos perfeitos de portadores de carga e energia conectados a um dispositivo central por dois terminais contendo um único canal cada um. Esse problema foi generalizado para o caso de muitos canais no artigo [58]. O sistema é considerado em equilíbrio térmico à temperatura T e os estados dos elétrons são preenchidos pelos reservatórios de acordo com a distribuição de Fermi

$$f(E - \mu_i) = \frac{1}{1 + e^{(E - \mu_i)/k_B T}}, \quad (1.58)$$

aqui, μ_i representa os potenciais eletroquímicos de cada reservatório.

Em nossa dissertação, estamos bastante interessados em descrever o que acontece quando acrescentamos um terceiro guia na cavidade, então, vamos nos basear nos artigos do Büttiker [79, 81], que levam em consideração os conceitos de Landauer e sua generalização para o espalhamento envolvendo vários guias. Portanto, podemos encontrar uma expressão geral da corrente e a fórmula de Landauer para dois e três guias.

Considerando um condutor como o da figura 1.18, os guias perfeitos são estritamente canais quânticos unidimensionais, desse modo, existem apenas dois estados, um com velocidade positiva e outro com velocidade negativa, na energia de Fermi. As propriedades de espalhamento na amostra são descritas por probabilidades T_{ij} e R_{ii} para portadores incidentes no guia j transmitidos pelo guia i e portadores independentes no guia i refletidos nele mesmo, respectivamente.

A fórmula de Landauer incorpora dois fatores [1]:

1. Existe uma resistência independente da interface do comprimento L da amostra;
2. A condutância não decresce com a largura W , em vez disso, depende do número de modos transversais no condutor e decresce em passos discretos.

Podemos então relacionar as probabilidades como $T = 1 - R$ e $T = N - R$, para um e vários canais respectivamente. Introduzindo um potencial de referência $\mu_0 \leq \mu_i$, podemos

³O dual, Q^R , de uma matriz Q com elementos quaterniônicos, $Q_{nm} = a_{nm}\mathbf{1} + ib_{nm}\sigma_x + ic_{nm}\sigma_y + id_{nm}\sigma_z$, onde $i = \sqrt{-1}$, tem elementos $Q_{nm}^R = a_{nm}\mathbf{1} - ib_{nm}\sigma_x - ic_{nm}\sigma_y - id_{nm}\sigma_z$.

dizer que abaixo de μ_0 , ambos os estados são preenchidos, então, a corrente líquida que flui em cada guia é zero, e acima de μ_0 , temos o intervalo de energia $\Delta\mu_i = \mu_i - \mu_0$. O reservatório i injeta a seguinte corrente no guia i

$$ev_i(dn_i/dE)\Delta\mu_i. \quad (1.59)$$

Onde, v_i é a velocidade da energia de Fermi no guia i e

$$\frac{dn_i}{dE} = \frac{1}{2\pi\hbar v_i} \quad (1.60)$$

é a densidade de estados para portadores com velocidade negativa ou positiva na energia de Fermi. Portanto, a corrente injetada pelo reservatório i é

$$I_i = \frac{e}{h}\Delta\mu_i. \quad (1.61)$$

Considerando a corrente no guia 1. Uma corrente

$$I_1 = \frac{e}{h}(1 - R_{11})\Delta\mu_1 \quad (1.62)$$

é refletida de volta para o reservatório 1. Assim, toda vez que portadores são injetados pelos outros reservatórios nos respectivos guias a corrente no guia 1 é diminuída da seguinte forma

$$-\frac{e}{h}T_{12}\Delta\mu_2 \quad , \quad (1.63)$$

$$-\frac{e}{h}(T_{12}\Delta\mu_2 + T_{13}\Delta\mu_3) \quad , \quad (1.64)$$

$$-\frac{e}{h}(T_{12}\Delta\mu_2 + \dots + T_{1L}\Delta\mu_L) \quad , \quad (1.65)$$

onde L é o número total de guias. Podemos então determinar a corrente para todos os guias

$$I_i = \frac{e}{h} \left[(1 - R_{ii})\mu_i - \sum_{j \neq i}^L T_{ij}\mu_j \right]. \quad (1.66)$$

Tomando a diferença de voltagem, $V_i = \mu_i/e$, e considerando o caso de muitos canais e o spin, encontramos a expressão desejada

$$I_i = \frac{2e^2}{h} \left[(N_i - R_{ii})V_i - \sum_{j \neq i}^L T_{ij}V_j \right]. \quad (1.67)$$

Podemos simplificar essa última equação fazendo $V_i = V_j$. Portanto, $I_i = 0$, $N_i - R_{ii} = \sum_{j \neq i}^L T_{ij}$, e a corrente no guia i torna-se

$$I_i = \frac{2e^2}{h} \left[\sum_{j \neq i}^L T_{ij}V_i - \sum_{j \neq i}^L T_{ij}V_j \right], \quad (1.68)$$

onde o 2 é devido a degenerescência de spin, N_i é o número de modos no guia i e se faz necessário perceber e introduzir os traços $R_{ii} = Tr(r_{ii}r_{ii}^\dagger)$ e $T_{ij} = Tr(t_{ij}t_{ij}^\dagger)$.

1.6.1 Condutância

Considerando o caso da cavidade acoplada a dois guias temos que $I = I_1 = -I_2$, devido a conservação de corrente, portanto, aplicando a equação 1.68 na expressão da condutância G , obtida através da relação

$$G = \frac{I}{V_1 - V_2}, \quad (1.69)$$

teremos

$$G = \frac{2e^2}{h(V_1 - V_2)} [T_{12}(V_1 - V_2)], \quad (1.70)$$

ou seja,

$$G = \frac{2e^2}{h} T_{12} = \frac{2e^2}{h} Tr [tt^\dagger], \quad (1.71)$$

que é a tão conhecida fórmula de Landauer, onde t é o bloco de transmissão da matriz de espalhamento. A matriz hermitiana tt^\dagger possui autovalores de transmissão compreendidos entre 0 e 1 devido à relação de unitariedade da matriz de espalhamento [1]. Além disso, seguindo o artigo [82], podemos reescrever a equação 1.71 da seguinte maneira

$$G = \frac{2e^2}{h} Tr (C_1 \mathcal{S} C_2 \mathcal{S}^\dagger). \quad (1.72)$$

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

$$C_1 = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{N_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_{N_2} \end{bmatrix}, \quad (1.73)$$

onde $\mathbb{1}_{N_i}$ é uma matriz identidade $N_i \times N_i$ e N_i é o número de canais abertos no i -ésimo terminal. As matrizes de projeção asseguram que $C_1 C_2 = 0$ e $C_1 + C_2 = \mathbb{1}_{N_T}$. Enceramos este capítulo na próxima seção, onde apresentaremos nossos objetivos e os capítulos na ordem em que se sucedem nesta dissertação.

1.7 A Dissertação

A partir deste ponto, podemos revelar nossas reais pretensões nesta dissertação. De modo geral, estamos interessados em estudar o bilhar de Dirac caótico aberto usando dois métodos numéricos para:

1. Mostrar o surgimento da assinatura quântica característica da simetria quiral;
2. Comparar a média, variância e distribuição da condutância do bilhar quântico caótico, muito bem conhecidos na literatura, com os encontrados por nossa análise;
3. Confirmar os resultados analíticos encontrados através do método diagramático;

4. Investigar os efeitos da quebra de coerência de fase (Descoerência) eletrônica com a introdução de um terceiro terminal.

Os objetivos de cada capítulo são descritos abaixo

1.7.1 Capítulo 2

Neste capítulo faremos uma revisão da teoria de matrizes aleatórias, veremos seus principais aspectos aplicados ao estudo das propriedades do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos, como em uma cavidade quântica caótica. Nesse sentido, abordaremos o já conhecido, e bastante estudado, bilhar de “Schrödinger” (quântico) caótico acoplado a dois guias de onda. Para descrever a dinâmica desse sistema, revisaremos os conceitos de ensembles Gaussianos e ensembles circulares. Como veremos, ambos os ensembles nos conduzem, de maneira distinta, a matrizes de espalhamento (\mathcal{S}) aleatórias. Por fim, mostraremos dois métodos de simulação numérica, decomposição QR (Fatoração de Gram-Schmidt) e Modelo Hamiltoniano, que serão aplicados ao problema em questão no intuito de recuperar os resultados conhecidos na literatura, como a média e a variância da condutância, além da distribuição da condutância, a qual faremos uma abordagem apenas numérica.

1.7.2 Capítulo 3

No capítulo 3, aplicaremos as ferramentas que foram apresentadas no capítulo 1 e 2 ao bilhar de Dirac caótico, também acoplado a dois guias de onda. Entenderemos melhor as implicações que a simetria de sub-rede (SSR) ou quiral causa ao sistema, como a estrutura de blocos não diagonal a qual o hamiltoniano é sujeito, e o ponto de Dirac, associado a interligação de duas sub-redes independentes. A partir de então, mostraremos como os dois métodos de simulação numérica se estende ao bilhar de Dirac e as classes de simetria quiral. Apontaremos quais considerações foram feitas para a construção dos nossos algoritmos numéricos. Finalmente, apresentaremos os resultados numéricos encontrados conjuntamente com resultados analíticos que foram recentemente encontrados pelo nosso grupo de pesquisa através do método de integração diagramática sobre o grupo ortogonal, e que deram total suporte a este trabalho. Mostraremos a equivalência dos resultados da média e variância da condutância usando os resultados numéricos e exatos, também mostraremos uma relação bastante peculiar, que encontramos, entre a variância da condutância do bilhar de Dirac caótico para os ensembles quirais e o “bilhar de Schrödinger” caótico para os ensembles de Wigner-Dyson no regime quântico extremo. No mesmo regime, também comparamos as distribuições da condutância dos dois sistemas numa abordagem puramente numérica, por motivos que ficarão bastante claros posteriormente.

1.7.3 Capítulo 4

O capítulo 4 é todo dedicado ao fenômeno de descoerência, quebra de coerência de fase eletrônica. Diferentemente dos capítulos 2 e 3, um terceiro guia é acrescentado ao bilhar

de Dirac caótico. Exploramos então, a magnitude dos efeitos do transporte eletrônico quântico como função do número de canais de quebra de fase. A partir dessa abordagem, aplicamos nossas simulações numéricas e encontramos novos números universais, especialmente para a relação entre as variâncias da condutância. Nossos resultados numéricos, como variância, localização e anti-localização fraca da condutância, confirmam mais uma vez os resultados analíticos da média e variância da condutância desenvolvidos pelo nosso grupo [4]. Também abordamos com os nossos métodos numéricos a condutância como função da quebra de coerência. Mostramos os efeitos completamente esperados quando o fenômeno de coerência é interrompido. Os resultados obtidos neste capítulo, juntamente com os resultados obtidos no capítulo 3, foram publicados no Physical Review B [4].

1.7.4 Capítulo 5

Para finalizar, concluímos nossa dissertação no capítulo 5, enfatizando os principais resultados abordados. Apresentaremos as perspectivas de utilização dos nossos modelos numéricos para a descrição de outros fenômenos inerentes à física mesoscópica.

Teoria de Matrizes Aleatórias, Ensemble de Wigner-Dyson e o Bilhar Quântico

Neste capítulo, faremos uma revisão da dinâmica de transporte quando o movimento dos elétrons em um sistema mesoscópico pode manter a coerência de fase. Essa coerência é de extrema importância para gerar os efeitos de interferência. Nesse sentido, a amostra mesoscópica é uma cavidade quântica caótica, um ponto quântico balístico, modelado por um bilhar quântico (Schrödinger). Por isso, podemos utilizar a formulação de Schrödinger da mecânica quântica para descrever o movimento caótico dos elétrons.

Por conta da complexidade dos sistemas caóticos, tornou-se necessário o tratamento estatístico. Verificou-se que certos comportamentos macroscópicos podem ser melhor expressos através de uma lei estatística para flutuações como pertencentes a uma certa classe de universalidade, que reflete as simetrias do sistema em questão e depende de um número bastante limitado de parâmetros relevantes, geralmente da natureza macroscópica e com um claro significado físico [2].

2.1 Teoria de Matrizes Aleatórias

A teoria de matrizes aleatórias (TMA) [27] lida com propriedades estatísticas de grandes matrizes com elementos distribuídos aleatoriamente [8]. Introduzida em 1928 na matemática estatística por Wishart, ganhou destaque em 1950 dentro do contexto da física nuclear com Wigner [83], que introduziu o conceito de distribuição estatística de níveis de energia de núcleos de átomos pesados e os ensembles de matrizes aleatórias em 1955. Segundo Dyson, que estabeleceu os fundamentos matemáticos da TMA [84], ela, é um novo tipo de mecânica estatística, onde, a realização do sistema não é relevante [85]. Ele introduziu a classificação dos ensembles de matrizes aleatórias de acordo com suas propriedades de invariância sob inversão de tempo e rotação de spin. Wigner propôs modelar o hamiltoniano do núcleo como uma matriz aleatória, assim, ao invés de um ensemble de estados temos um ensemble de hamiltonianos. A TMA, então, fornece propriedades universais do sistema, que depende da validade de uma hipótese ergódica, de acordo com a qual, médias sobre certos intervalos contendo um número estatisticamente significativo de níveis é equivalente a uma média sobre ensembles [2].

Com o passar dos anos, a TMA passou a ser aplicada em diversas áreas da física e da matemática. Além da sua motivação inicial em problemas de espalhamento de neutrons por núcleos pesados, podemos citar também as nanoestruturas, sistemas da

matéria condensada, cromodinâmica quântica, teoria de cordas, análise harmônica em espaços simétricos clássicos, teoria de campo supersimétrica e polinômios de Jack, além de transmissão de ondas eletromagnéticas em meios desordenados [86] e transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos como pontos e fios quânticos [8]. Em última análise, podemos dizer que a TMA tornou-se uma poderosa ferramenta para estudar caos quântico e propriedades de transporte, como flutuações universais da condutância em sistemas mesoscópicos, que é um dos fenômenos de nosso interesse nesta dissertação.

Nas próximas seções, discutiremos os principais aspectos da TMA aplicados ao estudo de sistemas mesoscópicos e as propriedades de transporte no regime balístico, através de um bilhar quântico conectado a reservatórios de elétrons por dois guias de onda ideais.

Podemos fazer uso da TMA para obter grande parte da informação de um sistema quântico aberto conectado a guias de onda através de experimentos de espalhamento. Construímos a matriz de espalhamento, \mathcal{S} , de um bilhar quântico, utilizando dois algoritmos numéricos. O primeiro usa a fórmula de Mahaux-Weidenmüller [87], a qual expressa a matriz \mathcal{S} em termos do hamiltoniano do sistema fechado. O segundo método consiste em construir a TMA diretamente para a matriz \mathcal{S} sem nenhuma referência ao hamiltoniano.

Na próxima seção, apresentaremos os ensembles gaussianos da TMA, que são utilizados para modelar o hamiltoniano de sistemas fechados. Explicaremos como podemos montar o algoritmo numérico baseado nesse ensemble. Posteriormente, apresentaremos, também, as matrizes de espalhamento aleatórias pertencentes a outro ensemble da TMA, e mais uma vez, explicaremos como construir um outro algoritmo que leva em consideração essas matrizes e não o hamiltoniano do sistema. Finalizamos este capítulo apresentando os resultados recuperados pela aplicação desses dois métodos numéricos.

2.2 Ensembles Gaussianos

Podemos descrever a dinâmica universal no interior de uma cavidade quântica caótica através de um ensemble de matrizes aleatórias hermitianas. Nesse sentido, estamos interessados nos autovalores reais da matriz hamiltoniana aleatória, \mathcal{H} , pertencente ao Ensemble Gaussiano.

O Ensemble Gaussiano de matrizes aleatórias foi descrito por Wigner e Dyson, quando se preocuparam em estudar matrizes \mathcal{H} [84], quadradas com dimensão M , cujos elementos são números aleatórios independentes distribuídos gaussianamente, de modo que a densidade de probabilidade pode ser escrita da seguinte forma:

$$P(\mathcal{H}) \propto \exp\left(-\frac{\beta M}{4\lambda^2} \text{Tr}\mathcal{H}^2\right), \quad (2.1)$$

na qual $\lambda = M\Delta/\pi$ é um parâmetro numérico que está relacionado com o espaçamento médio, Δ , entre os níveis de energia (autovalores de \mathcal{H}) e β é o índice de Dyson, um

parâmetro de simetria relacionado ao número de graus de liberdade dos elementos da matriz hamiltoniana, $\mathcal{H}_{\mu\nu}$, que podem ser reais, complexos ou quatérnions reais¹, vínculos matemáticos ligados às simetrias básicas que o sistema apresenta. Em resumo:

- Apenas um grau de liberdade ($\beta = 1$). A matriz \mathcal{H} têm elementos reais e descrevem dois tipos de sistemas físicos que possuem simetria de reversão temporal: os de spin inteiro ou spin semi-inteiro com invariância de rotação;
- Dois graus de liberdade ($\beta = 2$). Os elementos da matriz são complexos e descrevem sistemas que possuem simetria de rotação de spin irrelevante e simetria de reversão temporal quebrada pela aplicação de um campo magnético;
- Quatro graus de liberdade ($\beta = 4$). A matriz é formada por elementos quaterniônicos reais e descrevem sistemas físicos com simetria de reversão temporal, mas com simetria de rotação de spin quebrada devido a interação spin-órbita.

Como pudemos perceber, alguns vínculos são impostos a matriz \mathcal{H} devido as simetrias, mudando sua forma de uma classe para outra. Para $\beta = 1$ temos que $\mathcal{H} = \mathcal{H}^T$ e $\mathcal{H}^T = \mathcal{H}^\dagger$ devido a hermiticidade, portanto, o hamiltoniano deve ser uma matriz real e simétrica, isto é, $\mathcal{H} = \mathcal{H}^*$. Para $\beta = 2$ o hamiltoniano não precisa ser nem real nem autodual, portanto, $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$. Finalmente, para $\beta = 4$, temos que, $\mathcal{H}^R = \mathcal{H}$ devido a reversibilidade temporal e $\mathcal{H}^R = \mathcal{H}^\dagger$ devido a hermiticidade, neste caso, os elementos de \mathcal{H} podem ser escrito em termos de uma representação quaterniônica na base de Pauli como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 \otimes \mathbb{1} + i \sum_{k=1}^3 \mathcal{H}^k \otimes \sigma_k, \quad (2.2)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, \mathcal{H}^k com $k = 0, 1, 2$ ou 3 é uma matriz aleatória real, $\mathbb{1}$ e σ_k são respectivamente a matriz unitária e as matrizes de Pauli dadas por

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Os ensembles gaussianos com distribuição $P(\mathcal{H})$ dada pela equação 2.1 foram estudados por Wigner, especialmente pelo fato de que

$$Tr\mathcal{H}^2 = Tr\mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger = \sum_{\mu\nu} |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2, \quad (2.4)$$

ou seja, suas entradas são estatisticamente independentes, assim, a distribuição $P(\mathcal{H})$ só depende dos autovalores de \mathcal{H} , e portanto é invariante no grupo de transformações associadas à matriz \mathcal{U}

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{U}\mathcal{H}\mathcal{U}^{-1}, \quad (2.5)$$

onde \mathcal{U} é a matriz que diagonaliza \mathcal{H} , de modo que o grupo da matriz \mathcal{U} pode ser:

¹Um quaternion real é expresso em termos das matrizes de Pauli $q = a_0 + i \sum_{k=1}^3 a_k \sigma_k$, com coeficientes a_0, a_1, a_2 e a_3 reais.

- **Ortogonal** ($\beta = 1$) - Correspondendo ao ensemble gaussiano ortogonal (**EGO**), as matrizes aleatórias possuem entradas reais (\mathbb{R});
- **Unitário** ($\beta = 2$) - Correspondendo ao ensemble gaussiano unitário (**EGU**), as matrizes aleatórias possuem entradas complexas (\mathbb{C});
- **Simplético** $\beta = 4$ - Correspondendo ao ensemble gaussiano simplético (**EGS**), as matrizes aleatórias possuem entradas quaterniônicas reais (\mathbb{H}).

Podemos resumir a classificação dos ensembles de acordo com a tabela 2.1.

Tabela 2.1 Classes de universalidade da teoria da matriz aleatória

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

Nela, podemos ver a classificação da matriz hermitiana \mathcal{H} , e da matriz dos autovalores \mathcal{U} em termos das simetrias impostas e do índice β , ou seja, dependendo da presença ou da ausência das simetrias de reversão temporal (SRT) e de rotação de spin (SRS).

A TMA de transporte através de um bilhar quântico pode basear-se tanto no ensemble de matrizes de espalhamento como no ensemble de matrizes hamiltonianas. Nas próximas seções, introduziremos essas duas abordagens separadamente, também, descreveremos os métodos numéricos associados à cada abordagem, e mostraremos os resultados, já conhecidos na literatura, que recuperamos com esses algoritmos, afim de demonstrar sua eficácia.

2.3 Abordagem Hamiltoniana

Para descrever a abordagem hamiltoniana e o algoritmo numérico associado a ela tomamos como base a referência [88]. De acordo com o que foi visto na seção 2.2, as classes de universalidade de Wigner-Dyson (ortogonal, unitária e simplética) podem ser descritas pela forma da matriz hamiltoniana. Sabendo-se que $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$, podemos analisar cada ensemble separadamente da seguinte forma: .

1. Para o EGS podemos escrever o conjugado hermitiano de \mathcal{H} ², Eq.2.2 como

$$\mathcal{H}^\dagger = (\mathcal{H}^0)^T \otimes \mathbb{1} - i \sum_{k=1}^3 (\mathcal{H}^k)^T \otimes \sigma_k, \quad (2.6)$$

portanto, podemos perceber que a parte real de \mathcal{H} deve ser simétrica, e as partes imaginárias antissimétricas

²Utilizamos as propriedades do produto de Kronecker: $(A \otimes B)^\dagger = (A^\dagger \otimes B^\dagger)$, $(A \otimes B)^T = (A^T \otimes B^T)$ e $(A \otimes B)^* = (A^* \otimes B^*)$.

2. Para o EGU podemos escrever o hamiltoniano da seguinte forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 + i\mathcal{H}^1, \quad (2.7)$$

mais uma vez, \mathcal{H}^0 é a parte real e deve ser simétrica e \mathcal{H}^1 é a parte imaginária e antissimétrica de \mathcal{H} .

3. Enquanto para o EGO, temos, $\mathcal{H} = \mathcal{H}^0$, uma matriz real e simétrica.

Podemos, portanto, escrever a distribuição para o hamiltoniano como a expressão 2.1, onde, os elementos de \mathcal{H} possuem média e variância dadas por:

$$\langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^k \rangle = 0; \quad (2.8)$$

$$\langle (\mathcal{H}_{\mu\nu}^k)^2 \rangle = \begin{cases} \frac{2\lambda^2}{M}, & \text{se } k = 0 \text{ e } \mu = \nu; \\ 0, & \text{se } k > 0 \text{ e } \mu = \nu; \\ \frac{\lambda^2}{\beta M}, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (2.9)$$

As expressões, acima, estão deduzidas no apêndice A.

2.3.1 Geração numérica

Numericamente, geramos números gaussianos aleatórios da matriz real simétrica e das $\beta - 1$ matrizes reais antissimétricas do hamiltoniano \mathcal{H} , com dimensão M . Dada as expressões 2.8 e 2.9, percebemos a necessidade de gerar M elementos aleatórios com média nula e com variância $2\lambda^2/M$ para os elementos da diagonal e $\lambda^2/\beta M$ para os elementos fora da diagonal (parte triangular superior e inferior) da matriz real simétrica e das $\beta - 1$ matrizes reais antissimétricas, esta com diagonal nula e triangular inferior oposta à superior.

Como vimos na seção 2.1, o bilhar quântico pode ser considerado como um sistema fundamental para análise de fenômenos de transporte em física mesoscópica, haja vista a possibilidade de encontrar os autovalores de transmissão, oriundos da matriz de espalhamento do sistema, que são o código de identificação do sistema mesoscópico. Propriedades de transporte pode ser calculada pelo acoplamento de M auto-estados de \mathcal{H} , com N_T canais de espalhamento [89, 90], sendo $N_T = N_1 + N_2 + \dots + N_L$ onde L é o número de guias acoplados ao bilhar. Uma vez que $M \gg N_T$ esta construção introduz um grande número de parâmetros de acoplamento, enquanto que apenas alguns parâmetros independentes determinam a estatística do espalhamento da matriz \mathcal{S} do sistema. A matriz \mathcal{S} deve ser gerada inúmeras vezes, de modo a se obter um ensemble de matrizes suficientemente grande para analisar estatisticamente o sistema. Ela pode ser obtida a

partir do hamiltoniano \mathcal{H} do bilhar quântico com a utilização da fórmula de Mahaux-Weidenmüller [87]

$$\mathcal{S}(\epsilon) = \mathbb{1} - 2\pi i \mathcal{W}^\dagger \frac{1}{\epsilon - \mathcal{H} + i\pi \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger} \mathcal{W}, \quad (2.10)$$

onde \mathcal{W} é uma matriz determinística $M \times N_T$, não aleatória, que modela o acoplamento dos M estados de ressonância da cavidade com os N_T modos de propagação dos guias. Para um bilhar quântico com dois terminais, a matriz \mathcal{W} contém informações sobre o número total de canais abertos nos dois guias, podendo-se escrever explicitamente

$$\mathcal{W} = (\mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2), \quad (2.11)$$

a partir de forma geral

$$\mathcal{W} = (\mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2, \mathcal{W}_3, \dots, \mathcal{W}_L), \quad (2.12)$$

onde as matrizes \mathcal{W}_l ($M \times N_l$) estão associadas aos l -ésimos guias. Além disso, a matriz de acoplamento satisfaz o vínculo de ortogonalidade [89–91]

$$\mathcal{W}_p^\dagger \mathcal{W}_q = \frac{\lambda}{\pi} \delta_{p,q}. \quad (2.13)$$

Assim, o processo de transmissão direta³ de um guia para o outro é desprezado [90]. Garantindo assim a universalidade dos resultados de Wigner-Dyson.

No problema em questão, consideramos apenas características locais, portanto, não levamos em consideração a dependência da energia na matriz de espalhamento, então, $\epsilon = 0$. Para garantir a universalidade dos observáveis, construímos o ensemble gaussiano, de modo que $M \rightarrow \infty$, ou como enunciamos anteriormente, $M \gg N_T$. Explorando a relação de ortogonalidade 2.13 e as relações de ortogonalidade da base discreta de Fourier

$$\frac{2}{N+1} \sum_{n=1}^N \text{sen} \left(\frac{n\pi m}{N+1} \right) \text{sen} \left(\frac{n\pi m'}{N+1} \right) = \delta_{mm'}, \quad (2.14)$$

podemos, então, escrever a matriz de acoplamento como

$$(\mathcal{W}_p)_{m,n} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(M+1)}} \text{sen} \left[\frac{m \left(\sum_{i=0}^{p-1} N_i + n \right) \pi}{M+1} \right], \quad (2.15)$$

onde $m = 1, 2, \dots, M$ e $n = 1, 2, \dots, N_p$.

2.4 Abordagem da Matriz de Espalhamento \mathcal{S}

Como vimos anteriormente, utilizamos a TMA para descrever o transporte quântico em cavidades caóticas (bilhar quântico). Abordaremos agora como essa teoria pode basear-se no ensemble de matrizes de espalhamento.

³Na transmissão direta não há formação de um estado ressonante na cavidade.

2.4.1 Ensemble Circular

O ensemble circular foi introduzido por Dyson em 1962 como alternativa mais tratável matematicamente para o ensemble gaussiano [8]. A partir de então, propriedades estatísticas do transporte eletrônico em sistemas abertos, como cavidades caóticas, puderam ser analisadas diretamente de uma TMA voltada para a matriz de espalhamento. Vimos anteriormente que uma cavidade conectada a guias pode ser descrita por sua matriz de espalhamento \mathcal{S} . Para contatos ideais ela é uniformemente distribuída no grupo unitário.

Em mecânica estatística, nós equiparamos a média temporal de uma quantidade física para uma determinada amostra com sua média no espaço de fase em um tempo fixo. Do mesmo modo, as estatísticas medidas para uma cavidade sobre o eixo de energia são as mesmas obtidas para um ensemble de cavidades idênticas (matrizes \mathcal{S}) com energia fixa. Dessa maneira, podemos comparar o espaço de matrizes \mathcal{S} ao espaço de fase em mecânica estatística, e perceber a ideia de medida invariante. Essa medida pondera igualmente todas as matrizes que satisfazem a unitariedade e os vínculos de simetria. Além disso, é definida sob a exigência de ser invariante sob um automorfismo de uma determinada classe de simetria nela mesma [2].

$$d_{\mu}^{(\beta)}(\mathcal{S}) = d_{\mu}^{(\beta)}(\mathcal{S}'). \quad (2.16)$$

Essa medida invariante exigida é conhecida como a medida de Haar, onde $\mathcal{S}' = USV$, sendo U e V matrizes unitárias arbitrárias, tal que o produto USV ainda satisfaz as restrições impostas a \mathcal{S} , de modo que, $V = U^T$ quando $\beta = 1$ e $V = U^R$ quando $\beta = 4$ [2, 8]. A medida de Haar implica que os autovalores e autovetores da matriz de espalhamento \mathcal{S} são distribuídos independentemente. A matriz de autovetores U , que diagonaliza a matriz de espalhamento, é uniformemente distribuída no grupo ortogonal, unitário ou simplético para $\beta = 1, 2$ ou 4 , respectivamente, dando origem aos ensembles de matrizes circulares, assim chamados, porque a densidade de autovalores é constante no círculo unitário no plano complexo [8]. Sendo assim, enunciamos os seguintes ensembles circulares

- $\beta = 1$ - **Ensemble Circular Ortogonal (ECO)** - É o ensemble de matrizes unitárias simétricas uniformemente distribuídas.
- $\beta = 2$ - **Ensemble Circular Unitário (ECU)** - É o ensemble que contém todas as matrizes unitárias.
- $\beta = 4$ - **Ensemble Circular Simplético (ECS)** - Contém as matrizes unitárias auto-duais.

A tabela 2.2 apresenta um resumo da classificação de Dyson dos ensembles circulares.

Tabela 2.2 Classificação de Dyson dos ensembles circulares

β	SRT	SRS	\mathcal{S}	Ensemble
1	sim	sim	unitária e simétrica	ECO
2	não	irrelevante	unitária	ECU
4	sim	não	unitária e quatérnion auto-dual	ECS

2.4.2 Técnica da Decomposição QR (Fatoração de Gram-Schmidt)

Antes de falarmos sobre a Decomposição QR temos que lembrar que os nossos algoritmos de transporte são baseados em teoria de matrizes aleatórias, e por isso, devemos gerar numericamente matrizes aleatórias, ou melhor, ensembles de matrizes aleatórias.

- Para o ECO as matrizes aleatórias possuem entradas reais (\mathbb{R});
- Para o ECU as matrizes aleatórias possuem entradas complexas (\mathbb{C});
- Para o ECS as matrizes aleatórias possuem entradas quaterniônicas (\mathbb{H}).

Para a construção do algoritmo baseado na matriz \mathcal{S} geramos matrizes aleatórias unitárias distintas para cada ensemble, representando os espaços simétricos Riemannianos, estocasticamente distribuídos de acordo com a medida de Haar. A profunda ligação entre as matrizes aleatórias e os espaços simétricos graças a Dyson [92] e é obtida através do espaço *coset* que definem as classes de simetria dos ensembles de matrizes aleatórias [93]. A matriz \mathcal{S} é decomposta como uma função de uma matriz aleatória, denotada por U , que pode ser ortogonal, unitária ou simplética dada pelo mapeamento de Cartan, como mostrado nas colunas dois (U) e três ($\mathcal{S}(U)$) da tabela 2.3 ⁴.

Tabela 2.3 A Tabela de Cartan dos espaços simétricos Riemannianos descreve as condições impostas as três classes de simetria Wigner-Dyson, Quiral e BDG e os respectivos vínculos impostos aos ensembles. No nosso caso, mostramos e estudamos apenas as duas primeiras.

<i>Classe</i>	U	$\mathcal{S}(U)$
A (ECU)	$\mathcal{U}(N_T)$	U
AI (ECO)	$\mathcal{U}(N_T)$	$U^T U$
AII (ECS)	$\mathcal{U}(2N_T)$	$U^T J U$
AIII (chECU)	$\mathcal{U}(2N_T)$	$\Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U$
BDI (chECO)	$\mathcal{O}(2N_T)$	$\Sigma_z U^T \Sigma_z U$
CII (chECS)	$\mathcal{S}p(4N_T)$	$\Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U$

⁴Para detalhes sobre o espaço simétrico e o mapeamento de Cartan consultar as referências [94, 95]

Nela, J e Σ_z são definidos como

$$J = \begin{bmatrix} 0 & -\mathbb{1}_{N_T} \\ \mathbb{1}_{N_T} & 0 \end{bmatrix}, \quad \Sigma_z = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{N_T} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{N_T} \end{bmatrix}$$

Na tabela de Cartan (tabela 2.3), a primeira coluna, da esquerda para a direita, nomeia as classes $A(CUE)$, $AI(CUO)$ e $AII(CSE)$ para a simetria Winer-Dyson e $AIII(chCUE)$, $BDI(chCOE)$ e $CII(chCSE)$ para a simetria quiral, por isso as letras *ch* antes das siglas da qual falaremos no próximo capítulo.

No nosso trabalho, levamos em consideração apenas as classes de simetria Wigner-Dyson e quirais tanto para garantir a eficiência do algoritmo, quando recuperamos resultados conhecidos na literatura, quanto para encontrar novos resultados, que é a abordagem principal desta dissertação. Em nossa abordagem numérica N_T corresponde ao número total de canais nos guias acoplados ao bilhar quântico, portanto $N_T = N_1 + N_2$. A última coluna da tabela 2.3 impõe as condições para a matriz \mathcal{S} .

Aplicamos o método da decomposição QR para produzir matrizes aleatórias unitárias, Q , e matrizes triangulares superior, R a partir de matrizes aleatórias U . De forma geral, em álgebra linear, uma decomposição QR é uma decomposição de uma matriz complexa A de dimensão $m \times n$, em um produto $A = QR$ de uma matriz unitária Q de tamanho $m \times n$ e uma matriz triangular superior R de dimensão $n \times n$ com entradas diagonais não nula. Então, quando A for uma matriz não-singular, esta decomposição é única e sempre existe. Esse método pode ser aplicado em solução dos problemas dos mínimos quadrados e problemas de autovalores. Além disso, é uma abordagem “padrão” implementada em software de uso geral e mais robusta do que a abordagem por equações lineares. Existem vários métodos para calcular a decomposição QR, como: reflexões Householder e ortogonalização de Gram-Schmidt, os quais não abordaremos aqui, mas sugerimos como leitura adicional as referências [96, 97].

2.4.2.1 Decomposição QR aplicada à simetria Wigner Dyson

De acordo com a tabela 2.3, precisamos apenas das matrizes unitárias com autovalores complexos de magnitude 1, ou seja, distribuídos no círculo unitário no plano complexo.

Podemos, em termos numéricos, testar se as matrizes unitárias (geradas aleatoriamente) estão ou não distribuídas na medida de Haar. Essa constatação é feita calculando-se as fases associadas à matriz de autovalores. O processo é realizado várias vezes e as informações coletadas são utilizadas para plotar um histograma de fases (em graus) normalizados para ter área com valor igual a um (1) [98]. Para a construção do histograma, que veremos na figura 2.1, usamos um ensemble com um milhão (10^6) de matrizes aleatórias complexas de dimensão 50×50 . Adotamos o software *Matlab* como ferramenta computacional aplicada em nossa pesquisa.

Podemos perceber, observando os espaços vazios no meio do histograma, figura 2.1, que a matriz aleatória complexa, gerada, não produz uma matriz unitária distribuída com a medida de Haar quando aplicamos diretamente a decomposição QR, ou seja, as fases de Q não são uniformemente distribuídas na medida de Haar. Isso se deve ao fato, de

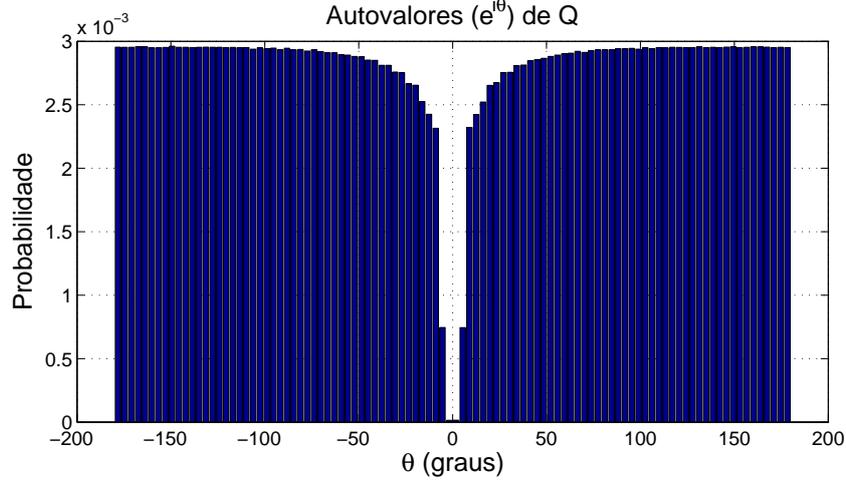


Figura 2.1 Fatoração QR (Gram-Schmidt) da matriz aleatória sem correção de fase. O histograma de fases foi plotado para uma matriz aleatória de dimensão $N_T = 50$ e (10^6) realizações.

que o algoritmo QR não garante entradas diagonais não negativas em R . A correção do problema (com histograma representado na figura 2.2) pode ser feita por uma perturbação aleatória de fases [98], como:

$$U = Q * \text{diag}(\exp(i * 2 * \pi * \text{randn}(N_T, 1))), \text{ ou} \quad (2.17)$$

$$U = Q * \text{diag}(\exp(i * 2 * \pi * \text{randn}(2 * N_T, 1))), \text{ se } \beta = 4, \quad (2.18)$$

onde U é a matriz unitária uniformemente distribuída com a medida de Haar, randn indica geração de números aleatórios com média 0 e variância 1 e diag constrói uma matriz diagonal. Perceba, também, que para o caso simplético a dimensão da matriz é dobrada devido a degenerescência de spin.

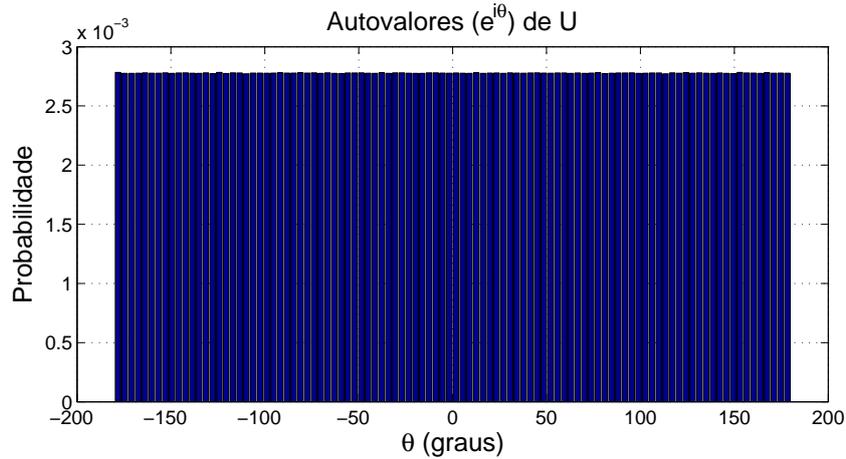


Figura 2.2 Histograma de fases corrigidas. Desse modo, a matriz unitária, obtida pela decomposição QR, é distribuída uniformemente com a medida de Haar

Depois do problema corrigido podemos escrever a matriz de espalhamento de acordo com a tabela 2.3

- $\beta = 1 \Rightarrow \mathcal{S}_1 = U^T U$;
- $\beta = 2 \Rightarrow \mathcal{S}_2 = U$;
- $\beta = 4 \Rightarrow \mathcal{S}_4 = U^T J U$.

Percebemos assim, que para as classes Wigner-Dyson precisamos apenas das matrizes unitárias, $U(N_T)$ para os ensembles unitário e ortogonal, e $U(2N_T)$ para o ensemble simplético.

2.5 Resultados Analíticos

Ao longo dos anos, o transporte quântico em microestruturas balística vem sendo intensivamente investigado, assim como os efeitos de interferência quântica [99] e a coerência de fase da mecânica quântica, que afeta fortemente as propriedades eletrônicas [8], como a condutância e sua variância. Os efeitos de interferência, devido a coerência de fase, podem ser observados como flutuações na condutância, essas flutuações, são universais, e dependem apenas de simetrias básicas do sistema. Como podemos ver na representação da figura 2.3, os elétrons se movimentam balisticamente em uma região praticamente sem impurezas. Desta maneira, a natureza caótica do movimento clássico dentro do bilhar

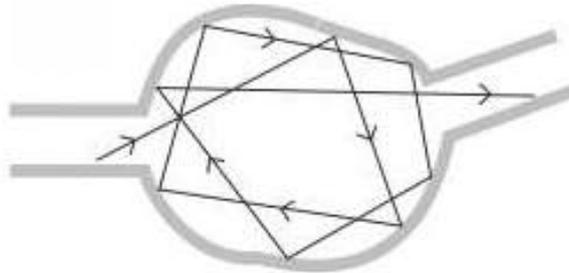


Figura 2.3 Representação de uma cavidade balística caótica modelada por um bilhar quântico. Figura retirada da referência [11]

pode se revelar na condutância apenas se os elétrons sofrerem diversos espalhamento nas bordas do bilhar antes de saírem pelo outro guia.

No artigo [100] *Baranger e Mello* obtiveram a correção da localização fraca (δG), para os ensembles ECO ($\beta = 1$) e ECU ($\beta = 2$), posteriormente também sendo estendido ao ensemble ECS ($\beta = 4$). Sendo assim, entendemos que o bilhar quântico é bem compreendido na literatura [8, 100]. Portanto, listamos a baixo, as expressões 2.19 e 2.24, que dizem respeito a média e variância da condutância, para os ensembles universais de Wigner-Dyson. Esses resultados, serão comparados com os modelos numéricos apresentados na seção seguinte.

2.5.1 Média da Condutância

As médias da condutância para as três classe de Wigner-Dyson são:

$$\langle G \rangle_{wd} = \frac{2e^2}{h} \frac{N_1 N_2}{N_T - 1 + 2/\beta}, \quad (2.19)$$

Na literatura, encontramos um interesse peculiar por dois limites distintos, são eles:

- **Regime quântico extremo**

Quando tomamos o regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, as médias da condutância, em unidades de $2e^2/h$, apresentam os seguintes valores

$$\frac{\langle G \rangle_{wd}}{(2e^2/h)} = \begin{cases} \frac{1}{3}, & \text{para } ECO, \\ \frac{1}{2}, & \text{para } ECU, \\ \frac{2}{3}, & \text{para } ECS, \end{cases} \quad (2.20)$$

como poderá ser visto na figura 2.4.

- **Limite semiclássico**

A expressão 2.19 pode ser expandida assintoticamente em potências de N_T no limite semiclássico, $N_1, N_2 \gg 1$, da seguinte forma

$$\langle G \rangle_{wd} = \frac{2e^2}{h} \left[\frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right)^2 \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^3} + \dots \right]. \quad (2.21)$$

O primeiro termo (termo dominante) da equação 2.21 é a condutância clássica, lei de Ohm, de dois contatos ($\langle G_1 \rangle = N_1, \langle G_2 \rangle = N_2$) em série

$$\frac{1}{\langle G \rangle_{wd}} = \frac{1}{(2e^2/h)} \left[\frac{1}{\langle G_1 \rangle} + \frac{1}{\langle G_2 \rangle} \right] = \frac{1}{(2e^2/h)} \left[\frac{1}{N_1} + \frac{1}{N_2} \right]. \quad (2.22)$$

O segundo termo é a correção da localização fraca (δG) para $\beta = 1$ e anti-localização para $\beta = 4$. Para o caso de dois contatos idênticos, $N_1 = N_2$, ela se revela como sendo o termo de ordem N^0

$$\frac{\delta G_{wd}}{2e^2/h} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{2}{\beta}\right). \quad (2.23)$$

2.5.2 Variância da condutância

Para a variância da condutância temos o seguinte resultado

$$\boxed{var[G]_{wd} = \frac{4e^4}{h^2} \frac{2N_1N_2(N_1 - 1 + 2/\beta)(N_2 - 1 + 2/\beta)}{\beta(N_T - 1 + 4/\beta)(N_T - 2 + 2/\beta)(N_T - 1 + 2/\beta)^2}} \quad (2.24)$$

Aqui, também observamos os dois limites

- **Regime quântico extremo**

No regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, temos os seguintes valores para a variância da condutância

$$\frac{var[G]_{wd}}{(4e^4/h^2)} = \begin{cases} \frac{4}{45}, & \text{para } ECO, \\ \frac{1}{12}, & \text{para } ECU, \\ \frac{1}{18}, & \text{para } ECS. \end{cases} \quad (2.25)$$

Assim como para os resultados das médias da condutância no limite quântico extremo, poderemos observar, também na figura 2.4, os resultados das variâncias da condutância que acabamos de mostrar.

- **Limite semiclássico**

Tomando o limite semiclássico, $N_1, N_2 \gg 1$, a expressão 2.24, expandida, simplifica-se para a seguinte forma

$$var[G]_{wd} = \frac{4e^4}{h^2} \left[\frac{2}{\beta} \frac{N_1^2 N_2^2}{(N_1 + N_2)^4} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_T}\right) \right]. \quad (2.26)$$

Tomando $N_1 = N_2$ (contatos simétricos) na equação 2.26 é possível encontrar os seguintes valores para a variância da condutância

$$\frac{var[G]_{wd}}{(4e^4/h^2)} = \begin{cases} \frac{1}{8}, & \text{para } ECO, \\ \frac{1}{16}, & \text{para } ECU, \\ \frac{1}{32}, & \text{para } ECS. \end{cases} \quad (2.27)$$

Essas são as expressões, e resultados universais dos ensembles de Wigner-Dyson [8, 100] a muito tempo já conhecidos na literatura. A partir de então, utilizamos os dois métodos numéricos para plotar os gráficos referentes à média e a variância da condutância, assim como os da distribuição da condutância.

2.6 Resultados Numéricos

Começamos mostrando os gráficos das médias e das variâncias da condutância para todos os ensembles de Wigner-Dyson. Utilizamos os resultados exatos, mostrados na seção anterior, juntamente com os dois métodos numéricos que modelamos. Inicialmente, temos a intenção de validar o nosso algoritmo, recuperando os resultados já conhecidos na literatura.

Na figura 2.4, a coluna da esquerda representa, (a) a média da condutância, e (b) a variância da condutância, ambos para contatos simétricos ($N = N_1 = N_2$) em função do número de canais abertos para os três ensembles da TMA, enquanto na coluna da direita temos, (c) a média, e (d) a variância da condutância para contatos assimétricos ($N_1 \neq N_2$), com $N_1 = 2$ e N_2 variando de 1 até 10, também para os três ensembles. As

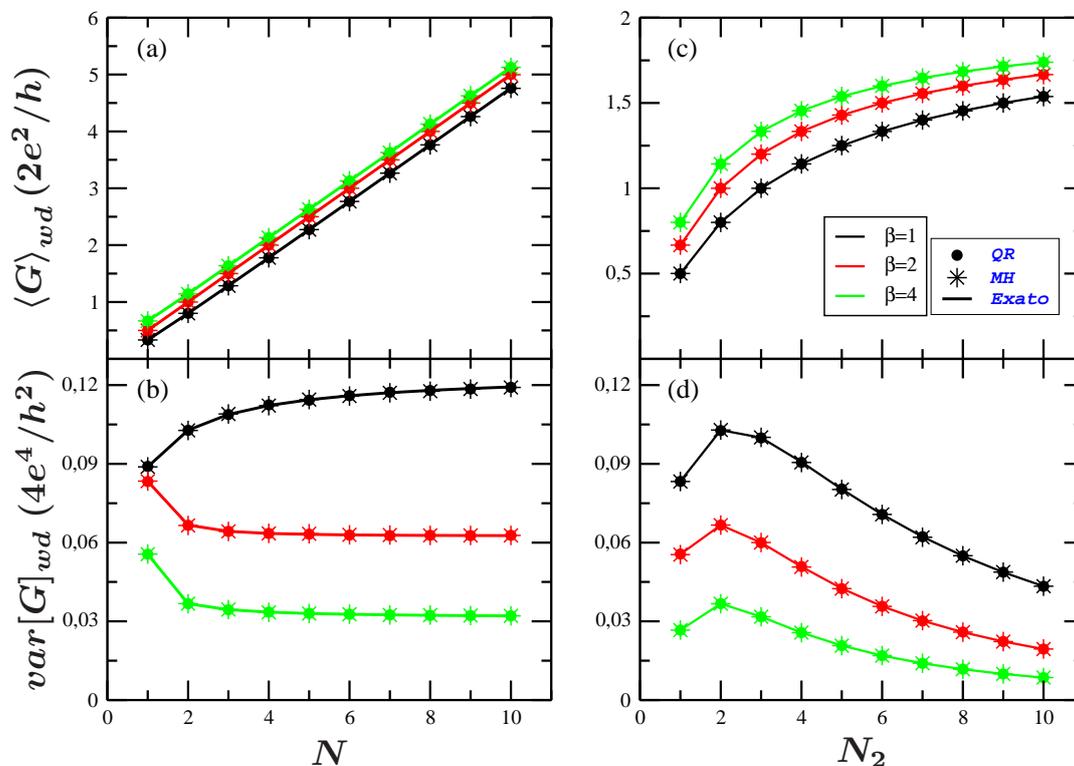


Figura 2.4 A média (acima) e a variância (abaixo) da condutância são plotados em unidades de $2e^2/h$ e $4e^4/h^2$, respectivamente. (a-b) contatos simétricos $N = N_1 = N_2$ e (c-d) contatos assimétricos com $N_1 = 2$ e $0 < N_2 \leq 10$. As linhas pontilhadas, que estão sobrepostas na figura, são obtidas pelas simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e pelo Modelo Hamiltoniano (MH). As linhas sólidas são os resultados exatos.

linhas sólidas são os resultados exatos, dados pelas equações 2.24 e 2.19, enquanto as linhas pontilhadas, que estão sobrepostas, foram obtidas por nossas simulações QR (●) e MH (*). Logicamente todos os resultados são discretos e não contínuos, então as linhas sólidas se apresentam apenas para uma melhor visualização.

Os resultados das médias e variâncias da condutância para as classes Wigner-Dyson recuperados por nossas modelagens numéricas é apenas o primeiro passo para demonstrarmos o quanto eles são eficazes. De maneira similar, poderíamos apresentar os resultados numéricos para as distribuições da condutância em conformidade com os resultados exatos. No entanto, nesse caso, poucos são os resultados exatos conhecidos (devido à complexidade para obtê-los analiticamente), restando apenas alguns casos particulares como $N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 [101, 102]. Contudo, temos a intenção de ir além dos casos particulares, ou seja, queremos fazer uma abordagem mais generalizada. Por esse motivo, abordaremos as distribuições apenas numericamente.

Percebemos, através dos histogramas normalizados da figura 2.5, que para $\beta = 1, 2$ e 4 (linhas de cima para baixo) a distribuição da condutância tende a uma gaussiana na medida que aumenta-se o número de canais nos guias, ou seja, quando o sistema sai do limite quântico extremo em direção ao limite semi-clássico. Esse comportamento está

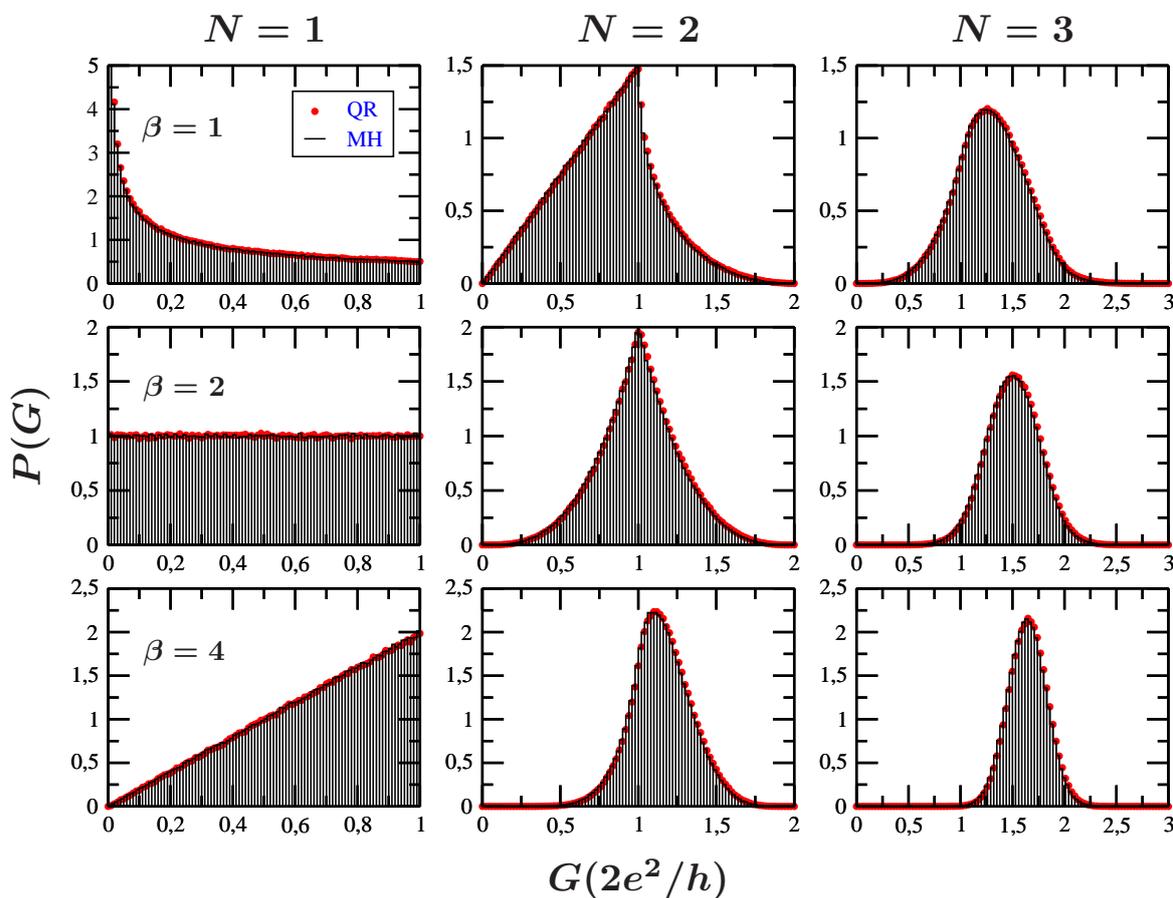


Figura 2.5 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar quântico e simétrico dos ensembles de Wigner-Dyson em unidades de $2e^2/h$. Os pontos e as linhas representam respectivamente as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e o Modelo Hamiltoniano (MH) com 10^6 realizações da matriz \mathcal{S} . As colunas, da esquerda para direita, correspondem a $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 , enquanto as linhas, de cima para baixo, correspondem a $\beta = 1, 2$ e 4 .

em comum acordo com os resultados de Wigner-Dyson. Construimos esses histogramas utilizando os dois métodos numéricos, mais uma vez, usando ensembles de 10^6 matrizes de espalhamento.

Percebemos mais uma vez que os dois métodos se sobrepõem, no entanto, é preciso salientar que essa convergência não dá-se facilmente, existe um custo computacional a ser levado em consideração. Para as médias e as variâncias da condutância, figura 2.4, a convergência ocorre mais rápido do que as distribuições da condutância, figura 2.5. Neste, o processo de convergência é bastante lento e por isso o número elevado de realizações (10^6). Outra observação a ser feita é que para todos os resultados o método da decomposição QR é sempre mais rápido do que o modelo Hamiltoniano. Pois, não é necessário cálculos com matrizes de grandes dimensões.

No próximo capítulo faremos uma abordagem similar, entretanto, passaremos a falar, definitivamente, sobre o bilhar de Dirac caótico associado às classes de simetria quiral. Na última seção, faremos uma comparação entre as duas classes de simetria.

Bilhar de Dirac Caótico

Vimos no capítulo anterior a existência de três classes de simetria dos ensembles de Wigner-Dyson, em termos da presença ou ausência da SRT e SRS . Descrevemos a possibilidade de utilização desses ensembles para o estudo das propriedades de sistemas mesoscópicos desordenados, em especial, as propriedades do transporte eletrônico no bilhar quântico. No entanto, existem outros sistemas desordenados, nos quais as classes de Wigner-Dyson não se aplicam. Nestes casos, simetrias adicionais tornam-se relevantes e surgem novas classes de universalidade e novos ensembles de matrizes aleatórias.

Com a descoberta dos novos materiais, sete outras classes de simetria começaram a ser estudadas, em termos da presença ou ausência da simetria partícula-buraco (SPB) e da simetria de sub-rede (SSR) ou quirais [25, 26], e como já dissemos anteriormente, foram divididas em três ensembles de matrizes aleatórias quirais e quatro BdG. Estas novas classes de simetria receberam, recentemente, uma atenção renovada devido a existência de fases topologicamente não triviais [44, 46]. Dentre essas classes, nos concentraremos, de agora em diante, nas classes de simetrias referentes aos ensembles quirais.

Nesse capítulo, abordaremos as implicações da simetria quiral, no tocante ao bilhar de Dirac caótico acoplado a dois guias de onda com contatos ideais. Assim como fizemos para o bilhar quântico, nós desenvolvemos duas simulações numéricas independentes para gerar a matriz \mathcal{S} dos ensembles quirais. Ambos os ensembles foram usados para calcular a média, a variância e, além disso, a distribuição da condutância. Perceberemos a convergência dos nossos resultados em ambos os casos. Nossas simulações também deram suporte aos resultados analíticos, que foram encontrados, recentemente, pela extensão do método diagramático de integração sobre o grupo unitário, como pode ser visto no nosso artigo [4]. Outra relevância, no que diz respeito a utilização e convergência de dois métodos numéricos, é o fato de podermos encontrar alguns resultados ainda não alcançados pelo cálculo exato.

3.1 Simetria Quiral

A classe de simetria quiral foi introduzida no contexto de propriedades espectrais do operador de Dirac em cromodinâmica quântica (QCD). Essa informação pode ser vista no artigo [29]. Na abordagem descrita no referido artigo, o operador de Dirac pode ser descrito pela teoria de matrizes aleatórias, dessa maneira, assim como os ensembles de Wigner-Dyson, podemos considerar três casos diferentes: o ensemble quiral ortogonal (chEO), o ensemble quiral unitário (chEU) e o ensemble quiral simplético (chES). A

diferença entre os ensembles Wigner-Dyson e quiral é a validade da simetria de sub-rede (SSR) nos ensembles quirais.

Além de férmions relativísticos, as classes quirais também são apropriadas para descrever hamiltonianos de redes bipartidas com SSR mantida [26]. Vimos no capítulo 1, que as redes $2D$ quadrada e hexagonal são exemplos de estruturas que possuem a SSR, e também, que a presença do termo de massa quebra a SSR. Dessa maneira, o hamiltoniano de Dirac descreve partículas de spin semi-inteiro sem massa [21]. A característica da simetria quiral é a presença da estrutura de rede bipartida com duas sub-redes A e B interligadas. Essa simetria descreve sistemas desordenados com amplitudes de *hopping* aleatório (também conhecido como desordem não diagonal) [103], como, por exemplo, o modelo *tight-binding* com *hopping* aleatório entre primeiros vizinhos [104] e o grafeno, já ilustrado na introdução. Neste, a estrutura hexagonal possui dois sítios por célula elementar, permitindo agrupar todos os átomos nas duas sub-redes A e B , de modo que os vizinhos mais próximos pertençam às duas sub-redes [68]. Seguindo esse contexto, o hamiltoniano *tight-binding* opera no espaço AB das duas sub-redes e no espaço $K - K'$ dos vales, portanto, a função de onda é descrita por um bloco spinor de quatro componentes

$$\Psi = (\psi_{AK}, \psi_{BK}, \psi_{BK'}, \psi_{AK'})^T, \quad (3.1)$$

satisfazendo assim a equação de Dirac $4D$, que pode ser escrita da seguinte forma [21, 36, 68, 105]

$$\hat{\mathcal{H}} = v\tau_z \otimes \hat{\sigma} \cdot \hat{p}. \quad (3.2)$$

Para a notação compacta, temos dois conjuntos de matrizes de Pauli $\hat{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ e $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, com τ_0 e σ_0 matrizes unitárias de blocos 2×2 , que atuam respectivamente no espaço dos vales ($K - K'$) e no spinor Ψ (espaço da sub-rede AB) [36, 68, 105], além disso, v e p são respectivamente a velocidade e o momento da partícula. O grau de liberdade do spin descrito pelas matrizes de Pauli σ_i é chamado de “pseudo-spin”, para distinguir do spin real do elétron [36].

A simetria quiral, denotada por C_0 no artigo [68], é gerada pela aplicação simultânea dos conjuntos de matrizes de Pauli

$$C_0 : A \mapsto -\sigma_z \tau_0 A \sigma_z \tau_0. \quad (3.3)$$

Ela é produzida diretamente pelo hamiltoniano descrito pela equação 3.2, sendo portanto sua simetria básica.

3.1.1 Hamiltoniano desordenado com simetria quiral

Como nas referências [26, 68, 103], o hamiltoniano de Dirac sem massa com simetria de sub-rede (SSR) ou quiral satisfaz a seguinte relação de anti-comutação

$$\mathcal{H} = -\sigma_z \mathcal{H} \sigma_z, \quad (3.4)$$

de modo que,

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_M & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_M \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

onde, $\mathbb{1}_M$ é uma matriz identidade $M \times M$ e podemos interpretar o M dos $\mathbb{1}$'s e $-\mathbb{1}$'s em σ_z como o número de átomos em cada sub-rede [32]. Genericamente, a simetria quiral implica que o hamiltoniano pode ser escrito sob a forma de bloco não diagonal por uma transformação unitária adequada [68], isso leva a crer que de alguma forma a desordem diagonal conecta cada sitio para si, quebrando a simetria quiral [103].

No nosso problema em questão, a aleatoriedade conecta sítios de duas sub-redes diferentes (vizinhos mais próximos), nesse caso, o hamiltoniano é então definido pelo modelo de *hopping* aleatório [103, 106]

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} (t_{ij} c_j^\dagger c_i) = \begin{pmatrix} 0 & t_{A,B} \\ t_{A,B}^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

com $\langle i, j \rangle$ representando os sítios de vizinhos mais próximos da rede que pertencem às duas sub-redes, c_i^\dagger e c_i são os operadores de criação e aniquilação dos elétrons no sítio i e t_{ij} é o parâmetro de *hopping*, integrais de *hopping* aleatório dos vizinhos mais próximos que são variáveis aleatórias reais independentes, satisfazendo um quadro de probabilidade com média zero e variância arbitrária [103]. A divisão em duas sub-redes leva o hamiltoniano a mudar de sinal sob uma transformação onde a função de onda muda de sinal em uma sub-rede, mas não na outra [107]. Como consequência, temos um ponto especial no espectro de energia no centro da banda, $\epsilon = 0$, com autovalores que tornam-se pares simétricos de energia ($\epsilon, -\epsilon$) em torno do modo zero $\epsilon = 0$ [103]. Neste ponto especial, o sistema mostra propriedades de transporte muito incomuns, que são assinaturas da classe de simetria quiral [102].

Nas próximas seções, faremos uma análise similar a que foi feita no capítulo 2. Descreveremos a abordagem hamiltoniana e de espalhamento separadamente, enfatizando os algoritmos modelados por nós, para cada caso em aplicação ao bilhar de Dirac caótico aberto.

3.2 Modelo Hamiltoniano

A presença da SSR leva o hamiltoniano à seguinte forma [29, 106, 108]

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{T} \\ \mathcal{T}^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Aqui, \mathcal{T} é uma matriz aleatória quadrada de dimensão $M \times M$, portanto, a matriz \mathcal{H} tem dimensão $2M \times 2M$. Além disso, a natureza de \mathcal{T} (simétrica real, complexa hermitiana ou quatérnion real) caracteriza, respectivamente, os ensembles chEO, chEU e o chES [106]. Como dissemos anteriormente, os M 's representam os números de átomos em cada sub-rede, em um total de $2M$ átomos no bilhar de Dirac caótico. Dessa maneira, esse é o

número total de ressonâncias dentro do bilhar de Dirac, incluindo ambos os graus de liberdade das duas sub-redes. A teoria de matrizes aleatórias estabelece que as entradas da matriz \mathcal{T} tem distribuição gaussiana dada por [28, 109]

$$P(\mathcal{T}) \propto \exp \left\{ -\frac{\beta M}{2\lambda^2} \text{Tr} (\mathcal{T}^\dagger \mathcal{T}) \right\}, \quad (3.8)$$

onde $\lambda = \frac{2M\Delta}{\pi}$, e os elementos de \mathcal{T} possuem média e variância dadas por:

$$\langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^k \rangle = 0; \quad (3.9)$$

$$\langle (\mathcal{T}_{\mu\nu}^k)^2 \rangle = \frac{\lambda^2}{\beta M}. \quad (3.10)$$

Os cálculos utilizados para encontrar as expressões acima foram deduzidos no apêndice B.

Respeitando as condições impostas aos elementos da matriz aleatória quiral, \mathcal{T} , (equações 3.9 e 3.10), podemos, assim como foi feito para as classes de Wigner-Dyson, analisar separadamente cada ensemble gaussiano da classe quiral

- $\beta = 1$ - Ensemble quiral gaussiano ortogonal (chEGO) - temos que os elementos de \mathcal{H} devem ser reais, portanto,

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^0; \quad (3.11)$$

- $\beta = 2$ - Ensemble quiral gaussiano unitário (chEGU) - os elementos de \mathcal{H} são complexos, então,

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^0 + i\mathcal{T}^1; \quad (3.12)$$

- $\beta = 4$ - Ensemble quiral gaussiana simplético (chEGS) - A matriz \mathcal{H} possui elementos quaterniônicos,

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^0 \otimes \mathbb{1} + i \sum_{k=1}^{\beta-1} \mathcal{T}^k \otimes \sigma_k, \quad (3.13)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, \mathcal{T}^k com $k = 0, 1, 2$ ou 3 é uma matriz aleatória real, $\mathbb{1}$ e σ_k são respectivamente a matriz unitária e as matrizes de Pauli.

3.2.1 Geração Numérica

De acordo com a equação 3.7 o hamiltoniano do sistema é escrito em forma de blocos fora da diagonal, onde seus elementos são descritos pela matriz aleatória \mathcal{T} que possui dimensão $M \times M$, portanto, geramos M elementos aleatórios com média nula e com variância $\lambda^2/\beta M$.

Como no capítulo anterior, o modelo hamiltoniano para a matriz de espalhamento pode ser escrito pela fórmula de Mahaux-Weidenmüller 2.10. Para o nosso problema, a matriz \mathcal{S} possui dimensão $\bar{N}_T \times \bar{N}_T$, onde $\bar{N}_T = \bar{N}_1 + \bar{N}_2 + \dots + \bar{N}_L$ é o número total de canais abertos nos L terminais, que são conectados ao bilhar de Dirac caótico. Além disso, temos em nossa notação que, $\bar{N}_l = 2N_l$, representando o número de canais abertos no l -ésimo terminal (no problema deste capítulo $L = 2$). Desse modo, nós definimos cada sub-rede com N_l canais abertos e, o sistema é acoplado por duas sub-redes, portanto, existem $2N_l$ canais abertos no l -ésimo terminal. Em resumo, devido a SSR, o menor número possível de canais abertos em cada terminal é igual a dois.

Outra mudança na construção do algoritmo para o bilhar de Dirac, em relação ao bilhar quântico, ocorre na matriz determinística \mathcal{W} . Ela passa a possuir dimensão $2M \times \bar{N}_T$, e, continua representando o acoplamento dos estados ressonantes com os modos propagantes, ou seja, todas as combinações ou interações das ressonâncias do bilhar de Dirac caótico acopladas aos canais abertos dos L terminais, satisfazendo a condição de ortogonalidade, equação 2.13. Além disso, devido a condição imposta a matriz \mathcal{S} , dada pela equação 3.16 que veremos logo abaixo, teremos uma outra relação imposta a matriz \mathcal{W} , dada por

$$\sigma_z \mathcal{W} \Sigma_z = \mathcal{W}. \quad (3.14)$$

Nós consideramos o sistema no ponto de Dirac. $\epsilon = 0$. Como dissemos anteriormente, é um ponto especial devido as duas sub-redes interconectadas e onde podemos observar propriedades de transporte interessantes. Outro fator primordial para o nosso problema e para o método numérico aqui abordado, é que temos que garantir o regime caótico e conseqüentemente a universalidade dos observáveis. Por isso, devemos impor que o número de ressonâncias dentro do bilhar de Dirac seja grande, fazendo $M \gg N_T$. Para ser exato, consideramos $M = 100$, ou seja, geramos matrizes aleatórias de dimensão 100×100 e depois, impusemos as condições para média e variância dos seus elementos, como descrevemos anteriormente. Isso leva o hamiltoniano a ter dimensão 200×200 para o chEGO e chEGU, e 400×400 para o chEGS devido a degenerescência do spin.

3.3 Matriz de Espalhamento

As simetrias que abordamos na introdução continuam válidas. Como já sabemos, o principal vínculo da matriz de espalhamento é a sua unitariedade

$$\mathcal{S}^\dagger(\epsilon) \mathcal{S}(\epsilon) = \mathbb{1}, \quad (3.15)$$

devido a conservação de carga eletrônica. A matriz \mathcal{S} também satisfaz esta outra relação

$$\mathcal{S}(\epsilon) = \Sigma_z \mathcal{S}^\dagger(\epsilon) \Sigma_z. \quad (3.16)$$

que pode ser encontrada combinando-se as equações 3.4 e 2.10, conforme fizemos no apêndice C. Aqui,

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{N_T} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{N_T} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

onde $N_T = N_1 + N_2 + \dots + N_L$. Nós assumimos o transporte eletrônico através do bilhar de Dirac caótico no ponto de Dirac, $\epsilon = 0$. Nesta condição, podemos reescrever a matriz de espalhamento da seguinte forma

$$\mathcal{S} = \Sigma_z \mathcal{S}^\dagger \Sigma_z. \quad (3.18)$$

De acordo com a equação 1.25 a matriz de espalhamento é escrita em forma de blocos, de modo que para o bilhar de Dirac caótico, os blocos de transmissão t_{ij} e reflexão r_{ij} têm dimensão $\bar{N}_T \times \bar{N}_T$, com $i, j = 1, \dots, L$.

3.4 Decomposição QR Aplicada à Simetria Quiral

Mais uma vez, assim como para as classes de Wigner-Dyson, usamos a tabela de Cartan, tabela 2.3, e conseqüentemente os ensembles circulares, para reescrever as matrizes de espalhamento para as classes de simetria quiral. Mas, diferentemente das classes de Wigner-Dyson, a matriz \mathcal{S} possui dimensão $\bar{N}_T \times \bar{N}_T$, que corresponde a $2N_T \times 2N_T$. Além disso, as matrizes unitárias não são mais suficientes, se fazendo necessário, além da matriz unitária, $\mathcal{U}(2N_T)$, para o ensemble circular unitário (chECU), uma matriz ortogonal, $\mathcal{O}(2N_T)$, para o ensemble circular ortogonal (chECO) e uma matriz simplética, $\mathcal{Sp}(4N_T)$, para o ensemble circular simplético (chECS).

Para o chECO, a matriz ortogonal é construída quando aplicamos o método da decomposição QR em uma matriz aleatória real, o resultado, é uma matriz unitária e ortogonal, no entanto, ainda não distribuída na medida de Haar. Para o outro caso, chECS, construímos primeiro a matriz simplética (\mathcal{Sp}) da seguinte forma:

$$\mathcal{Sp} = B_0 \otimes \sigma_0 + i \sum_{k=1}^3 B_k \otimes \sigma_k \quad (3.19)$$

onde B_0 e B_k , com $k = 1, 2$ e 3 , representam as matrizes aleatórias reais e σ_k as matrizes de Pauli. Depois desse processo, podemos aplicar o método da decomposição QR e então teremos uma matriz unitária simplética, que também não está distribuída na medida de Haar. Novamente, para constatar se as matrizes obtidas através da decomposição QR estavam ou não uniformemente distribuídas, testamos numericamente as fases associadas à matriz de autovalores e plotamos o histograma de fases de modo idêntico ao que descrevemos em 2.4.2.1.

Para corrigir as fases e tornar as matrizes distribuídas na medida de Haar, em todos os ensembles, procedemos de forma análoga as equações 2.17 e 2.18

$$U = Q * \text{diag}(\exp(i * 2 * \pi * \text{randn}(2N_T, 1))), \text{ ou} \quad (3.20)$$

$$U = Q * \text{diag}(\exp(i * 2 * \pi * \text{randn}(4 * N_T, 1))), \text{ se } \beta = 4. \quad (3.21)$$

Salientamos novamente, que para a simetria quiral as matrizes são dobradas, devido as duas sub-redes existentes em cada guia. O resultado, do histograma que representa a correção para a matriz aleatória simplética, pode ser visto na figura 3.1.

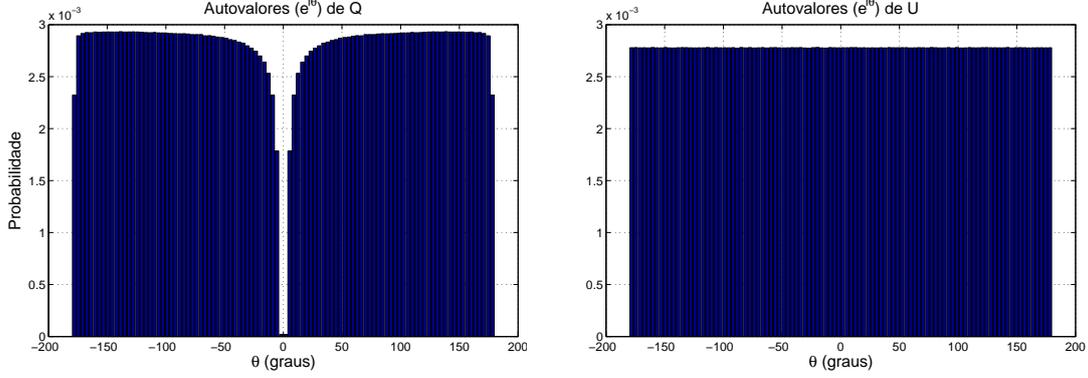


Figura 3.1 Fatoração QR (Gram-Schmidt) da matriz aleatória simplética sem correção de fase, à esquerda, e com fase corrigida, à direita. O histograma, de fases, normalizado foi plotado para uma matriz aleatória de dimensão $N = 100$, por conta da duplicidade do ensemble simplético, e um milhão (10^6) de realizações.

Após todo esse o processo que acabamos de descrever, podemos mais uma vez, obter as matrizes de espalhamento conforme a tabela 2.3

- $\beta = 1 \Rightarrow \mathcal{S}_1 = \Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U$,
- $\beta = 2 \Rightarrow \mathcal{S}_2 = \Sigma_z U^T \Sigma_z U$,
- $\beta = 4 \Rightarrow \mathcal{S}_4 = \Sigma_z U^\dagger \Sigma_z U$,

3.5 Resultados Analíticos

Para encontrar os resultados exatos, foi aplicado o método diagramático de integração sobre o grupo ortogonal. Esse método é uma extensão do método diagramático de integração sobre o grupo unitário [82]. Ele permitiu calcular a média e variância da condutância para o bilhar de Dirac caótico conectado a L terminais. O processo de integração possibilitou a obtenção de novos resultados exatos sobre o grupo quiral ortogonal. Mas, é importante observar sua generalidade, pois, permite estudar todas as classes quirais. Por razões pedagógicas, começamos nossa análise pelas configurações relevantes de dois terminais ($L = 2$). Os detalhes sobre o método diagramático de integração sobre o grupo ortogonal, podem ser encontrado no nosso artigo [4]. Ressaltamos, que os resultados exatos não são prioridades nesta dissertação, contudo, apresentaremos aqui, os resultados que foram encontrados, com o intuito de confirmá-los através dos nossos métodos de simulação numérica.

3.5.1 Média da condutância

Começamos por considerar o coeficiente de transmissão da condutância de Landauer dado pela equação 1.71 e 1.72, como sabemos, t é o bloco de transmissão da matriz de espalhamento e o fator 2 é usado para dar conta da degenerescência de spin. As matrizes de projeção sobre os respectivos terminais, podem ser reescritas da seguinte forma

$$C_1 = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{\bar{N}_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_{\bar{N}_2} \end{bmatrix}. \quad (3.22)$$

Aqui $\mathbb{1}_{\bar{N}_i}$ é uma matriz identidade $\bar{N}_i \times \bar{N}_i$ e $\bar{N}_i = 2N_i$ é o número de canais abertos no i -ésimo terminal. Mais uma vez, as matrizes de projeção asseguram que $C_1 C_2 = 0$ e $C_1 + C_2 = \mathbb{1}_{\bar{N}_T}$.

Foi substituído na equação 1.72 a decomposição da matriz de espalhamento como função da matriz unitária, $\mathcal{S} = \Sigma_z U^T \Sigma_z U$, característica do chECO, como pode ser visto na tabela de Cartan (tabela 2.3), e consequentemente obtido a seguinte expressão

$$\begin{aligned} G &= \frac{2e^2}{h} \text{Tr} (C_1 \Sigma_z U^T \Sigma_z U C_2 U^T \Sigma_z U \Sigma_z), \\ &= \frac{2e^2}{h} \text{Tr} (C_1 U^T \Sigma_z U C_2 U^T \Sigma_z U), \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde a relação $\Sigma_z C_1 \Sigma_z = C_1$ é satisfeita. Conforme já salientamos, a matriz aleatória U é ortogonal, isto é, as entradas da matriz são números reais.

Aplicando a técnica diagramática (comentada acima) na equação 3.23, foi possível calcular a média da condutância, obtendo-se resultados para os três ensembles de simetria quiral. Esses resultados, podem ser apresentados em uma forma compacta através da seguinte equação geral

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \frac{4\beta N_1 N_2 N_T}{(\beta N_T + 1)(2N_T - 1)}. \quad (3.24)$$

A equação 3.24 é o primeiro principal resultado do artigo [4], podendo ser utilizado para estudar alguns limites relevantes, como o regime quântico extremo e o limite semi-clássico. Na próxima seção, veremos a confirmação desta equação através das simulações numéricas, tanto para contatos simétricos ($N_1 = N_2$) quanto para contatos assimétricos ($N_1 \neq N_2$).

- **Regime quântico extremo**

Tomando o regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, a média da condutância na

escala de $4e^2/h$ se apresenta da seguinte maneira

$$\frac{\langle G \rangle}{(4e^2/h)} = \begin{cases} \frac{4}{9}, & \text{para } chECO, \\ \frac{8}{15}, & \text{para } chECU, \\ \frac{16}{27}, & \text{para } chECS, \end{cases} \quad (3.25)$$

como poderá ser visto na figura 3.2(a).

- **Limite semiclássico**

Expandindo a equação 3.24 em potências de N_T obtemos o seguinte resultado

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[2 \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{\beta} + \frac{4}{\beta^2}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^3} + \dots \right]. \quad (3.26)$$

Essa equação pode ser escrita alternativamente como função de $\bar{N}_T = 2N_i$, resultando na seguinte expressão

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[\frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{\bar{N}_1 + \bar{N}_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{(\bar{N}_1 + \bar{N}_2)^2} + \left(1 - \frac{2}{\beta} + \frac{4}{\beta^2}\right) \frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{(\bar{N}_1 + \bar{N}_2)^3} + \dots \right]. \quad (3.27)$$

Identificamos o primeiro termo da equação 3.27 como a lei de Ohm e o segundo termo é conhecido como localização fraca, para $\beta = 1$ e anti-localização fraca, para $\beta = 4$. Podemos notar também, que o segundo termo da expansão é nulo para $\beta = 2$, mas o terceiro não, representando uma contribuição não nula para as correções de interferência. Na configuração simétrica, $\bar{N} = \bar{N}_1 = \bar{N}_2$, os dois primeiros termos da equação 3.27 simplificam-se para

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[\frac{\bar{N}}{2} + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \right]. \quad (3.28)$$

3.5.2 Flutuação universal da condutância

Com a aplicação do método diagramático desenvolvido, também foi encontrado expressões exatas para a variância da condutância nos ensembles quirais. Primeiramente, foi observado a definição da variância da condutância

$$var [G] = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2, \quad (3.29)$$

onde $\langle G \rangle$ foi obtido na equação 3.23 e $\langle G \rangle^2$ é definida como

$$\begin{aligned} \frac{\langle G \rangle^2}{4e^4/h^2} &= \left\langle [Tr (tt^\dagger)]^2 \right\rangle = \left\langle [Tr (C_1 \mathcal{S} C_2 \mathcal{S}^\dagger)]^2 \right\rangle, \\ &= \left\langle [Tr (C_1 \Sigma_z U^T \Sigma_z U C_2 U^T \Sigma_z U \Sigma_z)]^2 \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.30)$$

para o chECO.

Após isso, fez-se uso do método comentado e foi encontrada as expressões a baixo

$$var [G] = \frac{4e^4}{h^2} \begin{cases} \frac{16N_1N_2N_T(3 + 2N_T^3 + 4N_1N_2N_T^2 - 4N_T - 4N_1N_2 - 5N_1^2 - 5N_2^2)}{(2N_T - 3)(2N_T - 1)^2(N_T + 3)(N_T + 1)^2(2N_T + 1)} & (\beta = 1) \\ \frac{8N_1N_2(3 + 16N_1N_2N_T^2 - 6N_T^2 - 6N_1^2 - 6N_2^2)}{(2N_T - 3)(2N_T + 3)(2N_T + 1)^2(2N_T - 1)^2} & (\beta = 2) \\ \frac{32N_1N_2N_T(3 - 16N_1N_2 + 8N_T - 20N_1^2 - 20N_2^2 - 16N_T^3 + 64N_1N_2N_T^2)}{(4N_T + 3)(4N_T + 1)^2(2N_T - 3)(2N_T - 1)^2(4N_T - 1)} & (\beta = 4) \end{cases} \quad (3.31)$$

A equação 3.31 é o segundo principal resultado do artigo [4], também podendo ser usada para o estudo no regime quântico extremo e no limite semiclássico. Enfatizamos novamente, a necessidade da simulação numérica para confrontar esses novos resultados. Veremos, na próxima seção, que os nossos métodos numéricos garantem a validade das expressões 3.31 em qualquer condição, seja contatos simétricos ou contatos assimétricos.

• Regime quântico extremo

Tomando $N_1 = N_2 = 1$, a variância da condutância, em unidades de $8e^4/h^2$, revela os seguintes valores

$$\frac{var [G]}{(8e^4 f/h^2)} = \begin{cases} \frac{228}{2025}, & \text{para } chECO, \\ \frac{124}{1575}, & \text{para } chECU, \\ \frac{416}{8019}, & \text{para } chECS, \end{cases} \quad (3.32)$$

como poderá ser visto na figura 3.2(b).

• Limite semiclássico

Para o estudo do limite semiclássico, foi expandida a equação 3.31 em termos de N_T e obtido a expressão que segue

$$\begin{aligned} var [G] &= \frac{4e^4}{h^2} \left[\frac{4}{\beta} \frac{N_1^2 N_2^2}{(N_1 + N_2)^4} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N_T} \right) \right], \\ &= \frac{4e^4}{h^2} \left[\frac{4}{\beta} \frac{\bar{N}_1^2 \bar{N}_2^2}{(\bar{N}_1 + \bar{N}_2)^4} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{\bar{N}_T} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

3.6 Resultados Numéricos

Utilizamos nossos dois modelos de simulação numérica, modelo Hamiltoniano (MH) e fatoração de Gram-Schmidt (QR), a fim de confirmar os resultados analíticos encontrados através da método diagramático (MD), equações 3.24 e 3.31, para cada uma das três classes dos ensembles quirais. As duas simulações, produzem a figura 3.2, que mostra tanto a média quanto a variância da condutância, obtidos através de 10^6 realizações. Nós usamos a matriz \mathcal{T} com dimensão 100×100 ($M = 100$), e as correspondentes matrizes \mathcal{H} com dimensão 200×200 (200 ressonâncias). As figuras 3.2(a) e 3.2(b) são plotadas para contatos simétricos $N = N_1 = N_2$, enquanto as figuras 3.2(c) e 3.2(d) mostram o comportamento para contatos assimétricos, com $N_1 = 2$. A média e a variância da condutância são plotadas em unidades de $4e^2/h$ e $8e^4/h^2$, respectivamente.

Como podemos observar na figura 3.2, as linhas sólidas são os resultados exatos das equações 3.24 e 3.31. Esses resultados estão em comum acordo com as linhas pontilhadas,

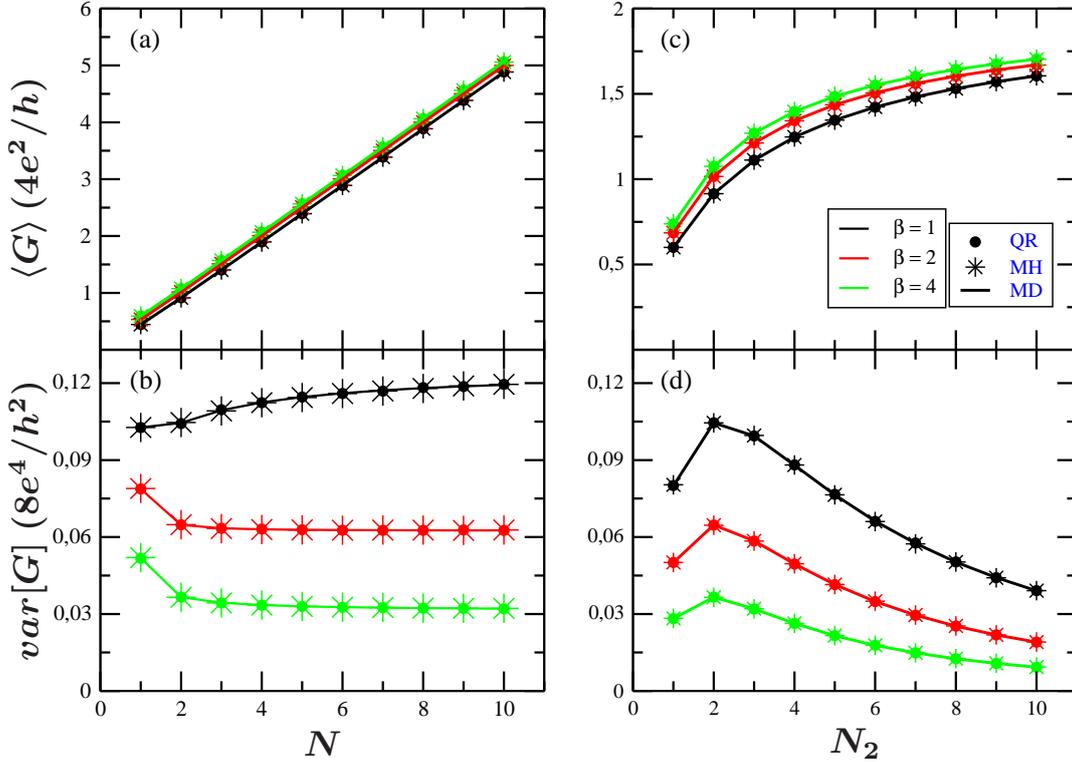


Figura 3.2 A média (acima) e a variância (abaixo) da condutância são plotados em unidades de $4e^2/h$ e $8e^4/h^2$, respectivamente. (a-b) contatos simétricos $N = N_1 = N_2$ e (c-d) contatos assimétricos com $N_1 = 2$. As linhas pontilhadas são obtidas pelas simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e pelo Modelo Hamiltoniano (MH). As linhas sólidas são os resultados exatos 3.24 e 3.31.

que foram obtidas pelas simulações numéricas, QR (\bullet) e MH ($*$), que desenvolvemos. Sendo assim, os nossos métodos de simulação numérica garantiram que os novos resultados exatos realmente descrevem o bilhar de Dirac caótico aberto.

Analisando os gráficos da figura 3.2(a) e (b) (contatos simétricos), notamos que as médias das condutâncias crescem, praticamente, de forma linear com o número de canais abertos, enquanto suas respectivas variâncias tendem para valores constantes. Comportamento bastante diferente do que ocorre para contatos assimétricos.

Os resultados analíticos recuperados (resultados de Wigner-Dyson) e os novos resultados para o bilhar de Dirac caótico que encontramos pela aplicação dos nossos métodos numéricos, já deixaram bastante evidente a eficácia de nossas simulações. Esses resultados, nos deram uma segurança maior para aplicação em outras situações, como, para a construção dos histogramas normalizados das distribuições da condutância, $P(G)$, de todos os casos, $\beta = 1, 2, 4$, do bilhar de Dirac caótico. Como já comentamos para o bilhar quântico, é grande a dificuldade de se obter resultados exatos para as distribuições também para o bilhar de Dirac, por isso, na construção dos gráficos das distribuições faremos uso apenas das simulações numéricas.

Observaremos na figura das distribuições da condutância uma impressionante convergência entre os dois modelos numéricos. No entanto, é importante salientar, que essa convergência só ocorre para um número de realizações bastante alto. Mais uma vez construímos um ensemble com 10^6 matrizes de espalhamento, sendo assim, temos um número suficiente de dados para uma análise estatística. Como ilustração, mostramos na figura 3.3, um ensemble com 3×10^4 realizações, cada realização nos fornece apenas uma matriz

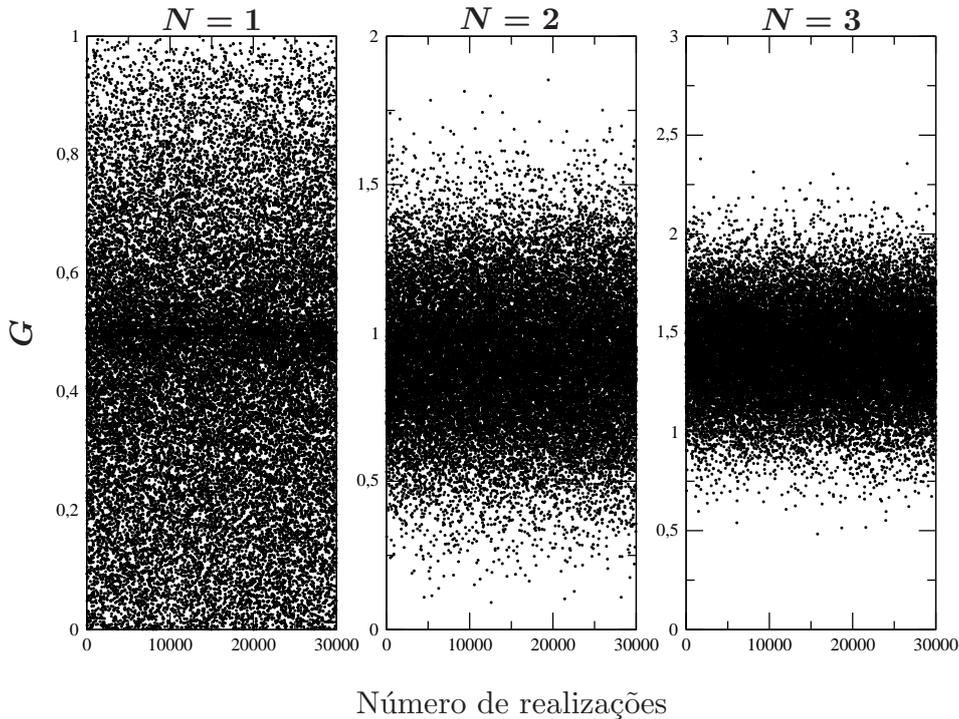


Figura 3.3 O ensemble de 3×10^4 elementos de G para o caso ortogonal ($\beta = 1$). Da esquerda para a direita temos os números de canais $N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 respectivamente. A figura diz respeito à um único método numérico.

de espalhamento e conseqüentemente um valor para a condutância (G), que calculamos de acordo com a equação 1.72. O ensemble de G mostrado na figura 3.3 diz respeito apenas ao caso ortogonal ($\beta = 1$) e um único método numérico. Da esquerda para a direita temos os números de canais $N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 respectivamente. Como já era de se esperar, a região com maior aglomerado de valores, diz respeito ao valor médio da condutância em cada caso.

A partir de uma construção como a da figura 3.3 podemos construir os histogramas das distribuições. Na figura 3.4 mostramos nossos resultados para os dois métodos numéricos aplicados aos três casos chEO, chEU e chES, de cima para baixo $\beta = 1, 2$ e 4 respectivamente, e da esquerda para a direita $N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 respectivamente. Os pontos (\bullet) dizem respeito a simulação QR e as barras (ou linhas) foram obtidas pela simulação MH. O número de realizações e a dimensão das matrizes são os mesmos que foram apresentados para as médias.

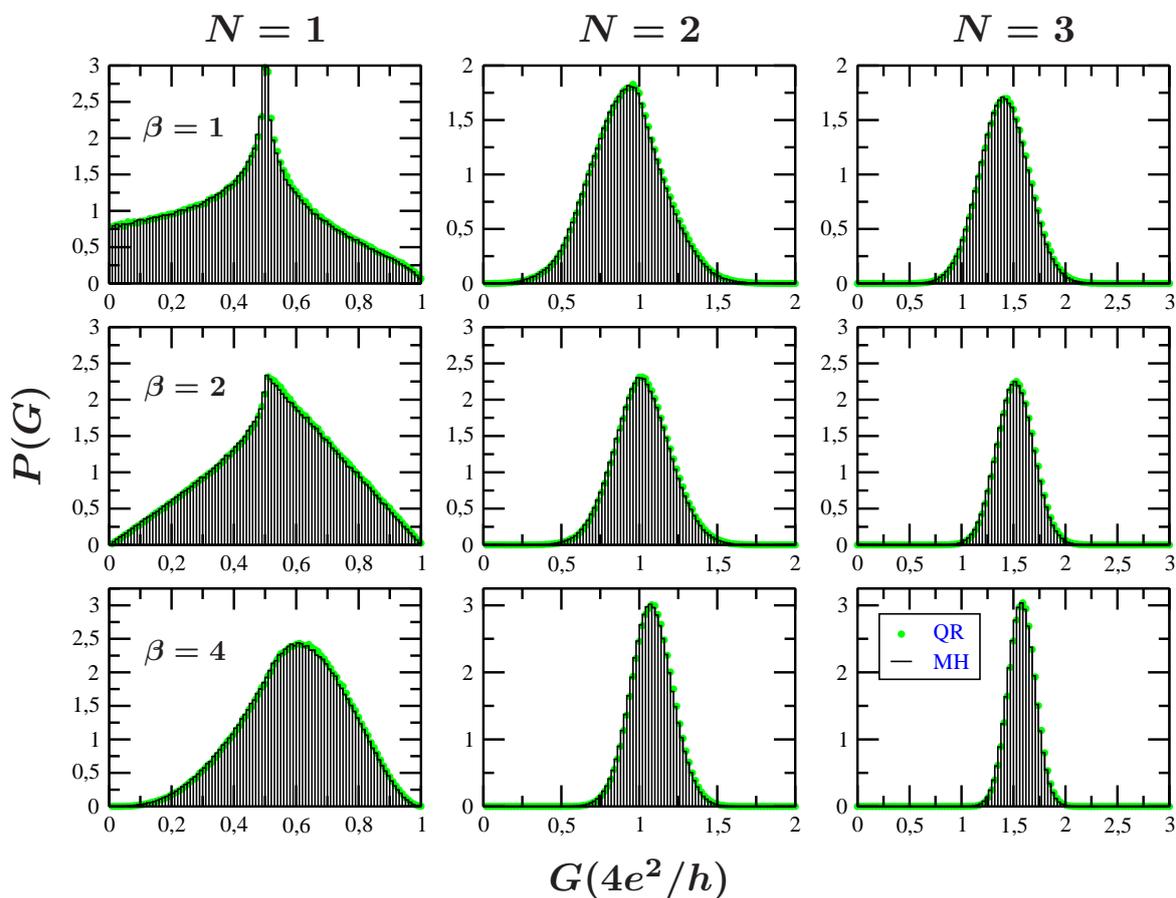


Figura 3.4 Distribuição da condutância $P(G)$ para o bilhar de Dirac dos ensembles quirais em unidades de $4e^2/h$. Os pontos e as barras representam respectivamente as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e o Modelo Hamiltoniano (MH) com 10^6 realizações da matriz \mathcal{S} . As colunas, da esquerda para direita, correspondem a $N = N_1 = N_2 = 1, 2$ e 3 , enquanto as linhas, de cima para baixo, correspondem a $\beta = 1, 2$ e 4 .

Analisando os gráficos da figura 3.4, notamos que a distribuição da condutância para o bilhar de Dirac tende para uma gaussiana mais rapidamente do que o observado para o bilhar quântico, figura 2.5. Percebemos também, que a nossa maneira de abordar o problema faz com que o caso $N = 1$ tenha um comportamento correspondente ao caso $N = 2$ estudado no artigo [102].

Em resumo, concluímos que os nossos métodos de simulação numérica podem muito bem ser aplicados a uma gama de problemas inerentes à estruturas mesoscópicas, haja vista que pôde representar, de forma bastante eficaz, o bilhar quântico e o bilhar de Dirac caótico.

3.7 Comparação com o Caso Wigner-Dyson

Nas últimas seções mostramos algumas expressões e resultados para as médias e variâncias da condutância, assim como para a distribuição da condutância, encontrados para o bilhar de Dirac conectado a dois terminais. Faremos aqui, algumas comparações com as expressões e resultados apresentados no capítulo 2 para o bilhar quântico.

Primeiramente, começamos por observar os resultados para a média da condutância, equações 3.24 e 2.19, no limite quântico extremo $N_1 = N_2 = 1$, com respeito a esse limite, resumimos os resultados, 3.25 do caso quiral e 2.20 do caso Wigner-Dyson, na tabela 3.1.

Tabela 3.1 Resumo dos resultados para as médias e variâncias da condutância nos casos Quiral e Wigner-Dyson, ambos, considerados no limite quântico extremo.

	β	Quiral	Wigner-Dyson
Média	1	4/9	1/3
	2	8/15	1/2
	4	16/27	2/3
Variância	1	228/2025	4/5
	2	124/1575	1/12
	4	416/8019	1/18

Percebemos que no regime quântico extremo os resultados são notavelmente distintos.

Comparando as equações, 3.27 e 2.21, da média da condutância obtidas no limite semiclássico para o bilhar de Dirac e para o bilhar quântico, percebemos que os dois primeiros termos da expansão são equivalentes,

$$\left[\frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{\bar{N}_1 + \bar{N}_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{(\bar{N}_1 + \bar{N}_2)^2} \right] \text{ e } \left[\frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{(N_1 + N_2)^2} \right], \quad (3.34)$$

pois correspondem, respectivamente, à lei de Ohm e a correção de localização, ou anti-localização fraca, resultados que já eram esperados, haja visto todo o histórico de resultados teóricos e experimentais obtidos nesse limite. No entanto, os resultados são completamente diferentes após o segundo termo, essencialmente devido a validade da SSR no bilhar de Dirac. Concluímos que no limite semiclássico, $N_1, N_2 \gg 1$, a SSR afeta apenas os outros termos de interferência.

Também no limite semiclássico, encontramos outra relação de extrema importância para a nossa pesquisa. Observando as equações da variância da condutância, equação 3.31, para os ensembles quirais e considerando contatos simétricos, $N_1 = N_2$, obtivemos

$$\frac{\text{var}[G]}{(4e^4/h^2)} = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{para } chECO, \\ \frac{1}{8}, & \text{para } chECU, \\ \frac{1}{16}, & \text{para } chECS, \end{cases} \quad (3.35)$$

que são, respectivamente, 4, 2 e 1 vezes $\frac{1}{16}$ do resultado previamente obtido, veja 2.27, para o ECU. Resumimos da seguinte maneira

$$\frac{\text{var}[G]}{(4e^4/h^2)} = \begin{cases} 4 \times \text{var}[G]_{wd}^{\beta=2}, & \text{para } chECO, \\ 2 \times \text{var}[G]_{wd}^{\beta=2}, & \text{para } chECU, \\ 1 \times \text{var}[G]_{wd}^{\beta=2}, & \text{para } chECS, \end{cases} \quad (3.36)$$

Foi possível encontrar outras peculiaridades, entre ambos os ensembles, quando comparamos os resultados exatos da variância $\text{var}[G]$ (em unidades de $8e^4/h^2$) do Bilhar de Dirac caótico para os ensembles quirais (Eq. 3.31), com a variância $\text{var}[G]_{wd}$ (em unidades de $4e^4/h^2$) do “bilhar de Schrödinger” caótico (ou ensembles de Wigner-Dyson) (Eq. 2.24), para contatos simétricos $N = N_1 = N_2$. Mais uma vez, recorreremos às nossas duas simulações numéricas, QR e MH, para juntamente com os resultados exatos confrontar os dois sistemas. Plotamos na figura 3.5 a comparação descrita.

Analisando os gráficos da figura 3.5, notamos que as variâncias apresentam fortes diferenças para $N = 1$ e converge para os mesmos valores quando $N \geq 2$. Esse comportamento nos leva a estabelecer a seguinte aproximação entre os dois “tipos” de variância da condutância no limite semiclássico,

$$\boxed{\text{var}[G]_{\beta} \rightarrow 2 \times \text{var}[G]_{wd,\beta}.} \quad (3.37)$$

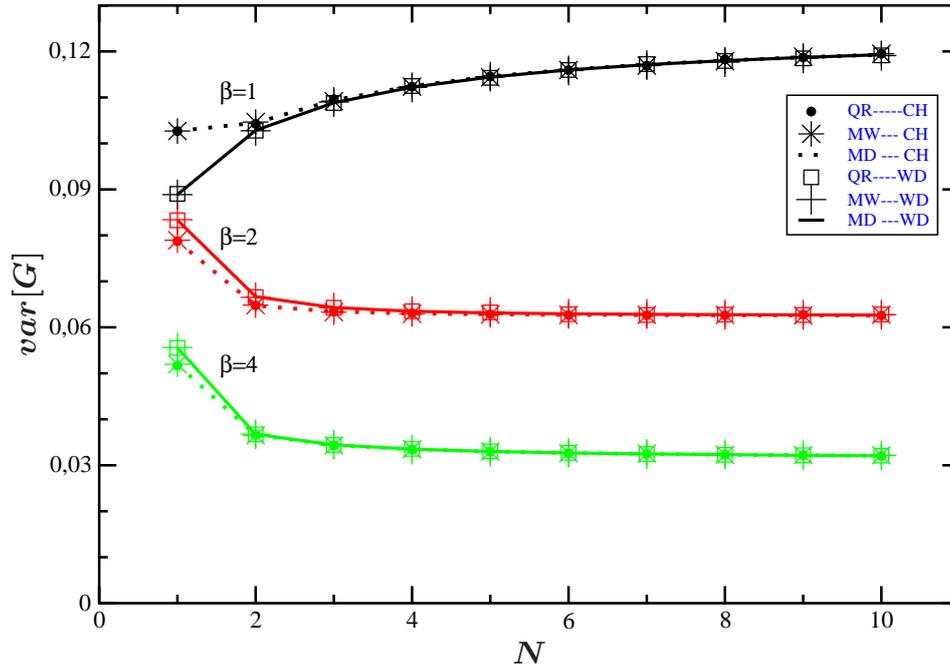


Figura 3.5 A figura indica a comparação entre a variância $var[G]$ (em unidades de $8e^4/h^2$) do bilhar de Dirac dos ensembles quirais (CH) e a variância $var[G]_{wd}$ (em unidades de $4e^4/h^2$) do bilhar caótico de Wigner-Dyson (WD), ambos com terminais simétricos, $N = N_1 = N_2$. As linhas pontilhadas são os gráficos da equação 3.31, método diagramático aplicado aos ensembles quirais (MD-CH) e as linhas sólidas são os gráficos da equação 2.24, método diagramático aplicado a Wigner-Dyson (MD-WD). Os símbolos se referem às simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (QR) e modelo hamiltoniano (MH) para os ensembles quirais (CH) e ensembles Wigner-Dyson (WD).

Para finalizar nossa comparação, enfatizamos, ainda mais, as peculiaridades do regime quântico extremo, $N_1 = N_2$. Nós comparamos numericamente, usando um ensemble de 10^6 realizações da matriz aleatória \mathcal{S} , a distribuição da condutância $P(G)$ do bilhar de Dirac caótico (em unidades de $4e^2/h$) com o “bilhar de Schrödinger” caótico (em unidades de $2e^2/h$) dos ensembles de Wigner-Dyson. A comparação é apresentada na figura 3.6, que nos mostra a formação de um comportamento completamente diferente entre os dois bilhares. Por exemplo, apenas para o bilhar de Dirac (Coluna da direita da figura 3.6), a distribuição da condutância apresenta a formação de uma singularidade para o ensemble unitário e uma forma não uniforme no ensemble ortogonal.

Neste capítulo, verificamos a consistência dos resultados exatos do bilhar de Dirac caótico acoplado a dois terminais. Essa constatação se deu através dos dois métodos de simulação numérica (QR e MH), desenvolvidos por nós, constituindo a primeira parte da nossa pesquisa e base desta dissertação. Percebemos que os nossos resultados para a média e variância da condutância, no limite semiclássico, estão em comum acordo com as referências [23] e [24] que resolveram o problema para $\beta = \{1, 2\}$.

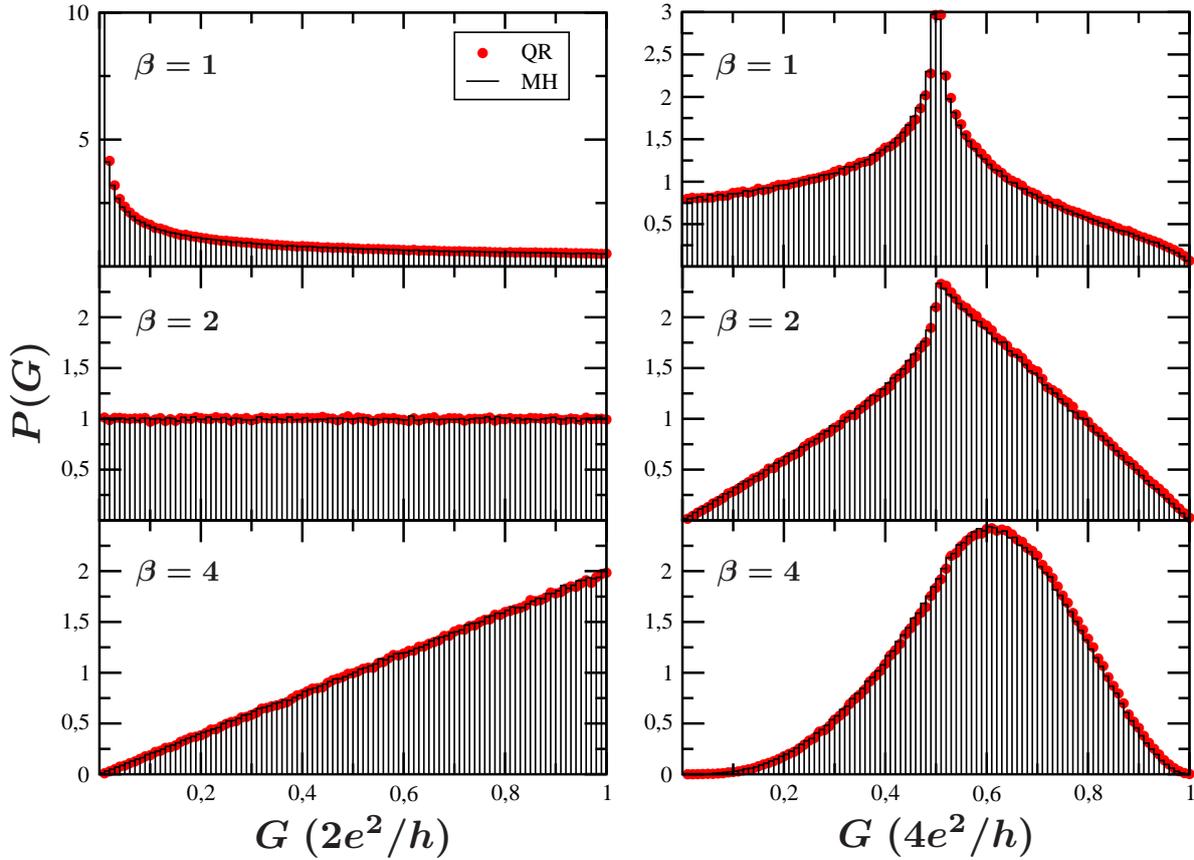


Figura 3.6 A figura mostra a comparação da distribuição da condutância $P(G)$ no regime quântico extremo ($N_1 = N_2 = 1$), entre o bilhar de Dirac caótico dos ensembles quirais (coluna da direita) em unidades de $4e^2/h$, com o bilhar quântico caótico dos ensembles de Wigner-Dyson (coluna da esquerda) em unidades de $2e^2/h$. Todos os gráficos foram feitos com 10^6 realizações da matriz aleatória \mathcal{S} .

Para concluir, investigaremos no próximo capítulo a quebra de coerência de fase no bilhar de Dirac caótico, haja vista que a nossa abordagem numérica se apresenta bastante robusta.

Descoerência no Bilhar de Dirac Caótico

Vimos no capítulo 2, a eficácia dos métodos de simulação numérica ao reproduzir os resultados conhecidos na literatura, como a média, variância e distribuição da condutância do bilhar quântico caótico acoplado a dois terminais. Esses resultados serviram de motivação para que pudéssemos, no capítulo 3, obter de modo similar, a média, variância e distribuição da condutância do bilhar de Dirac caótico, também acoplado a dois terminais. Além disso, a aplicação dos nossos métodos possibilitou a confirmação de novos resultados analíticos, como a peculiar relação entre as variâncias dos ensembles de Wigner-Dyson e os ensembles quirais, no limite semiclássico. Todo essa abordagem inicial acabou por revelar grandes resultados, deixando bastante claro o quão eficaz pode ser o algoritmo numérico desenvolvido. Esse cenário nos deixou bastante confortáveis para dar continuidade ao nosso trabalho em busca de novas abordagens e novos resultados.

Em ambos os casos, bilhar quântico e de Dirac, foi assegurado a existência dos efeitos quânticos de interferência devido a coerência de fase no transporte eletrônico quântico. A partir de agora, estudaremos o desaparecimento desses efeitos como processos de defasagem no transporte através de sistemas balísticos, ou seja, observando a quebra de coerência de fase eletrônica (descoerência).

Ao longo dos anos, vários modelos de descoerência, principalmente os fenomenológicos, foram propostos [81, 110–114]. Nós utilizamos a formulação proposta por Büttiker [79, 81], que, assim como os experimentos indicados nas referências [115, 116], foi bem sucedida na descrição do bilhar quântico caótico. O método foi originalmente usado no quadro da teoria de matrizes aleatórias e mais recentemente na referência [117].

4.1 Formulação do Problema

Para formulação do problema, um terceiro terminal “fictício” é acrescentado ao bilhar de Dirac (nossa cavidade balística caótica) e conectado a um terceiro reservatório com potencial μ_3 , como podemos observar na figura 4.1. Esse terceiro terminal induz a quebra de coerência ou descoerência. Nessa modelagem, o potencial μ_3 é ajustado de tal maneira, que em média não existe corrente através do terceiro terminal, $I_3 = 0$, de modo que, só há corrente eficaz entre os terminais identificados por 1 e 2. Ou seja, o guia adicional induz defasagem sem perda de partículas. Outra condição de consistência é a conservação de corrente eletrônica, $I = I_1 = -I_2$. Os elétrons que deixam o sistema pelo terceiro guia são, portanto, reinjetados em algum momento posterior com fase aleatorizada [117].

Escrevendo I_1, I_2 e I_3 a partir da equação 1.68 e aplicando as condições iniciais,

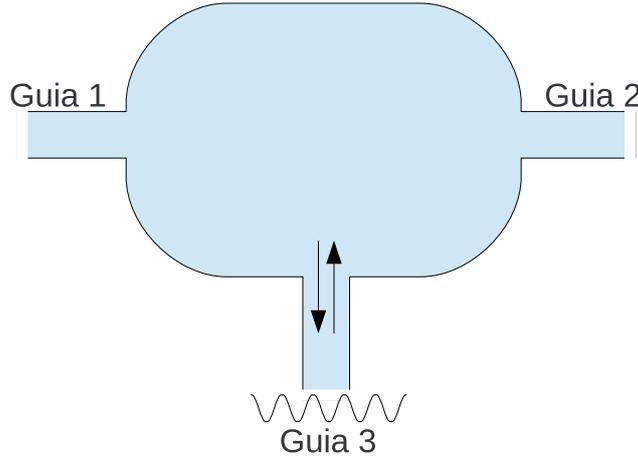


Figura 4.1 Modelo esquemático da descoerência por inclusão de um terceiro guia. O sistema é um bilhar de Dirac caótico aberto com um guia adicional, cuja tensão é escolhida para fazer o fluxo de corrente, em média, igual a zero. O guia adicional, portanto, induz defasagem sem perda de partículas.

$I = I_1 = -I_2$ e $I_3 = 0$, teremos

$$I = \frac{2e^2}{h(V_1 - V_2)} [T_{12}(V_1 - V_2) + T_{13}(V_1 - V_3)], \quad (4.1)$$

e

$$I_3 = 0 = T_{31}(V_3 - V_1) + T_{32}(V_3 - V_2), \quad (4.2)$$

de onde podemos obter

$$V_3 = \frac{T_{31}V_1 + T_{32}V_2}{T_{31} + T_{32}}. \quad (4.3)$$

Substituindo 4.1 na equação da condutância, teremos

$$G = \frac{I}{V_1 - V_2} = \frac{2e^2}{h(V_1 - V_2)} [T_{12}(V_1 - V_2) + T_{13}(V_1 - V_3)], \quad (4.4)$$

e conseqüentemente substituindo 4.3, encontraremos a condutância para o nosso caso em questão

$$G = \frac{2e^2}{h} \left(T_{12} + \frac{T_{13}T_{32}}{T_{31} + T_{32}} \right). \quad (4.5)$$

Onde, $T_{ij} = \text{Tr}(t_{ij}t_{ij}^\dagger)$, são os coeficientes de transmissão e podem ser escritos como função da matriz de espalhamento

$$T_{ij} = \text{Tr} (C_i S C_j S^\dagger), \quad (4.6)$$

com $i, j = 1, 2, 3$. A matriz S tem portanto, dimensão $\bar{N}_T \times \bar{N}_T$, onde $\bar{N}_T = \bar{N}_1 + \bar{N}_2 + \bar{N}_3$ e $\bar{N}_3 = \bar{N}_\phi = 2N_\phi$ é o número de canais abertos no terceiro terminal. O regime semiclássico

pode ser alcançado através da expansão da equação 4.5 em potências de \bar{N}_T , e tomando sua média é possível obter [115]

$$\frac{\langle G \rangle}{2e^2/h} = \langle T_{12} \rangle + \frac{\langle T_{13} \rangle \langle T_{32} \rangle}{\langle T_{31} \rangle + \langle T_{32} \rangle} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_T^2}\right). \quad (4.7)$$

A média dos coeficientes de transmissão, $\langle T_{ij} \rangle$, foi obtida através da método diagramática para integração sobre o grupo ortogonal. De modo que, a equação 4.7 pode ser escrita da seguinte forma

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[2 \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} \frac{1}{N_1 + N_2 + N_\phi} \right]. \quad (4.8)$$

Assim como foi dito nos dois últimos capítulos, também lembramos aqui, que os resultados analíticos apresentados não são frutos do nosso trabalho de pesquisa, para o bilhar de Dirac, foram encontrados por Marília Santos. No entanto, foram confirmados por nossas modelagens numéricas [4].

É possível tornar a equação 4.8 um pouco mais abrangente (em termos teóricos), para isso, devemos acrescentar o tempo de permanência dos elétrons dentro da cavidade e o tempo de defasagem eletrônica [117]. Introduzimos então a seguinte relação

$$\bar{N}_\phi / (\bar{N}_1 + \bar{N}_2) = \tau_D / \tau_\phi, \quad (4.9)$$

onde

$$\tau_D = 2\pi mA / h(\bar{N}_1 + \bar{N}_2) \quad (4.10)$$

é o tempo de permanência através do bilhar de Dirac caótico e

$$\tau_\phi = 2\pi mA / h\bar{N}_\phi \quad (4.11)$$

é o tempo de defasagem do transporte eletrônico. Além disso, m e A são respectivamente a massa eletrônica e a área litográfica do bilhar de Dirac. Nós podemos reescrever a equação 4.8 como função do tempo de defasagem e do número de canais abertos no i -ésimo terminal, $\bar{N}_i = 2N_i$ como segue

$$\langle G \rangle = \frac{2e^2}{h} \left[\frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{\bar{N}_1 + \bar{N}_2} + \left(1 - \frac{2}{\beta}\right) \frac{\bar{N}_1 \bar{N}_2}{(\bar{N}_1 + \bar{N}_2)^2} \frac{1}{1 + \frac{\tau_D}{\tau_\phi}} \right]. \quad (4.12)$$

4.1.1 Correção de Localização e Anti-localização Fraca

Utilizando a equação 4.12, podemos obter dois limites para testar sua consistência. O primeiro deles é para $\tau_\phi \gg \tau_D$, para o qual recuperamos a equação 3.27. O segundo

é para $\tau_D \gg \tau_\phi$, para o qual, as correções de localização e anti-localização fraca são suprimidas e apenas o termo da lei de Ohm sobrevive.

Como vimos, a equação 4.8 surge de uma expansão semiclássica, de modo que não aparecem os outros termos de interferência, devido a expansão, portanto, as afirmações a respeito dos termos de correções precisam ser testadas. Simulamos numericamente os efeitos da descoerência nos termos de correção de localização e anti-localização fraca como função do número de canais abertos no terceiro guia. Ajustamos os nossos algoritmos para inclusão do terceiro terminal utilizando as equações 4.5 e 4.6, e para as correções de localização e anti-localização fraca usamos a definição

$$\delta G \equiv \langle G \rangle^{(\beta)} - \langle G \rangle^{(\beta=2)}. \quad (4.13)$$

Assim, como esperado, temos que $\delta G = 0$ para $\beta = 2$. Plotamos, entretanto, a correção de localização fraca, $\beta = 1$, e a correção de anti-localização, $\beta = 4$, como função do número de canais de quebra de fase, N_ϕ , em unidades de $4e^2/h$. Em nossa simulação, consideramos o caso do regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$. Nós observamos na correção de localização fraca, figura 4.2(a), uma peculiar transição decrescente e monotonicamente

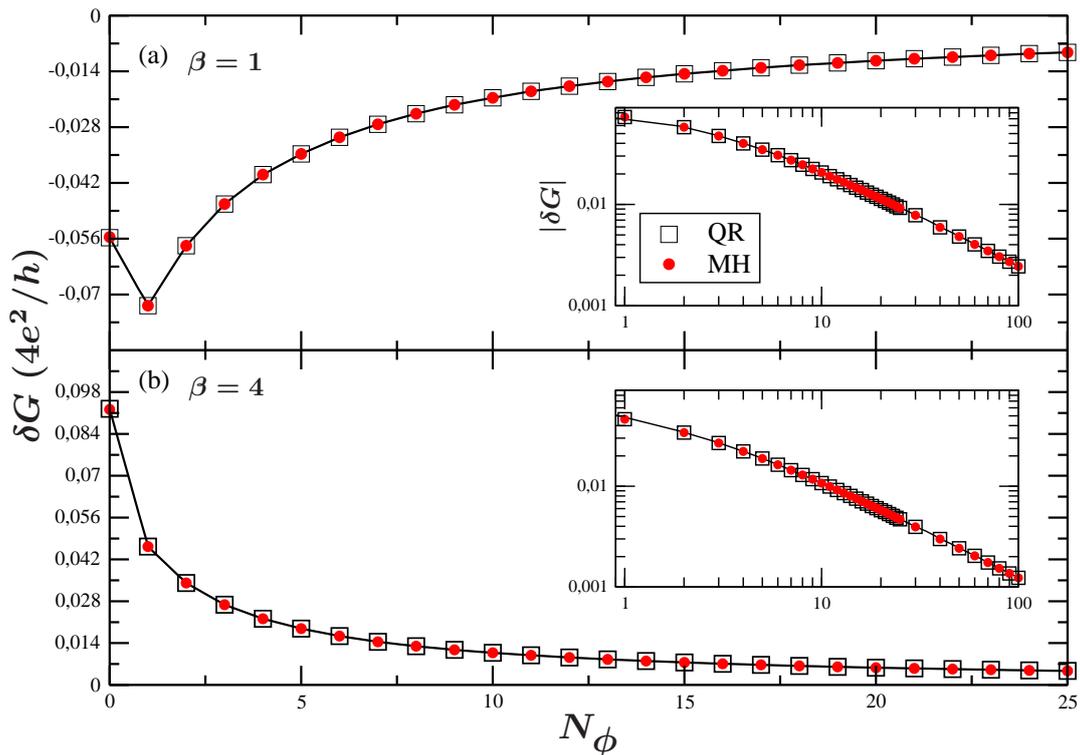


Figura 4.2 Correção de (a) Localização fraca e (b) anti-localização como função do número de canais de quebra de fase, N_ϕ , para o regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, na escala linear e log-log (painel menor). Os símbolos representam as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (\square QR) e o Modelo Hamiltoniano (\bullet MH) para um ensemble quiral com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação.

crescente em $N_\phi = 1$ (regime quântico extremo), e para a correção de anti-localização fraca, figura 4.2(b), podemos ver um comportamento monotonicamente decrescente.

As simulações numéricas das figuras 4.2(a) e 4.2(b), também são válidas para o regime semiclássico, é neste contexto que os nossos métodos confirmam os resultados analíticos da equação 4.12, pois, como podemos observar, ambas as correções tendem para zero à medida que $N_\phi \gg 1$, similarmente ao que havíamos observado na equação 4.12 quando $\tau_D \gg \tau_\phi$. Entretanto, essa convergência se dá de forma bastante lenta, informação que pode ser observada na mesma figura, onde plotamos dentro do painel maior um painel menor em escala log-log, nele, podemos ver, que mesmo quando $N_\phi = 100$ δG ainda não está completamente anulado, reforçando ainda mais o resultado da expansão.

Plotamos esses efeitos do transporte quântico como função de N_ϕ , utilizando nossas duas simulações numéricas que representamos pelos símbolos \square QR (fatoração de Gram-Schmidt) e \bullet MH (Modelo Hamiltoniano). Para ambas, construímos um ensemble quiral com 10^6 realizações da matriz \mathcal{S} aleatória. As linhas sólidas, que também podem ser vistas na figura 4.2, são fórmulas de interpolação obtidas através do software *Xmgrace*.

4.2 Flutuação Universal da Condutância

A flutuação universal da condutância para a equação 4.5 pode ser escrita como na referência [117]. Esta expressão foi também desenvolvida no limite semiclássico

$$\begin{aligned} \frac{\text{var}[G]}{4e^4/h^2} &= \text{var}[T_{12}] + \frac{\langle T_{32} \rangle^4 \text{var}[T_{31}] + \langle T_{31} \rangle^4 \text{var}[T_{32}]}{(\langle T_{32} \rangle + \langle T_{31} \rangle)^4} + 2 \frac{\langle T_{32} \rangle^2 \langle T_{31} \rangle^2 \text{covar}[T_{31}, T_{32}]}{(\langle T_{32} \rangle + \langle T_{31} \rangle)^4} \\ &+ 2 \frac{\langle T_{31} \rangle^2 \text{covar}[T_{21}, T_{23}]}{(\langle T_{32} \rangle + \langle T_{31} \rangle)^2} + 2 \frac{\langle T_{32} \rangle^2 \text{covar}[T_{21}, T_{31}]}{(\langle T_{32} \rangle + \langle T_{31} \rangle)^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_T^2}\right). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Mais uma vez, usando os diagramas obtidos pelo método diagramático, é obtido no limite $N_\phi \gg 1$ ($\tau_\phi/\tau_D \ll 1$) o seguinte resultado

$$\boxed{\frac{\text{var}[G]}{4e^4/h^2} = \frac{4}{\beta} \frac{N_1^2 N_2^2}{(N_1 + N_2)^4} \left(\frac{\tau_\phi}{\tau_D}\right)^2 + \frac{2}{\beta} \left(\frac{2}{\beta} - 1\right) \frac{N_1 N_2 (N_1^2 - N_1 N_2 + N_2^2)}{(N_1 + N_2)^5} \left(\frac{\tau_\phi}{\tau_D}\right)^2.} \quad (4.15)$$

Analisando a equação 4.15, percebemos mais uma vez, que no limite $\tau_D \gg \tau_\phi$, ou seja, $N_\phi \gg 1$, a variância tende a ser suprimida. Percebemos nos gráficos gerados pela nossas simulações numéricas para todos os ensembles, figura 4.3, a validade dessa condição. Vemos que a variância decresce muito rapidamente no início, e vai a zero lentamente como mostrado nos gráficos que se encontram plotados no painel menor, em escala log-log.

Entendemos que a magnitude das correções quânticas diminuem à medida que a quebra de fase aumenta. Isso diminui a $\text{var}[G]$ com N_ϕ , refletindo o fato de que cada elemento da matriz \mathcal{S} flutua menos com o aumento de N_T .

Na medida que nossos algoritmos numéricos deram suporte aos novos resultados analíticos encontrados, no limite assintótico, foi possível a observação de outros comportamentos. O primeiro deles se deu, quando foi considerado terminais simétricos ($N = N_1 = N_2$) na equação 4.15. Nessa abordagem, foram obtidas as seguintes relações para a variância da condutância no regime quântico extremo ($N = 1$), para as três classes de simetria quiral designadas por $\beta = 1, 2, 4$

$$\frac{\text{var}[G]}{(4e^4/h^2)} = \begin{cases} \frac{5}{16} \left(\frac{\tau_\phi}{\tau_D} \right)^2 = \frac{5}{4} \frac{1}{N_\phi^2}, & \text{para } chECO(\beta = 1), \\ \frac{1}{8} \left(\frac{\tau_\phi}{\tau_D} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{1}{N_\phi^2}, & \text{para } chECU(\beta = 2), \\ \frac{7}{128} \left(\frac{\tau_\phi}{\tau_D} \right)^2 = \frac{7}{32} \frac{1}{N_\phi^2}, & \text{para } chECS(\beta = 4). \end{cases} \quad (4.16)$$

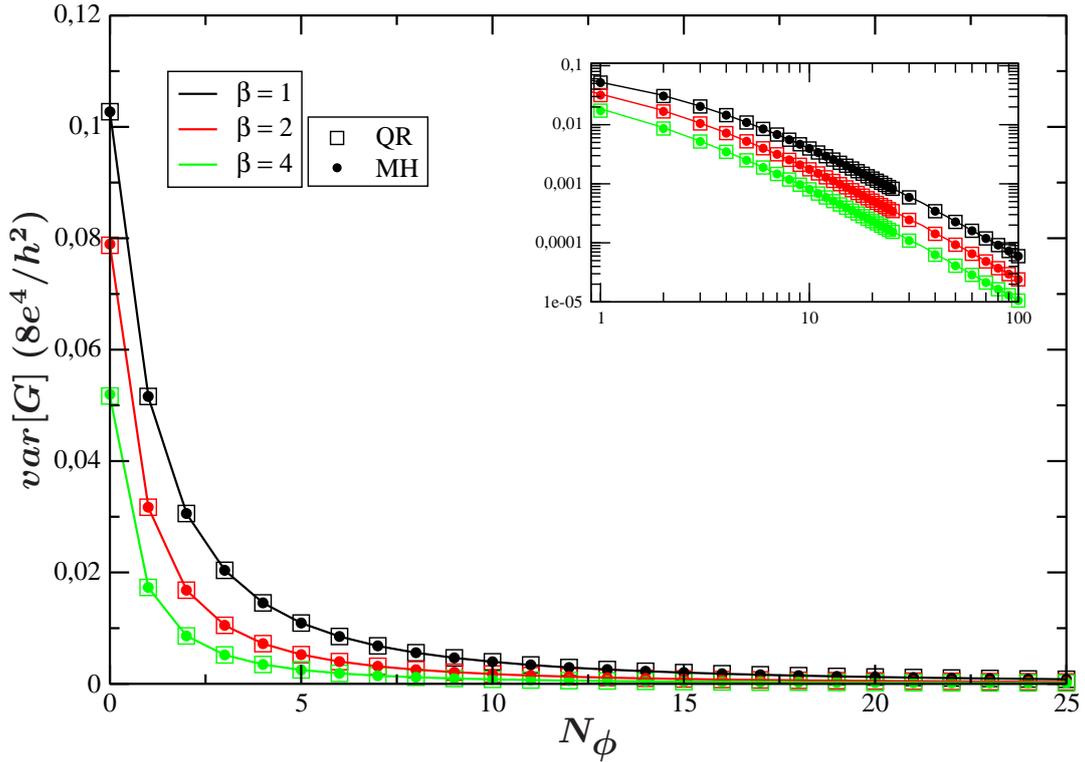


Figura 4.3 Variância da condutância como função de N_ϕ no regime quântico extremo, $N_1 = N_2 = 1$, na escala linear e log-log (painel menor). As curvas, de cima para baixo, especificam o comportamento de $\beta = 1, 2, 4$, respectivamente. Os símbolos representam as simulações numéricas (\square QR) fatoração de Gram-Schmidt e (\bullet MH) o Modelo Hamiltoniano para um ensemble quiral com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação.

Os resultados da equação 4.16, são refletidos na figura 4.3. Mais uma vez, plotamos o comportamento da variância como função do número de canais de quebra de fase, N_ϕ , utilizando os dois modelos, \square QR e (\bullet) MH). Para $N = 1$, construímos um ensemble com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação.

Outro comportamento, que nos deixou bastante satisfeitos, surgiu quando tomamos a razão entre as variâncias da condutância a partir da equação 4.16. Essa razão nos revelou novos números universais para a descoerência no bilhar de Dirac caótico

$$\frac{\text{var}[G]_\beta}{\text{var}[G]_{\beta=2}} = \begin{cases} \frac{5}{2} & (\beta = 1), \\ \frac{7}{16} & (\beta = 4). \end{cases} \quad (4.17)$$

Nessa altura, os nossos métodos numéricos já haviam se demonstrado bastante competentes. Mesmo assim, plotamos na figura 4.4 a razão de $\beta = \{1, 4\}$ para $\beta = 2$ em função de N_ϕ , e percebemos, claramente, a tendência das simulações para os números universais

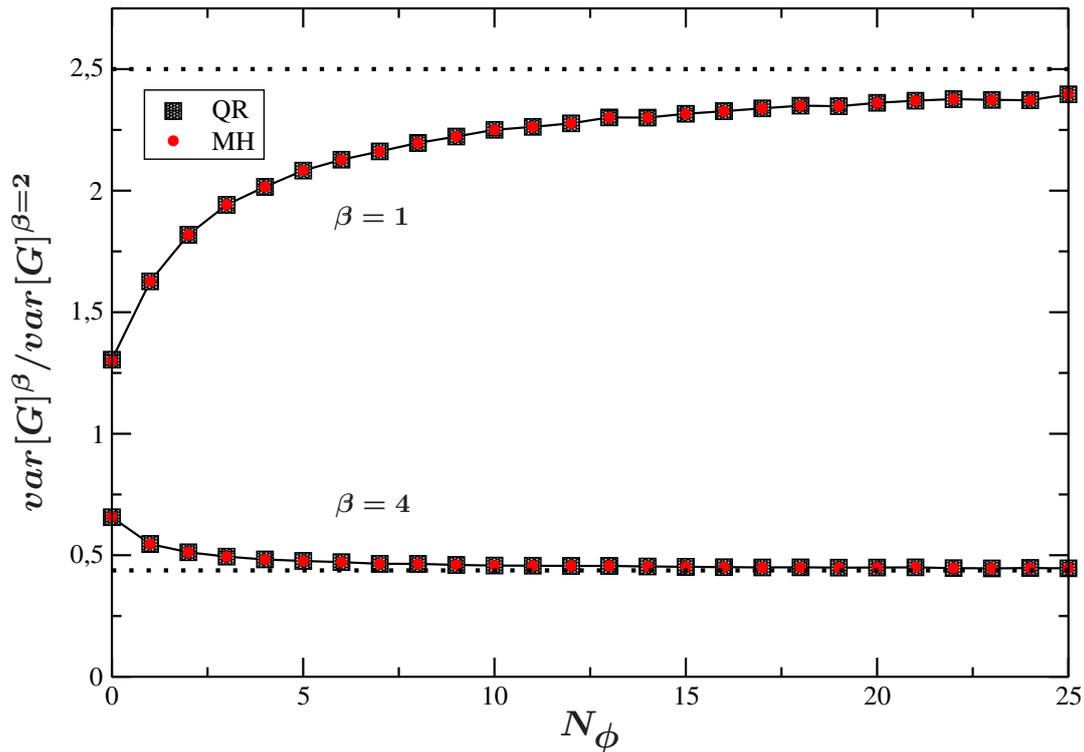


Figura 4.4 A razão entre as variâncias da condutância para $N_\phi \gg 1$ elas tendem para 2,5 devido ao chECO/chECU, e 0,44 devido ao chECS/ECU, como obtido na equação 4.17. Os símbolos representam as simulações numéricas fatoração de Gram-Schmidt (\blacksquare QR) e o Modelo Hamiltoniano (\bullet MH) para um ensemble quiral com 10^6 realizações. As linhas sólidas são fórmulas de interpolação.

(obtidos assintoticamente) no limite $N_\phi \gg 1$, de forma que, para $(\beta = 4)/(\beta = 2)$, a convergência acontece muito mais rapidamente do que a razão $(\beta = 1)/(\beta = 2)$.

Conforme as referências [115, 116], os resultados da descoerência para o bilhar quântico caótico (ensembles de Wigner-Dyson) apresentam uma razão das variâncias da condutância de 3,0 para ECO/EUC, enquanto nós obtivemos 2,5 para chECO/chEUC, além de 0,44 para chECS/chEUC, como mostra a figura 4.4, confirmando os belos resultados da equação 4.17.

Por fim, para a abordagem da descoerência, no bilhar de Dirac caótico, resta apenas a confirmação de que a distribuição da condutância tende ao resultado clássico a medida que aumentam-se o número de canais de quebra de fase, ou seja, tende a uma gaussiana.

4.3 Distribuição da Condutância

Levando em consideração que o comportamento da distribuição da condutância como função da quebra de coerência de fase, do bilhar quântico, já estava bem estabelecido no regime quântico extremo ($N_1 = N_2 = 1$) [115], e que nossos métodos de simulação numérica se estendem do bilhar quântico ao bilhar de Dirac, plotamos no mesmo regime, figura 4.5, as distribuições para ambos os casos (para efeito de comparação), onde na coluna da direita podemos observar os nossos resultados.

Como esperado, a figura 4.5 apresenta a convergência da distribuição da condutância do bilhar de Dirac caótico (coluna da direita) para um comportamento Gaussiano conforme N_ϕ aumenta. Nesse caso, $P(G)$ é descrito através da sua média e variância, equações 4.8 e 4.16.

A distribuição da condutância do bilhar quântico (Schrödinger) caótico [115], foi plotada na coluna da esquerda, da mesma figura 4.5 do bilhar de Dirac caótico (coluna da direita) para uma comparação direta. Podemos então notar que no limite $N_\phi = 0$, $P(G)$ é altamente não Gaussiano para ambos os casos, como podemos observar pelas linhas pretas tracejadas. Por outro lado, no limite $N_\phi = 1$ (curvas em vermelho), $P(G)$ tem comportamento essencialmente Gaussiano, tanto para chEUC quanto para chECS, diferente dos EUC e ECS que continuam não gaussianos. O comportamento gaussiano atinge chECO quando $N_\phi = 2$ (curvas laranja), portanto, em um limite diferente dos outros ensembles quirais.

Na figura 4.5, plotamos a distribuição da condutância, para todos os ensembles de Wigner-Dyson e quiral, como função do número de canais de quebra de fase, utilizando um ensemble de 10^6 realizações da matriz \mathcal{S} . Mostramos em nossa figura os resultados para N_ϕ variando de 0 a 5, enquanto $N_1 = N_2 = 1$. Mais uma vez ressaltamos a necessidade de ambos os métodos de simulação numérica, o QR e + MH, haja vista a não existência de resultados exatos para a descoerência.

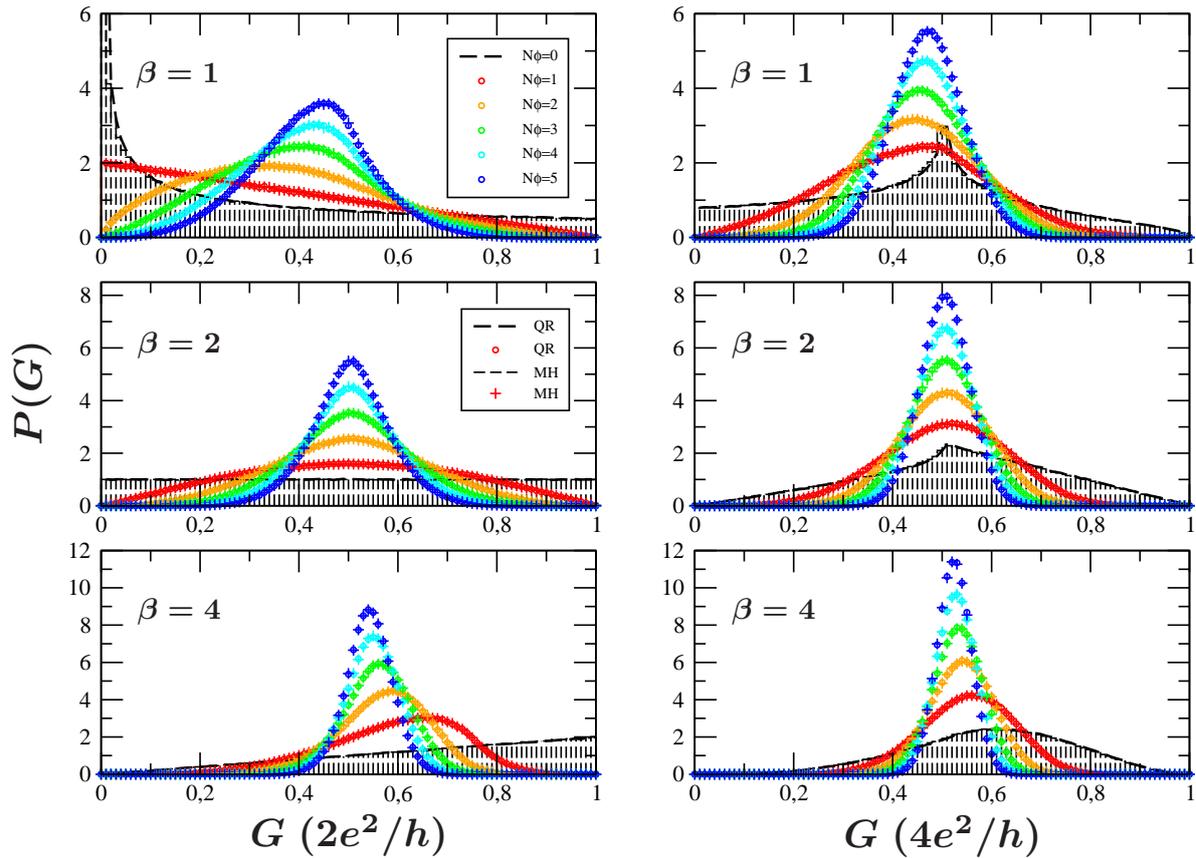


Figura 4.5 Distribuição da condutância para o bilhar de Dirac (coluna da direita) e para o bilhar quântico caótico (coluna da esquerda). A distribuição $P(G)$ tende a gaussiana com N_ϕ aumentando. Mostramos o resultado para N_ϕ variando de 0 a 5. Os símbolos são as simulações numéricas \circ QR (fatoração de Gram-Schmidt) e $+$ MH (Modelo Hamiltoniano) para os ensembles quirais e de Wigner-Dyson, ambos com 10^6 realizações.

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação, apresentamos um estudo numérico de um bilhar de Dirac caótico aberto, na presença de desordem, em duas abordagens distintas. Primeiramente abordamos o bilhar de Dirac caótico conectado a dois reservatórios de elétrons por dois guias de onda ideais. Nessa abordagem prevalece a coerência de fase eletrônica. Posteriormente, mostramos uma das formas de quebra de coerência de fase (descoerência) quando acrescentamos um terceiro guia à cavidade estudada.

Para o nosso trabalho, desenvolvemos dois métodos de simulação numérica, decomposição QR e modelo hamiltoniano, baseados em teoria de matrizes aleatórias. Com eles fomos capazes de obter a condutância, um dos observáveis de transporte eletrônico, através do formalismo de Landauer-Büttiker. Consequentemente, encontramos a distribuição, a média e a variância desse observável em todos os ensembles quirais. Especialmente as médias da condutância e as respectivas variâncias (ou flutuação universal da condutância) deram suporte a resultados exatos, recentemente encontrados pela extensão do método diagramático.

Constatamos que o bilhar de Dirac caótico conectado a dois guias, apresenta média e variância da condutância bastante diferente do “bilhar de Schrödinger”. Esse resultado é bastante significativo no regime quântico extremo, definido no caso de um único canal aberto em cada terminal. Também mostramos outra relação entre esses dois sistemas. Percebemos que no limite de um grande número de canais abertos (ou limite semiclássico) a variância da condutância dos ensembles quirais converge para o dobro da variância da condutância dos ensembles de Wigner-Dyson.

Outro resultado, também apresentado aqui, diz respeito à descoerência no bilhar de Dirac caótico. Mais uma vez, paralelamente aos resultados analíticos, obtidos através do método diagramático de integração sobre o grupo ortogonal, nossas simulações numéricas revelaram novos números universais da pertinente relação entre as variâncias da condutância, em diferentes classes de simetria, no limite semiclássico.

Nossos métodos nos permitirão, em investigações futuras, estudar através do terceiro terminal os efeitos de partículas interagentes e o bloqueio Coulombiano. Além disso, futuras investigações poderão incluir o efeito dos mecanismos de defasagem sobre a potência do ruído de disparo, o que pode gerar impressões digitais adicionais ao bilhar Dirac caótico. Outra investigação interessante inclui os *crossovers* magnéticos e spin-órbita entre as classes de simetria quiral. Por fim, acreditamos que nossos resultados serão úteis para controlar experimentalmente novos graus de liberdade em pontos quânticos mesoscópicos como o grafeno e isolantes topológicos.

Distribuição Gaussiana de Matrizes Aleatórias

Primeiramente lembramos que a expressão geral para uma distribuição gaussiana é dada pela seguinte expressão

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(x - \bar{x})^2}{2\sigma^2} \right], \quad (\text{A.1})$$

onde $\bar{x} = \langle x \rangle$ e $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ representam respectivamente a média e a variância dos elementos de X . Por sua vez, a distribuição de probabilidade para o hamiltoniano \mathcal{H} , uma matriz $M \times M$ pertencente ao ensemble gaussiano de matrizes aleatórias, pode ser escrito da seguinte forma

$$P(\mathcal{H}) \propto \exp \left(-\frac{\beta M}{4\lambda^2} \text{Tr} \mathcal{H} \mathcal{H}^\dagger \right), \quad (\text{A.2})$$

a qual reescrevemos da seguinte maneira

$$P(\mathcal{H}) \propto \exp \left(-a \text{Tr} \mathcal{H}^2 \right), \quad (\text{A.3})$$

de modo que pela condição de hermiticidade $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$, temos então

$$\begin{aligned} \text{Tr} \mathcal{H}^2 &= \text{Tr} |\mathcal{H}|^2 \\ &= \sum_{\mu\nu} |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 \\ &= \sum_{\mu} |\mathcal{H}_{\mu\mu}|^2 + \sum_{\mu \neq \nu} |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 \\ &= \sum_{\mu} |\mathcal{H}_{\mu\mu}|^2 + 2 \sum_{\mu < \nu} |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

ou seja, as entradas do hamiltoniano são estatisticamente independentes.

Podemos então escrever a distribuição dos elementos de \mathcal{H} como:

$$P(\mathcal{H}_{\mu\nu}) \propto \begin{cases} \exp(-a|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu = \nu; \\ \exp(-2a|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu \neq \nu, \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Portanto,

$$P(\mathcal{H}) \equiv \prod_{\mu\nu} P(\mathcal{H}_{\mu\nu}), \quad (\text{A.6})$$

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

$$\begin{cases} \mathcal{H}_{\mu\nu} = \mathcal{H}_{\mu\nu}^0 + \mathcal{H}_{\mu\nu}^1 e_1 + \mathcal{H}_{\mu\nu}^2 e_2 + \mathcal{H}_{\mu\nu}^3 e_3, \\ \mathcal{H}_{\mu\nu}^k \in \mathbb{R}, \\ \mathcal{H}_{\mu\nu}^k = 0, \text{ para } k > \beta - 1, \\ \mathcal{H}_{\mu\mu}^k = 0, \text{ para } k > 0, \\ |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 = \sum_{k=0}^{\beta-1} (\mathcal{H}_{\mu\nu}^k)^2. \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

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

Observando A.6 e A.7, temos que

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}_{\mu\nu} \rangle &= \langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^0 \rangle + \langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^1 \rangle e_1 + \langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^2 \rangle e_2 + \langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^3 \rangle e_3, \\ \langle \mathcal{H}_{\mu\nu} \rangle &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

então a variância dos elementos de \mathcal{H} , que são independentes, pode ser escrita como $\sigma^2 = \langle (\mathcal{H}_{\mu\nu})^2 \rangle$ e portanto podemos encontrá-la para cada ensemble a partir das distribuições

$$P(\mathcal{H}_{\mu\nu})^2 = P(\mathcal{H}_{\mu\nu})P(\mathcal{H}_{\mu\nu}) = \begin{cases} \exp(-2a|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu = \nu, \\ \exp(-4a|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2), & \text{se } \mu \neq \nu, \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

- Para $\beta = 1$

$$|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 = (\mathcal{H}_{\mu\nu}^0)^2, \quad (\text{A.10})$$

portanto,

$$\langle |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2a}, & \text{se } \mu = \nu, \\ \frac{1}{4a}, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

- Para $\beta = 2$

$$|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 = (\mathcal{H}_{\mu\nu}^0)^2 + (\mathcal{H}_{\mu\nu}^1)^2, \quad (\text{A.12})$$

portanto,

$$\langle |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{2}{2a}, & \text{se } \mu = \nu, \\ \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} = \frac{2}{4a}, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

- Para $\beta = 4$

$$|\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 = (\mathcal{H}_{\mu\nu}^0)^2 + (\mathcal{H}_{\mu\nu}^1)^2 + (\mathcal{H}_{\mu\nu}^2)^2 + (\mathcal{H}_{\mu\nu}^3)^2, \quad (\text{A.14})$$

portanto,

$$\langle |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{4}{2a}, & \text{se } \mu = \nu, \\ \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} + \frac{1}{4a} = \frac{4}{4a}, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Então, para k de 0 a $\beta - 1$

$$\langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^k \rangle = 0, \quad (\text{A.16})$$

$$\langle |\mathcal{H}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \begin{cases} \frac{\beta}{2a} = \langle (\mathcal{H}_{\mu\mu}^0)^2 \rangle, & \text{se } \mu = \nu, \\ \frac{\beta}{4a} = \beta \langle (\mathcal{H}_{\mu\nu}^k)^2 \rangle, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

Comparando as equações A.2 e A.3 concluímos que $a = \frac{\beta M}{4\lambda^2}$, portanto, de modo geral

$$\langle \mathcal{H}_{\mu\nu}^k \rangle = 0, \quad (\text{A.18})$$

$$\langle (\mathcal{H}_{\mu\nu}^k)^2 \rangle = \begin{cases} \frac{2\lambda^2}{M}, & \text{se } k = 0 \text{ e } \mu = \nu, \\ 0, & \text{se } k > 0 \text{ e } \mu = \nu, \\ \frac{\lambda^2}{\beta M} & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

APÊNDICE B

Distribuição Gaussiana da Matriz Aleatória Quiral

Modelamos o hamiltoniano do bilhar de Dirac caótico com uma matriz aleatória quiral $2M \times 2M$

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{T} \\ \mathcal{T}^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

que satisfaz a seguinte relação

$$\mathcal{H} = -\sigma_z \mathcal{H} \sigma_z. \quad (\text{B.2})$$

Em nossa abordagem, \mathcal{T} é uma matriz aleatória quadrada $M \times M$ com a seguinte distribuição gaussiana

$$P(\mathcal{T}) \propto \exp \left[-\frac{\beta M}{2\lambda^2} \text{Tr}(\mathcal{T}\mathcal{T}^\dagger) \right], \text{ onde } \lambda = \frac{2M\Delta}{\pi}, \quad (\text{B.3})$$

a qual reescrevemos da seguinte forma

$$P(\mathcal{T}) \propto \exp \left[-a \text{Tr}(\mathcal{T}\mathcal{T}^\dagger) \right], \quad (\text{B.4})$$

onde,

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\mathcal{T}\mathcal{T}^\dagger) &= \sum_{\mu} \mathcal{T}_{\mu\mu} \mathcal{T}_{\mu\mu}^* + \sum_{\mu \neq \nu} \mathcal{T}_{\mu\nu} \mathcal{T}_{\mu\nu}^* \\ &= \sum_{\mu} |\mathcal{T}_{\mu\mu}|^2 + \sum_{\mu \neq \nu} |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Escrevemos, então, a distribuição dos elementos de \mathcal{T} da seguinte maneira

$$P(\mathcal{T}_{\mu\nu}) \propto \exp \left(-a |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 \right). \quad (\text{B.6})$$

Em geral, cada elemento de \mathcal{T} é um quatérnion real da seguinte forma

$$\begin{cases} \mathcal{T}_{\mu\nu} = \mathcal{T}_{\mu\nu}^0 + \mathcal{T}_{\mu\nu}^1 e_1 + \mathcal{T}_{\mu\nu}^2 e_2 + \mathcal{T}_{\mu\nu}^3 e_3, \\ \mathcal{T}_{\mu\nu}^k \in \mathbb{R}, \\ |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 = \sum_{k=0}^{\beta-1} (\mathcal{T}_{\mu\nu}^k)^2. \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

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

Observando B.3 e a definição

$$P(\mathcal{T}) \equiv \prod_{\mu\nu} P(\mathcal{T}_{\mu\nu}), \quad (\text{B.8})$$

temos então que

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{T}_{\mu\nu} \rangle &= \langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^0 \rangle + \langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^1 \rangle e_1 + \langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^2 \rangle e_2 + \langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^3 \rangle e_3, \\ \langle \mathcal{T}_{\mu\nu} \rangle &= 0, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

então, a variância dos elementos de \mathcal{T} , pode ser escrita como $\sigma^2 = \langle (\mathcal{T}_{\mu\nu})^2 \rangle$, e portanto, podemos encontrá-la para cada ensemble a partir das distribuições

$$P(\mathcal{T}_{\mu\nu})^2 = P(\mathcal{T}_{\mu\nu})P(\mathcal{T}_{\mu\nu}) = \exp(-2a|\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2) \quad (\text{B.10})$$

- Para $\beta = 1$

$$|\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 = (\mathcal{T}_{\mu\nu}^0)^2, \quad (\text{B.11})$$

portanto,

$$\langle |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \frac{1}{2a}; \quad (\text{B.12})$$

- Para $\beta = 2$

$$|\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 = (\mathcal{T}_{\mu\nu}^0)^2 + (\mathcal{T}_{\mu\nu}^1)^2, \quad (\text{B.13})$$

portanto,

$$\langle |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{2}{2a}; \quad (\text{B.14})$$

- Para $\beta = 4$

$$|\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 = (\mathcal{T}_{\mu\nu}^0)^2 + (\mathcal{T}_{\mu\nu}^1)^2 + (\mathcal{T}_{\mu\nu}^2)^2 + (\mathcal{T}_{\mu\nu}^3)^2, \quad (\text{B.15})$$

portanto,

$$\langle |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} = \frac{4}{2a}. \quad (\text{B.16})$$

Então, para k de 0 a $\beta - 1$

$$\langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^k \rangle = 0, \quad (\text{B.17})$$

$$\langle |\mathcal{T}_{\mu\nu}|^2 \rangle = \frac{\beta}{2a} = \beta \langle (\mathcal{T}_{\mu\nu}^k)^2 \rangle. \quad (\text{B.18})$$

Comparando as equações B.3 e B.4 concluímos que $a = \frac{\beta M}{2\lambda^2}$, portanto, de modo geral

$$\langle \mathcal{T}_{\mu\nu}^k \rangle = 0, \quad (\text{B.19})$$

$$\langle (\mathcal{T}_{\mu\nu}^k)^2 \rangle = \frac{\lambda^2}{\beta M}. \quad (\text{B.20})$$

APÊNDICE C

Relação de Simetria da Matriz \mathcal{S} Devido ao Hamiltoniano Quiral com SSR

Vimos no capítulo 3 que a SSR leva o hamiltoniano a seguinte relação de anti-comutação

$$\mathcal{H} = -\sigma_z H \sigma_z, \quad (\text{C.1})$$

com a matriz de Pauli σ_z atuando no espaço das sub-redes, portanto,

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_M & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_M \end{pmatrix}_{2M \times 2M}, \quad (\text{C.2})$$

satisfazendo as seguintes relações, $\sigma_z = \sigma_z^\dagger = \sigma_z^{-1}$, de modo que $\sigma_z^2 = \mathbb{1}_{2M \times 2M}$.

A matriz de espalhamento $\mathcal{S}(\epsilon)$, para o sistema, possui dimensão $2N_T \times 2N_T$, podendo ser obtida a partir do hamiltoniano pela fórmula de Mahaux-Weidenmüller, que pode ser escrita da seguinte forma

$$\mathcal{S}(\epsilon) = \mathbb{1} + 2\pi i \mathcal{W}^\dagger (\mathcal{H} - \epsilon - i\pi \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger)^{-1} \mathcal{W}, \quad (\text{C.3})$$

da mesma forma podemos obter $\mathcal{S}(-\epsilon)$, para o sistema no ponto de energia $-\epsilon$

$$\mathcal{S}(-\epsilon) = \mathbb{1} + 2\pi i \mathcal{W}^\dagger (\mathcal{H} + \epsilon - i\pi \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger)^{-1} \mathcal{W}, \quad (\text{C.4})$$

e calcular a sua complexa conjugada

$$\mathcal{S}^\dagger(-\epsilon) = \mathbb{1} - 2\pi i \mathcal{W}^\dagger (\mathcal{H} + \epsilon + i\pi \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger)^{-1} \mathcal{W}. \quad (\text{C.5})$$

Aqui, usamos a propriedade $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$, portanto, $(W^\dagger W)^\dagger = W^\dagger W$, além disso, sabemos que o hamiltoniano é hermitiano. Portanto, Podemos manipular a equação C.3, utilizando a relação C.1, como abaixo

$$\mathcal{S}(\epsilon) = \mathbb{1} + 2\pi i \mathcal{W}^\dagger (-\sigma_z \mathcal{H} \sigma_z - \epsilon - i\pi \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger)^{-1} \mathcal{W}, \quad (\text{C.6})$$

$$= \mathbb{1} - 2\pi i \mathcal{W}^\dagger \sigma_z (\mathcal{H} + \epsilon + i\pi \sigma_z \mathcal{W} \mathcal{W}^\dagger \sigma_z)^{-1} \sigma_z \mathcal{W}. \quad (\text{C.7})$$

Por conveniência, introduziremos na equação C.7 matrizes identidade de dimensão $(2N_T \times 2N_T)$, através da matriz Σ_z , generalização $2N_T$ -dimensional da matriz de Pauli

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{N_T} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{N_T} \end{pmatrix}_{2N_T \times 2N_T}, \quad (\text{C.8})$$

dessa forma, $\Sigma_z = \Sigma_z^\dagger = \Sigma_z^{-1}$ e $\Sigma_z^2 = \mathbb{1}_{2N_T \times 2N_T}$. Portanto,

$$\mathcal{S}(\epsilon) = \mathbb{1} - 2\pi i \Sigma_z \Sigma_z \mathcal{W}^\dagger \sigma_z (\mathcal{H} + \epsilon + i\pi \sigma_z \mathcal{W} \Sigma_z \Sigma_z \mathcal{W}^\dagger \sigma_z)^{-1} \sigma_z \mathcal{W} \Sigma_z \Sigma_z, \quad (\text{C.9})$$

$$= \Sigma_z \left[\mathbb{1} - 2\pi i \Sigma_z \mathcal{W}^\dagger \sigma_z (\mathcal{H} + \epsilon + i\pi \sigma_z \mathcal{W} \Sigma_z \Sigma_z \mathcal{W}^\dagger \sigma_z)^{-1} \sigma_z \mathcal{W} \Sigma_z \right] \Sigma_z \quad (\text{C.10})$$

Tomando-se o limite da independência estatística da matriz \mathcal{S} , $M \rightarrow \infty$, e considerando a forma dos elementos da matriz \mathcal{W} ,

$$(\mathcal{W}_p)_{m,n} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi(M+1)}} \text{sen} \left[\frac{m \left(\sum_{i=0}^{p-1} N_i + n \right) \pi}{M+1} \right], \quad (\text{C.11})$$

onde $m = 1, 2, \dots, 2M$ e $n = 1, 2, \dots, 2N_p$, comparamos a expressão entre colchetes da equação C.7 com a equação C.5, chegamos, então, a seguinte conclusão:

$$\sigma_z \mathcal{W} \Sigma_z = W. \quad (\text{C.12})$$

Portanto, a SSR e a relação de anti-comutação imposta a \mathcal{H} leva a matriz \mathcal{S} a seguinte simetria

$$\mathcal{S}(\epsilon) = \Sigma_z \mathcal{S}^\dagger(-\epsilon) \Sigma_z. \quad (\text{C.13})$$

Simetria similar a encontrada no artigo [26].

Referências Bibliográficas

- [1] Y. Nazarov and Y. Blanter. **Quantum Transport**. Cambridge University Press, 2009.
- [2] P. A. Mello and N. Kumar. **Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations**. Oxford University press, 2004.
- [3] Y. Imry. **Introduction to Mesoscopic Physics**. Oxford University press, 2002.
- [4] M. S. M. Barros, A. J. Nascimento Júnior, A. F. Macedo-Junior, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa. **Open chaotic Dirac billiards: Weak (anti)localization, conductance fluctuations, and decoherence**. *Phys. Rev. B*, 88:245133, 2013.
- [5] B. L. Altshuler, P. A. Lee, and R. A. Webb. **Mesoscopic Phenomena in Solids**. North-Holland, New York, 1991.
- [6] S. Datta. **Electronic transport in mesoscopic system**. Cambridge University Press, 1995.
- [7] D. K. Ferry and S. M. Goodnick. **Transport in Nanostructures**. Cambridge University Press, 1997.
- [8] C. W. J. Beenakker. **Random-matrix theory of quantum transport**. *Rev. Mod. Phys.*, 69:731–808, 1997.
- [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. **The electronic properties of graphene**. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, 2009.
- [10] M. Z. Hasan and C. L. Kane. **Colloquium: Topological insulators**. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, 2010.
- [11] Y. Alhassid. **The statistical theory of quantum dots**. *Reviews of Modern Physics*, 72:895–968, 2000.
- [12] L. Kouwenhoven and C. Marcus. **Quantum Dots**. *Physics World*, pages 35–39, 2008.
- [13] L. P. Kouwenhoven, C. M. Marcus, P. L. Meeuen, S. Tarucha, R. M. Westervelt, and N. S. Wingreen. **Electron Transport in Quantum Dots**. in *Proceedings of the Advanced Study Institute on Mesoscopic Electron Transport*, 1997.

- [14] F. Libisch, C. Stampfer, and J. Burgdörfer. **Graphene quantum dots: Beyond a Dirac billiard.** *Phys. Rev. B*, 79:115423, 2009.
- [15] G. D. Birkhoff. **Dynamical systems.** A.M.S. Colloquium Publications, New York, 1927.
- [16] A. Saa e R. de Sá Teles. **Bilhares: Aspectos Físicos e Matemáticos.** http://www.impa.br/opencms/pt/biblioteca/cbm/29CBM/29CBM_03.pdf. Acessado em 28/03/2014.
- [17] R. Markarian. **Bilhares. A Hipótese Ergódica de Boltzmann.** *Matemática Universitária*, 29:45 – 74, 2000.
- [18] A. M. O. Almeida and R. O. Vallejos. **Caos e mecânica quântica.** Revista do CBPF, <http://portal.cbpf.br/protected/Pages/divulgacao/pdfs/CaosQuant.pdf>. Acessado em 28/03/2014.
- [19] F. Haake. **Quantum signatures of chaos.** Springer, 2nd edition, (2001).
- [20] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. **Chaotic Dirac Billiard in Graphene Quantum Dots.** *Science*, 320:356–358, 2008.
- [21] M. V. Berry and R. J. Mondragon. **Neutrino Billiards: Time-Reversal Symmetry-Breaking Without Magnetic Fields.** *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 412:53–74, 1987.
- [22] E. Rossi, J. H. Bardarson, M. S. Fuhrer, and S. Das Sarma. **Universal Conductance Fluctuations in Dirac Materials in the Presence of Long-range Disorder.** *Phys. Rev. Lett.*, 109:096801, 2012.
- [23] J. Wurm, A. Rycerz, I. Adagideli, M. Wimmer, K. Richter, and H. U Baranger. **Symmetry Classes in Graphene Quantum Dots: Universal Spectral Statistics, Weak Localization, and Conductance Fluctuations.** *Phys. Rev. Lett.*, 102:056806, 2009.
- [24] J. Wurm, K. Richter, and I. Adagideli. **Edge effects in graphene nanostructures: Semiclassical theory of spectral fluctuations and quantum transport.** *Phys. Rev. B*, 84:205421, 2011.
- [25] S. Gnutzmann and B. Seif. **Universal spectral statistics in Wigner-Dyson, chiral, and Andreev star graphs. I. Construction and numerical results.** *Phys. Rev. E*, 69:056219, 2004.
- [26] P. Jacquod, R. S. Whitney, J. Meair, and M. Büttiker. **Onsager relations in coupled electric, thermoelectric, and spin transport: The tenfold way.** *Phys. Rev. B*, 86:155118, 2012.

- [27] M. L. Mehta. **Random matrices**. Academic Press, 1991.
- [28] E. V. Shuryak and J. J. M. Verbaarschot. **Random matrix theory and spectral sum rules for the Dirac operator in {QCD}**. *Nuclear Physics A*, 560:306 – 320, 1993.
- [29] J. Verbaarschot. **Spectrum of the QCD Dirac operator and chiral random matrix theory**. *Phys. Rev. Lett.*, 72:2531–2533, 1994.
- [30] A. Altland and M. R. Zirnbauer. **Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures**. *Phys. Rev. B*, 55:1142–1161, 1997.
- [31] I. Klefogiannis, I. Amanatidis, and V. A. Gopar. **Conductance through disordered graphene nanoribbons: Standard and anomalous electron localization**. *Phys. Rev. B*, 88:205414, 2013.
- [32] A.R. Akhmerov. **Dirac and Majorana Edge States in Graphene and Topological Superconductors**. Casimir PhD series. 2011.
- [33] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi. **Electronic transport in two-dimensional graphene**. *Rev. Mod. Phys.*, 83:407–470, 2011.
- [34] D. Pesin and A. H. MacDonald. **Spintronics and pseudospintronics in graphene and topological insulators**. *Nature Materials*, 11:409–416, 2012.
- [35] A. K. Geim and K. S. Novoselov. **The rise of graphene**. *Nature Materials*, 6:183 – 191, 2007.
- [36] C. W. J. Beenakker. **Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene**. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1337–1354, 2008.
- [37] O. Shevtsov, P. Carmier, C. Petitjean, C. Groth, D. Carpentier, and X. Waintal. **Graphene-Based Heterojunction between Two Topological Insulators**. *Phys. Rev. X*, 2:031004, 2012.
- [38] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. **Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene**. *Nature Physics*, 2(9):620–625, 2006.
- [39] D. R. Cooper, B. D’Anjou, N. Ghattamaneni, B. Harack, M. Hilke, A. Horth, Majlis, N. M. Massicotte, L. Vandsburger, E. Whiteway, and V. Yu. **Experimental review of graphene**. *ISRN Conde. Matter Phys.*, 2012:1–56, 2011.
- [40] P. G. Silvestrov and K. B. Efetov. **Quantum Dots in Graphene**. *Phys. Rev. Lett.*, 98:016802, 2007.
- [41] J. Wurm, K. Richter, and I Adagideli. **Edge effects in graphene nanostructures: From multiple reflection expansion to density of states**. *Phys. Rev. B*, 84:075468, 2011.

- [42] S. Bittner, B. Dietz, M. Miski-Oglu, and A. Richter. **Extremal transmission through a microwave photonic crystal and the observation of edge states in a rectangular Dirac billiard.** *Phys. Rev. B*, 85:064301, 2012.
- [43] R. M. Westervelt. **Graphene Nanoelectronics.** *Science*, 320:324–325, 2008.
- [44] D. J. Thouless. **Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics.** World Scientific, 1998.
- [45] Shou-cheng Zhang. **Topological states of quantum matter.** *Physics*, 1:6, 2008.
- [46] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. **Topological insulators and superconductors.** *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, 2011.
- [47] S. Cho, D. Kim, P. Syers, N. P. Butch, J. Paglione, and M. S. Fuhrer. **Topological Insulator Quantum Dot with Tunable Barriers.** *Nano Letters*, 12:469–472, 2012.
- [48] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin. **Symmetries and weak localization and antilocalization of Dirac fermions in HgTe quantum wells.** *Phys. Rev. B*, 86:125323, 2012.
- [49] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon, et al. **Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas.** *Phys. Rev. Lett.*, 60:848–850, 1988.
- [50] D. Wharam et al. **One-Dimensional Transport and the Quantization of Ballistic Resistance.** *Journal of Physics C: Solid State Physics*, (21):209–214, 1988.
- [51] G. Bergmann. **Weak Localization in Thin Films a time-of-flight experiment with conduction electrons.** *Phys. Rep.*, 107:1–58, 1984.
- [52] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan. **Disordered electronic systems.** *Rev. Mod. Phys.*, 57:287–337, 1985.
- [53] P. A. Lee, A. D. Stone, and H. Fukuyama. **Universal conductance fluctuations in metals: Effects of finite temperature, interactions, and magnetic field.** *Phys. Rev. B*, 35:1039–1070, 1987.
- [54] R. Landauer. **Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices.** *Phil. Mag.*, 21:863, 1970.
- [55] G. Metalidis. **Electronic transport in mesoscopic systems.** Diss.–Halle, 2007.
- [56] G. C. Duarte-Filho. **Estatística de Contagem de Carga e Teoria Quântica de Circuitos em Sistemas Híbridos Metal Normal-Supercondutor e em Cadeias de Pontos Quânticos.** Tese de Doutorado, UFPE, 2010.

- [57] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher. **New method for a scaling theory of localization.** *Phys. Rev. B*, 22:3519–3526, 1980.
- [58] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas. **Generalized many-channel conductance formula with application to small rings.** *Phys. Rev. B*, 31:6207–6215, 1985.
- [59] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie., and G. A. C. Jones. **One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance.** *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 21(8):209, 1988.
- [60] T. V. Krishtop and Nagaev K. E. **Temperature-dependent quantum electron transport in 2D point contacts.** *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(5):055301, 2013.
- [61] S. V. Morozov D. Jiang M. I. Katsnelson I. V. Grigorieva S. V. Dubonos A. A. Firsov K. S. Novoselov, A. K. Geim. **Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene.** *Nature*, (7065):197–200, 2005.
- [62] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. **Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene.** *Nature*, 438:201–204, 2005.
- [63] H. B. Heersche, P. Jarillo-Herrero, J. B. Oostinga, L. M. K. Vandersypen, and A. F. Morpurgo. **Bipolar supercurrent in graphene.** *Nature*, 446(7131):56–59, 2007.
- [64] N. Argaman. **Semiclassical Analysis of the Conductance of Mesoscopic Systems.** *Phys. Rev. Lett.*, 75:2750–2753, 1995.
- [65] G. Bergmann. **Weak anti-localization - An experimental proof for the destructive interference of rotated spin 1/2.** *Solid State Communications*, 42(11):815 – 817, 1982.
- [66] M. Cahay, M. McLennan, and S. Datta. **Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach.** *Phys. Rev. B*, 37:10125–10136, 1988.
- [67] R. V. Gorbachev, F. V. Tikhonenko, A. S. Mayorov, D. W. Horsell, and A. K. Savchenko. **Weak Localization in Bilayer Graphene.** *Phys. Rev. Lett.*, 98:176805, 2007.
- [68] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin. **Electron transport in disordered graphene.** *Phys. Rev. B*, 74:235443, 2006.
- [69] Z. Liao, B. Han, H. Zhang, Y. Zhou, Q. Zhao, and D. Yu. **Current regulation of universal conductance fluctuations in bilayer graphene.** *New Journal of Physics*, 12(8):083016, 2010.

- [70] A. F. Morpurgo and F. Guinea. **Intervalley Scattering, Long-Range Disorder, and Effective Time-Reversal Symmetry Breaking in Graphene.** *Phys. Rev. Lett.*, 97:196804, 2006.
- [71] P. A. Lee and A. Douglas Stone. **Universal Conductance Fluctuations in Metals.** *Phys. Rev. Lett.*, 55:1622–1625, 1985.
- [72] P. Mohanty and R. A. Webb. **Anomalous Conductance Distribution in Quasi-One-Dimensional Gold Wires: Possible Violation of the One-Parameter Scaling Hypothesis.** *Phys. Rev. Lett.*, 88:146601, 2002.
- [73] J. Güttinger, F. Molitor, C. Stampfer, S. Schnez, A. Jacobsen, S. Dröscher, T. Ihn, and K. Ensslin. **Transport through graphene quantum dots.** *Reports on Progress in Physics*, 75(12):126502, 2012.
- [74] H. Feshbach, C. E. Porter, and V. F. Weisskopf. **Model for Nuclear Reactions with Neutrons.** *Phys. Rev.*, 96:448–464, 1954.
- [75] P. A. Mello and H. U. Baranger. **Interference phenomena in electronic transport through chaotic cavities: an information-theoretic approach.** *Waves In Random Media*, 9(2)::105 – 146, 1999.
- [76] T. Ericson and T. Mayer-Kuckuk. **Fluctuations in Nuclear Reactions.** *Annual Review of Nuclear Science*, 16(1):183–206, 1966.
- [77] R. Landauer. **Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance.** *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1(43):8099, 1989.
- [78] Y. Imry and R. Landauer. **Conductance viewed as transmission.** *Rev. Mod. Phys.*, 71:306–312, 1999.
- [79] M. Büttiker. **Four-Terminal Phase-Coherent Conductance.** *Phys. Rev. Lett.*, 57:1761–1764, 1986.
- [80] J. J. Sakurai. **Modern Quantum Mechanics (Revised Edition).** Addison Wesley, 1st edition, (1993).
- [81] M. Büttiker. **Role of quantum coherence in series resistors.** *Phys. Rev. B*, 33:3020–3026, 1986.
- [82] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker. **Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems.** *Journal of Mathematical Physics*, 37(10), 1996.
- [83] E. P. Wigner. **Characteristic Vectors of Bordered Matrices With Infinite Dimensions.** *Annals of Mathematics*, 62(3):548–564, 1955.

- [84] Dyson, F. J. **Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I.** *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):140–156, 1962.
- [85] P. J. Forrester, N. C. Snaith, and J. J. M. Verbaarschot. **Developments in random matrix theory.** *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(12):R1, 2003.
- [86] P. Sheng. **Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media.** World Scientific, Singapura, 1990.
- [87] Mahaux, C. and Weidenmüller, H. A. **Shell-model approach to nuclear reactions.** North-Holland, Amsterdam, 1969.
- [88] F. A. G. Almeida. **Algoritmos numéricos de matrizes aleatórias aplicados a sistemas mesoscópicos.** Tese de Doutorado, UFPE, 2010.
- [89] P. W. Brouwer. **Generalized circular ensemble of scattering matrices for a chaotic cavity with nonideal leads.** *Phys. Rev. B*, 51:16878–16884, 1995.
- [90] J. J. M. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller, and M.R. Zirnbauer. **Grassmann integration in stochastic quantum physics: The case of compound-nucleus scattering.** *Physics Reports*, 129(6):367–438, 1985.
- [91] A. M. S. Macêdo. **Average conductance coefficients in multiterminal chaotic cavities.** *Phys. Rev. B*, 63:115309, 2001.
- [92] F. J. Dyson. **Correlations between eigenvalues of a random matrix.** *Communications in Mathematical Physics*, 19(3):235–250, 1970.
- [93] M. Caselle and U. Magnea. **Random matrix theory and symmetric spaces.**
- [94] S. M. Nishigaki, D. M. Gangardt, and A. Kamenev. **Correlation functions of the BC Calogero-Sutherland model.** *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(12):3137, 2003.
- [95] M. R. Zirnbauer. **Supersymmetry for systems with unitary disorder: circular ensembles.** *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 29(22):7113, 1996.
- [96] Antony Ralston and Rabinowitz Philip. *A First Course in Numerical Analysis.* McGraw-Hill and Dover, 2001.
- [97] Uri M. Ascher and Chen Greif. *A First Course in Numerical Methods.* Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2011.
- [98] A. Edelman and N. R. Rao. **Random matrix theory.** *Acta Numerica*, 14:233–297, 5 2005.

- [99] C. W. J. Beenakker and H. van Houten. **Quantum transport in semiconductor nanostructures**. In *Solid-State Physics*, volume 44. Academic Press, New York, 1991.
- [100] H. U. Baranger and P. A. Mello. **Mesoscopic transport through chaotic cavities: A random S -matrix theory approach**. *Phys. Rev. Lett.*, 73:142–145, 1994.
- [101] P. A. Mello and H. U. Baranger. **Interference phenomena in electronic transport through chaotic cavities: an information-theoretic approach**. *Waves in Random Media*, 9:105–146, 1999.
- [102] A. F. Macedo-Junior and A. M. S. Macêdo. **Universal transport properties of asymmetric chiral quantum dots**. *Phys. Rev. B*, 77:165313, 2008.
- [103] S. N. Evangelou and D. E. Katsanos. **Spectral statistics in chiral-orthogonal disordered systems**. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36:3237, 2003.
- [104] T. P. Eggarter and R. Riedinger. **Singular behavior of tight-binding chains with off-diagonal disorder**. *Phys. Rev. B*, 18:569–575, 1978.
- [105] E. McCann, K. Kechedzhi, Vladimir I. Fal’ko, H. Suzuura, T. Ando, and B. L. Altshuler. **Weak-Localization Magnetoresistance and Valley Symmetry in Graphene**. *Phys. Rev. Lett.*, 97:146805, 2006.
- [106] P. Shukla. **Generalized Random Matrix Theory: A Mathematical Probe For Complexity**. *International Journal of Modern Physics B*, 26(16):1230008, 2012.
- [107] C. Mudry, P. W. Brouwer, and A. Furusaki. **Crossover from the chiral to the standard ity classes in the conductance of a quantum wire with random hopping only**. *Phys. Rev. B*, 62:8249–8268, 2000.
- [108] E. V. Shuryak and J.J.M. Verbaarschot. **Random matrix theory and spectral sum rules for the Dirac operator in QCD**. *Nucl.Phys.*, A560:306–320, 1993.
- [109] A. F. Macedo-Junior. **Transporte em nanoestruturas: Métodos de movimento Browniano e teoria de circuitos**. Tese de Doutorado, UFPE, 2006.
- [110] C. W. J. Beenakker and B. Michaelis. **Stub model for dephasing in a quantum dot**. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 38(49):10639, 2005.
- [111] R. M. Clarke, I. H. Chan, C. M. Marcus, C. I. Duruöz, J. S. Harris, K. Campman, and A. C. Gossard. **Temperature dependence of phase breaking in ballistic quantum dots**. *Phys. Rev. B*, 52:2656–2659, 1995.

- [112] M. G. Vavilov and I. L. Aleiner. **Theory of dephasing by external perturbation in open quantum dots.** *Phys. Rev. B*, 60:R16311–R16314, 1999.
- [113] G. Seelig and M. Büttiker. **Charge-fluctuation-induced dephasing in a gated mesoscopic interferometer.** *Phys. Rev. B*, 64:245313, 2001.
- [114] M. L. Polianski and P. W. Brouwer. **Scattering matrix ensemble for time-dependent transport through a chaotic quantum dot.** *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(12):3215, 2003.
- [115] H. U. Baranger and P. A. Mello. **Effect of phase breaking on quantum transport through chaotic cavities.** *Phys. Rev. B*, 51:4703–4706, 1995.
- [116] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker. **Effect of a voltage probe on the phase-coherent conductance of a ballistic chaotic cavity.** *Phys. Rev. B*, 51:7739–7743, 1995.
- [117] Robert S. Whitney, Philippe Jacquod, and Cyril Petitjean. **Dephasing in quantum chaotic transport: A semiclassical approach.** *Phys. Rev. B*, 77:045315, 2008.