



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

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Transporte e emaranhamento em fios quânticos desordenados:
simulação numérica via método de Monte Carlo

José Eduardo Tributino Costa

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

15 de Junho de 2021

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

José Eduardo Tributino Costa

**Transporte e emaranhamento em fios quânticos desordenados:
simulação numérica via método de Monte Carlo**

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

Orientador: Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa

Coorientador: Dr. Ailton Fernandes de Macedo Júnior

**Recife - PE
12 de Junho de 2020**

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

T822t

Costa, José Eduardo Tributino

Transporte e emaranhamento em fios quânticos desordenados: simulação numérica via método de Monte Carlo /
José Eduardo Tributino Costa. - 2021.
86 f. : il.

Orientador: Anderson Luiz da Rocha e Barbosa.
Coorientador: Ailton Fernandes de Macedo Junior.
Inclui referências e apêndice(s).

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada,
Recife, 2021.

1. Física Mesoscópica. 2. Transporte Eletrônico. 3. Equação DMPK. 4. Método de Monte Carlo. 5. Emaranhamento. I.
Barbosa, Anderson Luiz da Rocha e, orient. II. Junior, Ailton Fernandes de Macedo, coorient. III. Título

CDD 621

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

**Transporte e emaranhamento em fios quânticos desordenados: simulação
numérica via método de Monte Carlo**

José Eduardo Tributino Costa

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

Orientador:

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
UFRPE

Coorientador:

Prof. Dr. Ailton Fernandes de Macedo Júnior
UFRPE

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Antônio de Pádua Santos
UFRPE

Dr. Carlos Eduardo Correia de Souza
UFPE

À minha família e amigos.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por toda a força que Ele me deu durante esse período e por todas as bênçãos que ele trouxe em minha vida. Nada disso seria possível sem Ele. À minha esposa Thayana, por estar sempre do meu lado com muito carinho, amor e paciência que me fez seguir adiante. Agradeço à toda minha família, em especial, minha mãe (Maria), minha avó (dona Maria) e a minha sogra (Marluce). Obrigado por todas as orações.

Também agradeço aos grandes amigos e colegas que fiz durante a jornada da graduação e do mestrado, em especial, Vinícius, Rhimon, Ícaro, Mário e ao grupo de conversa no *Discord*, Guilherme, João Lucas, João Vitor e Ricardo.

Agradeço particularmente ao professor Ailton Macêdo por todo trabalho desenvolvido, por toda a dedicação e atenção que me foi dada, e por todas as ligações que sempre começavam com um: “temos um problema.” Aos professores do Departamento de Física por todo conhecimento que foi transmitido durante todos esses anos. Aos eficientes funcionários do Departamento de Física. Agradeço também a CAPES pelo suporte financeiro aos meus estudos.

Resumo

Neste trabalho estudamos propriedades de transporte em fios quânticos desordenados acoplados a reservatórios de elétrons por guias ideais. Especificamente, estudamos propriedades estatísticas da condutância a partir do formalismo da equação DMPK, que descreve a evolução da distribuição conjunta de autovalores de transmissão em função do comprimento do fio. Para isso usamos o método de Monte Carlo introduzido na referência [1] a partir da solução aproximada da equação DMPK no regime metálico, válida em todas as classes de simetria de Wigner-Dyson. Dessa forma, investigamos fenômenos mesoscópicos como localização fraca e flutuações universais da condutância, bem como, a distribuição completa da condutância na transição entre os regimes metálico e localizado. Além disso, investigamos a proposta de um fio quântico como produtor de emaranhamento de elétrons não interagentes introduzida na referência [2]. Nesse caso estendemos o método de Monte Carlo para estudo da propriedade estatísticas da concorrência. Todos os resultados obtidos foram verificados a partir de uma formulação alternativa baseada no modelo de *tight-binding*.

Palavras-chave: Física Mesoscópica, Transporte Eletrônico, Equação DMPK, Método de Monte Carlo, Modelo Tight-Binding, Emaranhamento.

Abstract

In this work we study transport properties in disordered quantum wires coupled to electron reservoirs by ideal leads. Specifically, we study the statistical properties of conductance using the DMPK equation, which describes the time evolution of the joint distribution of transmission eigenvalues as a function of the wire length. For this, we used the Monte Carlo method presented in reference [1] for the approximate solution of the DMPK equation in the metallic regime, which is valid in all Wigner-Dyson symmetry classes. Thus, we investigate mesoscopic phenomena such as weak localization and universal conductance fluctuations, as well as the complete distribution of the conductance in the crossover region between the metallic and localized regimes. Furthermore, we investigated the proposal of a quantum wire as a producer of non-interacting electron entanglement introduced in reference [2]. In this case we extended the Monte Carlo method to study the statistical properties of the concurrence. All the obtained results were supported by simulations of disordered quantum wires based on a tight-binding model.

Keywords: Mesoscopic Physics, Electronic Transport, DMPK Equation, Monte Carlo Method, Tight-Binding Model, Entanglement.

1	Introdução	1
1.1	Física Mesoscópica	1
1.2	Escalas de Comprimentos e Regimes de Transporte	2
1.3	Fenômenos em sistemas mesoscópicos	4
1.3.1	Quantização da Condutância	4
1.3.2	Flutuações Universais na Condutância	5
1.3.3	Localização Fraca	6
1.4	Fios Quânticos	7
1.5	Formalismo do Espalhamento	8
1.5.1	Conservação de fluxo	10
1.5.2	Reversão temporal	11
1.6	Formalismo de Landauer	14
1.7	Teoria de Matrizes Aleatórias	16
1.7.1	Equação DMPK	18
2	Métodos Numéricos	24
2.1	Método de Monte Carlo	25
2.1.1	Método de Monte Carlo para fios desordenados	27

2.1.2	Resultados para Monte Carlo	28
2.2	O modelo Tight-Binding	32
2.2.1	Discretização do Hamiltoniano	33
2.2.2	Fio ideal	36
2.2.3	Fio desordenado	38
2.3	Comparação entre os métodos	39
3	Emaranhamento num fio desordenado	43
3.1	Paradoxo EPR e Desigualdade de Bell	44
3.2	Concorrência	46
3.3	Emaranhamento em Sistemas Mesoscópicos	48
3.4	Emaranhamento em fios quânticos	51
3.5	Simulações numéricas	53
4	Conclusões e Perspectivas	61
A	Identidade (3.40)	63
	Referências	71

Lista de Figuras

1.1	Amostra de comprimento L comparada com os comprimentos característicos	3
1.2	Comportamento da condutância em função da voltagem aplicada na constrição em um $2DEG$. A condutância do ponto de contato é quantizada e assume múltiplos de G_0 . Figura retirada de [9].	5
1.3	Flutuação da condutância em 3 sistemas diferentes. Em (a) temos $G(B)$ para uma amostra de um anel de ouro [11]. Em (b) MOSFET de silicone (amostra quase-unidimensional) [12]. Em (c) Cálculo numérico baseado no modelo de Anderson. [13].	6
1.4	Média da condutância em função do campo magnético externo para uma cavidade caótica. O valor médio da condutância é reduzido em $B = 0$. A aplicação de um campo magnético externo quebra a simetria de reversão temporal, elevando o valor da condutância. Figura retirada de [9].	7
1.5	Na esquerda, um fio quântico de 75nm de comprimento feito de uma heteroestrutura semicondutora. [15]. Na direita, um fio quântico de silicone. Aqui, a largura da estrutura é de 80nm. [16].	8
1.6	Modelo de uma amostra bidimensional conectada a 2 guias ideais. As setas indicam os sentidos das ondas entrando e saindo da amostra.	8
1.7	Modelo de duas amostras conectadas em sequência por um guia ideal.	10

1.8	Modelo de reservatório segundo o formalismo de Landauer. A região S é a amostra, tratada como um centro espalhador e é conectada aos reservatórios por guias ideais (Guia 1 e Guia 2).	14
1.9	Amostra de comprimento L adicionada de uma “fatia” de comprimento δL	19
2.1	Média e variância da condutância para o caso unitário ($\beta = 2$).	29
2.2	Média e variância da condutância para o caso ortogonal ($\beta = 1$).	29
2.3	Condutância em função do comprimento no caso ortogonal ($\beta = 1$). Para s pequeno temos o comportamento ohmico previsto pela eq. (2.13). À medida que s cresce, os valores desviam de acordo com a correção de localização fraca (2.14).	30
2.4	Fio quântico de comprimento $s = 6,39$ com $N = 5$ canais abertos na ausência de campo magnético ($\beta = 1$). (a) Evolução da condutância g durante os primeiros 10000 passos de Monte Carlo. (b) Distribuição da condutância $P(g)$ calculada a partir dos dados de (a) depois de acumular 10^7 passos de Monte Carlo.	31
2.5	Evolução do histograma da condutância em função do logaritmo do número de passos de Monte Carlo para $\beta = 1$, $N = 5$ e $s = 6,39$	32
2.6	Discretização de condutor bidimensional.	34
2.7	Modelo de <i>Hopping</i> com os 4 primeiros vizinhos na presença de um campo magnético externo.	36
2.8	Estrutura gerada no Kwant correspondendo a um fio de comprimento $L = 15a$ e largura $W = 4a$	37
2.9	Quantização da condutância num fio ideal com $N = 4$ e $L = 15a$. À esquerda são mostradas as bandas e à direita a condutância.	38
2.10	Condutância em função da Energia de Fermi para um fio quântico de largura $N = 4$ e comprimento $L = 15$. A linha preta representa um fio limpo (sem desordem). A linha vermelha representa $U = 1$ e a linha azul $U = 2$	39

2.11	Média da condutância em função do comprimento. O gráfico da esquerda mostra os resultados do método Monte Carlo para um fio com $N = 6$ para os casos $\beta = 1$ (vermelho) e $\beta = 2$ (azul). Na direita estão os resultados obtidos a partir do modelo <i>tight-binding</i> com $N = 6$, $E = 4t$ e $U = 2t$ na ausência (vermelho) e na presença (azul) de campo magnético, especificado por $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. Também estão identificados os comprimentos nos dois modelos para os quais $\langle g \rangle = 1$, $\langle g \rangle = 4/5$, $\langle g \rangle = 1/2$ e $\langle g \rangle = 1/3$	40
2.12	Distribuição da condutância para fios desordenados com simetria de reversão temporal ($\beta = 1$). Os histogramas correspondem a $P(g)$ obtida pelo método <i>tight-binding</i> com $N = 6$. A linha contínua corresponde a $P(g)$ obtida pela solução numérica da equação DMPK pelo método de Monte Carlo.	41
2.13	Distribuição da condutância para fios desordenados com simetria de reversão temporal quebrada por um campo magnético perpendicular tal que $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. Os histogramas correspondem a $P(g)$ obtida pelo método <i>tight-binding</i> com parâmetros $N = 6$, $E = 4t$ e $U = 2t$. A linha contínua corresponde a $P(g)$ obtida pela solução numérica da equação DMPK pelo método de Monte Carlo com $N = 6$ e $\beta = 2$	42
3.1	Emaranhador mesoscópico conectado a guias ideais à esquerda (1 e 2) e à direita (3 e 4). Um elétron ao escapar do sistema pela esquerda (direita) pode estar nos guias 1 ou 2 (3 ou 4), definindo um sistema de dois níveis.	49
3.2	Média e variância da concorrência em função de s	54
3.3	Média da condutância $\langle g \rangle$ em função do comprimento normalizado s para fios quânticos das classes $\beta = 1$ (esquerda) e $\beta = 2$ (direita). Na figura destacamos em linhas pontilhadas horizontais os valores $\langle g \rangle = 0,2, 0,5, 1,0$ e $1,9$ e são destacados os respectivos comprimentos em ambos os casos. que correspondem aos comprimentos $s = 0,049, 0,896, 2,33, e 4,95$, no caso $\beta = 1$, $s = 6,04, 2,61, 0,932, e 0,049$, no caso $\beta = 2$	55
3.4	Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal ($\beta = 1$). Os histogramas em (a), (b), (c) e (d) foram obtidos da simulação de Monte Carlo para os comprimentos $s = 0,049, 0,896, 2,33, e 4,95$, respectivamente. As linha azul no gráfico (a) é o resultado exato (3.50). As curvas nos demais gráficos foram obtidas pela a partir de (3.48).	56

3.5	Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal quebrada ($\beta = 2$). Os histogramas em (a), (b), (c) e (d) foram obtidos da simulação de Monte Carlo para os comprimentos $s = 0,049, 0,896, 2,33,$ e $4,95,$ respectivamente. As linha azul no gráfico (a) é o resultado exato (3.50). As curvas nos demais gráficos foram obtidas pela a partir de (3.48).	57
3.6	Média de da condutância $\langle g \rangle$ em função do comprimento da intensidade da desordem U do modelo <i>tight-binding</i> para o fio de comprimento $L = 50a$ na ausência de campo magnético. Na figura destacamos em linhas pontilhadas horizontais os valores $\langle g \rangle = 0,2, 0,5, 1,0$ e $1,9$ que correspondem aos valores de desordem $U = 1,967, 1,368, 0,868,$ e $0,200,$ respectivamente.	58
3.7	Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal. O histograma é o resultado da simulação do modelo <i>tight-binding</i> e as curvas são os resultados previstos a partir da teoria de matrizes aleatórias. As legendas nos gráficos mostram os parâmetros U e s usados nos dois modelos. No limite balístico usamos o resultado exato (3.50).	59
3.8	Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal quebrada pela presença de um campo magnético. Os histogramas são resultados da simulação do modelo <i>tight-binding</i> e as curvas são os resultados previstos a partir da teoria de matrizes aleatórias. Nos casos em que $\langle g \rangle = 1,9, \langle g \rangle = 1,0$ e $\langle g \rangle = 0,5$ usamos um campo magnético perpendicular ao fio tal que $eBa^2/\hbar = 1$. Para o caso em que $\langle g \rangle = 0,2$ usamos $eBa^2/\hbar = 1$. As curvas são os resultados obtidos a partir da formulação de matrizes aleatórias. As legendas nos gráficos mostram os parâmetros U e s usados nos dois modelos.	60

Lista de Tabelas

- 1.1 Classificação dos ensembles gaussianos e circulares quanto à presença (✓) ou ausência (✗) das simetrias de reversão temporal (SRS) e de rotação de spin (SRS). A tabela também mostra o índice de simetria de Dyson e as estruturas das matrizes envolvidas. 18

1.1 Física Mesoscópica

Durante a década de 1960 o mundo assistiu à miniaturização da eletrônica com o desenvolvimento dos circuitos integrados, dispositivos contendo uma grande quantidade de transistores e diodos interligados com resistores e capacitores, todos esses fabricados sob a mesma pastilha de semicondutor. A descoberta de tal dispositivo só foi possível graças ao conhecimento obtido no estudo da Física do Estado Sólido. Esse ramo da Física, que estava concentrado apenas nos sólidos cristalinos, cujos átomos que fazem parte de sua estrutura têm um arranjo periódico, ganhou um novo impulso depois da descoberta dos transistores [3]. O conhecimento acerca dos processos físicos envolvidos nesses dispositivos avançou consideravelmente durante todo o século passado juntamente com a criação e o desenvolvimento da mecânica quântica. Esses foram os primeiros passos do que conhecemos hoje como nanociência, ramo que tem como finalidade construir e controlar dispositivos eletrônicos em escala atômica (10^{-9} metros) [4].

A nanociência possui um ramo de estudo de grande importância para a Física do Estado Sólido e Física da Matéria Condensada: o transporte quântico de elétrons. Tal ramo nos permite caracterizar sólidos em: supercondutores, metais, semicondutores e isolantes, além de

verificar as propriedades dos diferentes regimes de transporte fazendo uso da teoria quântica, já que essas propriedades não conseguem ser descritas inteiramente pela física clássica.

Um dos interesses do transporte eletrônico é quantificar o transporte de elétrons através de uma amostra condutora. Em um sistema macroscópico, como um condutor retangular bidimensional, a condutância é descrita em termos da geometria da amostra, ou seja:

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (1.1)$$

onde W é a largura da amostra, L é o comprimento e σ é a condutividade, sendo esta uma propriedade intrínseca do material. No entanto, o que acontece quando o comprimento do material é muito pequeno? Em outras palavras, o que acontece quando W e $L \rightarrow 0$. Podemos esperar uma condutância indefinidamente grande e conseqüentemente resistência zero? Nesse contexto, surge a Física Mesoscópica, que estuda amostras que apresentam uma geometria com dimensões que variam entre o microscópico e o macroscópico, realizando uma abordagem que não seja puramente clássica. Nessa escala de comprimento, surgem efeitos quânticos devido à coerência de fase dos elétrons e esses efeitos não podem ser observados em medições de transporte em condutores de tamanho macroscópico. Nas próximas seções deste capítulo discutiremos alguns aspectos e propriedades apresentados por condutores mesoscópicos.

1.2 Escalas de Comprimentos e Regimes de Transporte

É natural apresentar algumas escalas de comprimentos que são de extrema importância no regime de transporte mesoscópico, uma vez que fenômenos quânticos são acentuados à medida que o tamanho da amostra diminui. Se o tamanho da amostra for muito maior que esses comprimentos característicos, os efeitos quânticos são perdidos e o sistema pode ser tratado classicamente. No transporte eletrônico, as escalas de referência são [5]:

1. **Comprimento de onda de Fermi** (λ_F): Corresponde ao comprimento de onda de Broglie de elétrons com energia de Fermi E_F . Considerando baixas temperaturas, apenas os elétrons com essa energia contribuem para o transporte.
2. **Livre caminho elástico médio** (l_e): Corresponde à distância média que um elétron percorre antes de sofrer duas colisões sucessivas. Este processo de espalhamento é refletido nas medidas de condutância da amostra. Esta escala varia de alguns angströms em metais a alguns micrômetros em heteroestruturas semicondutoras.

3. **Comprimento de localização eletrônica (ξ):** Corresponde à extensão espacial da função de onda na amostra. No regime metálico, a função de onda se estende por toda a amostra, já no regime isolante ela localiza-se e decai exponencialmente a partir de um ponto r_0 .
4. **Comprimento de coerência de fase (L_Φ):** É a escala mais importante para o surgimento de efeitos mesoscópicos. Este comprimento é referente à distância média que um elétron percorre sem que sua onda perca coerência de fase. Em geral, L_Φ aumenta à medida que a temperatura diminui.

Um sistema só se enquadra no regime mesoscópico quando pelo menos uma de suas dimensões é menor que o comprimento de coerência de fase L_Φ . Com o decréscimo da temperatura, L_Φ aumenta, tornando um sistema com $L \approx 1\mu m$ mesoscópico abaixo de 100 mK [6]. As informações e características sobre a condução dos elétrons no interior da amostra são definidas pelos regimes de transporte, que são estabelecidos pela relação entre o tamanho da amostra e as escalas de comprimento, como mostra a figura 1.1.

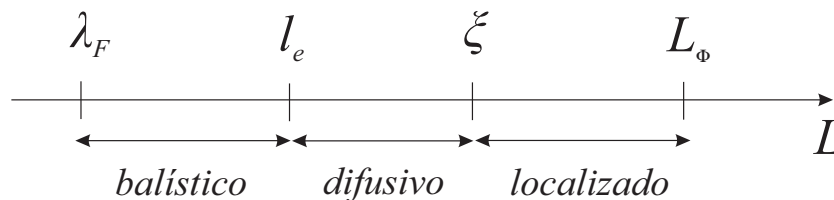


Figura 1.1: Amostra de comprimento L comparada com os comprimentos característicos

1. **Regime balístico:** Nesse regime, o comprimento L da amostra é menor que o livre caminho médio l_e e os elétrons viajam sem sofrer nenhum tipo de colisão. Há apenas espalhamento nas fronteiras da amostra e, portanto, os efeitos de coerência são relevantes.
2. **Regime difusivo:** Nesse regime, o comprimento L da amostra é maior que o livre caminho l_e , porém menor que o comprimento de localização ξ . Com isso, os elétrons sofrem diversas colisões ao atravessar a amostra. Os espalhamentos elásticos não afetam a coerência de fase, porém, a fase é destruída em processos onde o espalhamento é inelástico.

3. **Regime localizado:** Nesse regime, o comprimento da amostra L é maior que comprimento de localização ξ e menor que o comprimento de coerência de fase L_Φ . Nesse caso, os elétrons ficam confinados em uma região da amostra. A função de onda do elétron se torna mais encurtada na região de confinamento, fazendo com que a probabilidade de se encontrar o elétron em outra região diminua.

1.3 Fenômenos em sistemas mesoscópicos

À medida que o tamanho da amostra atinge dimensões comparáveis com o comprimento de uma das escalas características citadas na seção anterior, fenômenos quânticos passam a dominar a dinâmica do transporte eletrônico. Nesse contexto, alguns efeitos são naturalmente revelados, como, por exemplo, fenômenos de interferência devido ao comportamento ondulatório do elétron. Isso implica no surgimento de diversos outros eventos inerentes à Física Mesoscópica que serão discutido nas próximas seções.

1.3.1 Quantização da Condutância

O avanço de técnicas de crescimento de materiais permitiu a criação de estruturas em que a coerência de fase é mantida por toda a amostra. Esse tipo de estrutura é criado pela da junção de dois heterocompostos semicondutores como o $GaAs$ e o $AlGaAs$, onde na junção desses semicondutores os elétrons podem se mover livremente, criando um gás de elétrons bidimensional ($2DEG$) [5]. Foi justamente em uma dessas estruturas que o efeito de quantização da condutância foi observado. É possível inserir um ponto de contato de largura variável na amostra, onde a largura é ajustada através da técnica *split-gate*, que consiste em um eletrodo carregado que repele os elétrons que passam pela constrição. À medida que o potencial dos eletrodos se torna mais negativo, a condutância diminui em quantidades discretas [7, 8], como mostra a figura 1.2.

Quando uma diferença de potencial é estabelecida no ponto de contato, uma corrente $I = GV$ é criada, mas a onda eletrônica só pode atravessar o ponto de contato se interferir construtivamente e isso só acontece com um número N de modos transversais. Esse número N de modos está relacionado com a largura W da constrição por

$$N = \text{int} \left(\frac{2W}{\lambda_F} \right). \quad (1.2)$$

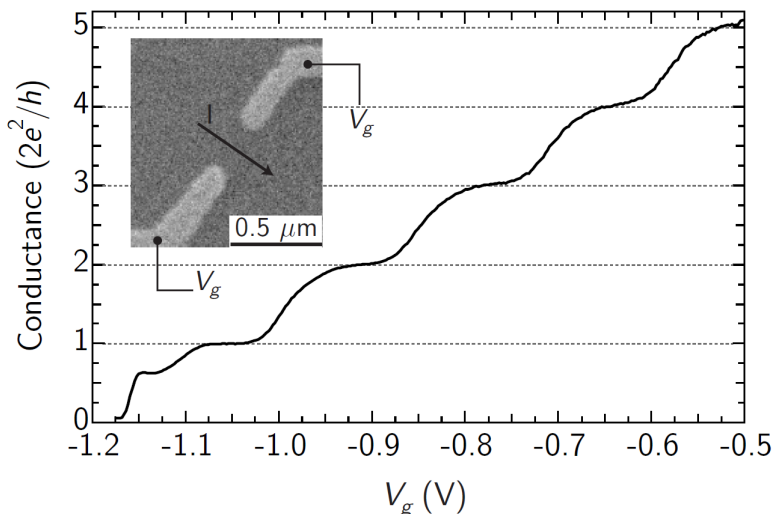


Figura 1.2: Comportamento da condutância em função da voltagem aplicada na constricção em um $2DEG$. A condutância do ponto de contato é quantizada e assume múltiplos de G_0 . Figura retirada de [9].

Variando a voltagem o número de modos transversais é alterado e a condutância passa a variar na forma de discreta em múltiplos de uma quantidade mínima $G_0 = 2e^2/h$, conhecida como quantum de condutância. A estrutura criada pelos semicondutores faz com que o movimento no seu interior seja balístico e ainda assim a condutância tem um valor finito, o que implica em uma resistência não nula. Esse fator de resistência surge na conexão entre a amostra e os contatos e é conhecido como resistência de contato [10].

1.3.2 Flutuações Universais na Condutância

Verifica-se experimentalmente que o valor da condutância em um sistema mesoscópico sofre flutuações ao alterarmos alguns parâmetros do sistema como energia de Fermi ou campo magnético. Essas flutuações ocorrem devido ao padrão de desordem que uma amostra apresenta. Mesmo em amostras feitas do mesmo material, a configuração de impurezas tem uma disposição completamente diferente em cada uma delas, pois não existe uma maneira de controlar esse arranjo. É possível reproduzir esses padrões de flutuações em uma única amostra com a aplicação de um campo magnético externo, uma vez que a presença desse campo causa efeitos similares aos dos padrões de interferência causados pela mudança na distribuição de impurezas. Na figura 1.3 temos alguns exemplos da manifestação do fenômeno das flutuações

em sistemas completamente distintos, mas com flutuações da ordem de $(e^2/h)^2$. Como esse fenômeno depende unicamente dos padrões de impurezas, essas flutuações são verdadeiras “marcas registradas” de cada amostra. A amplitude dessas flutuações é quantificada pela

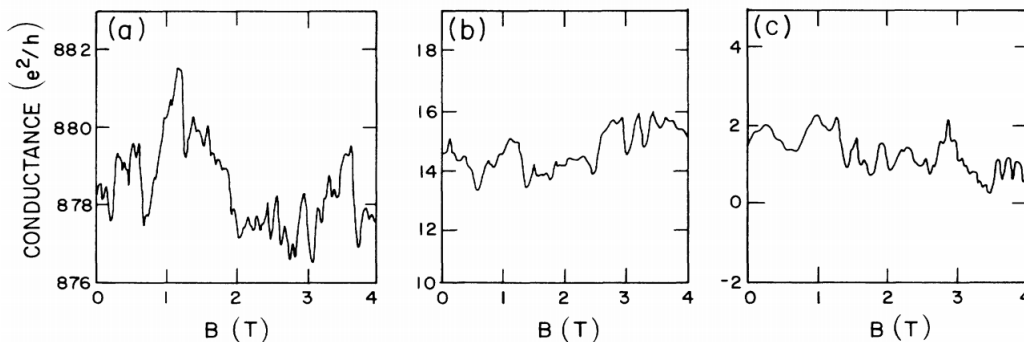


Figura 1.3: Flutuação da condutância em 3 sistemas diferentes. Em (a) temos $G(B)$ para uma amostra de um anel de ouro [11]. Em (b) MOSFET de silicônio (amostra quase-unidimensional) [12]. Em (c) Cálculo numérico baseado no modelo de Anderson. [13].

variância da condutância e é dada pela expressão:

$$\text{var}(G) = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 \sim \left(\frac{e^2}{h} \right)^2. \quad (1.3)$$

1.3.3 Localização Fraca

No regime difusivo, para partículas sem spin e na ausência de um campo magnético externo, há um aumento da probabilidade de reflexão devido à interferência construtiva entre as trajetórias revertidas no tempo, fazendo com que a condutância diminua, como mostra a figura 1.4. No caso de partículas com spin, também na ausência de um campo magnético externo, o fenômeno de acoplamento spin-órbita gera uma interferência destrutiva, causando um aumento na condutância. Esses dois efeitos de interferência quântica são conhecidos como localização fraca e anti-localização fraca respectivamente [14]. Se aplicarmos um campo magnético capaz de quebrar a simetria de reversão temporal, ambos os efeitos são inibidos.

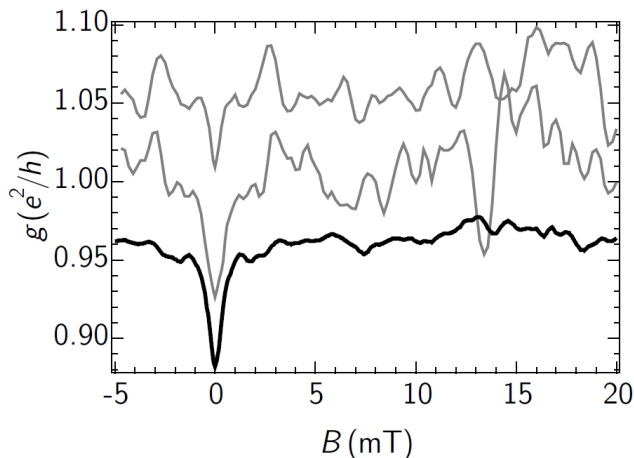


Figura 1.4: Média da condutância em função do campo magnético externo para uma cavidade caótica. O valor médio da condutância é reduzido em $B = 0$. A aplicação de um campo magnético externo quebra a simetria de reversão temporal, elevando o valor da condutância. Figura retirada de [9].

1.4 Fios Quânticos

Sistemas mesoscópicos que são quase unidimensionais são classificados como fios quânticos, que são estruturas estreitas onde o comprimento da amostra é muito maior que sua largura. Essas estruturas são comumente utilizadas em experimentos que envolvem transporte eletrônico, pois são facilmente conectados aos contatos elétricos formados dentro do gás de elétrons bidimensional (*2DEG*).

Fios quânticos, em geral, possuem comprimentos que são maiores do que o livre caminho médio dos elétrons, logo o transporte eletrônico nesse tipo de estrutura é difusivo e a baixas temperaturas, o comprimento de coerência de fase ultrapassa o comprimento da amostra, permitindo que os efeitos de interferência quântica sejam observados em suas propriedades de transporte. Na maioria dos experimentos, podemos controlar as dimensões do fio, alterando seu comprimento e largura. Essas modificações nos permitem obter resultados diferentes para a condutância da amostra, já que alterando a largura, por exemplo, o número de modos de propagação transversal também é alterado e isso implica diretamente na condutância do fio.

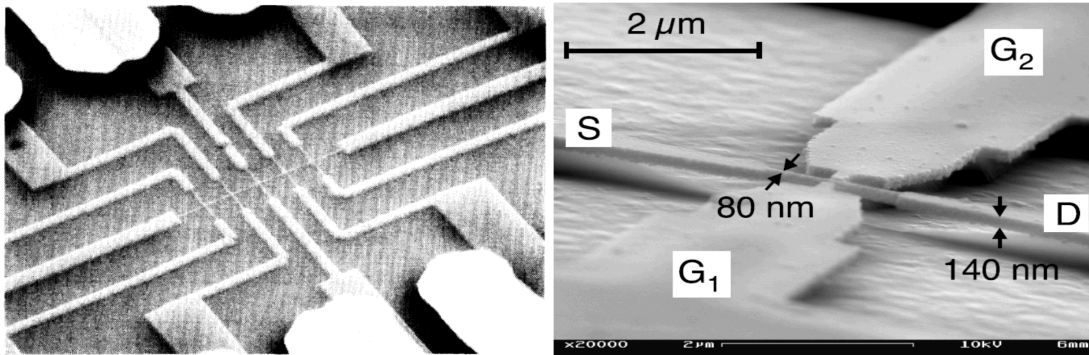


Figura 1.5: Na esquerda, um fio quântico de 75nm de comprimento feito de uma heteroestrutura semicondutora. [15]. Na direita, um fio quântico de silicene. Aqui, a largura da estrutura é de 80nm. [16].

1.5 Formalismo do Espalhamento

O formalismo de espalhamento para a condução eletrônica entrega uma estrutura natural para a descrição de propriedades de transporte em sistemas quânticos, uma vez que permite que a corrente através do condutor seja expressa em termos da probabilidade de transmissão dos elétrons através dele [5]. Neste formalismo, o condutor mesoscópico é modelado como uma região desordenada conectada a dois reservatórios de elétrons por meio de guias ideais, como mostrado na figura 1.6.

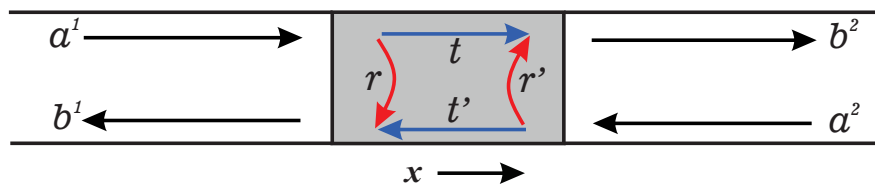


Figura 1.6: Modelo de uma amostra bidimensional conectada a 2 guias ideais. As setas indicam os sentidos das ondas entrando e saindo da amostra.

Nos guias ideais (sem desordem) a equação de Schrödinger pode ser facilmente resolvida, resultando em modos transversais, ou canais, devido ao confinamento na direção transversal. Considerando a existência de N canais abertos nos dois guias, a função de onda no guia l ($l = 1, 2$ para os guias da esquerda e direita, respectivamente) pode ser escrita como o vetor

N -dimensional

$$\Psi^{(l)}(x) = [\psi_1^{(l)}(x), \dots, \psi_N^{(l)}(x)]^T, \quad (1.4)$$

cuja n -ésima componente é uma combinação linear de ondas planas de número de onda longitudinal¹ k_n com coeficientes $a_n^{(l)}$ e $b_n^{(l)}$ indicando ondas entrando e saindo da amostra, respectivamente:

$$\psi_n^{(l)}(x) = a_n^{(l)} \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{\hbar k_n/m}} + b_n^{(l)} \frac{e^{-ik_n x}}{\sqrt{\hbar k_n/m}}. \quad (1.5)$$

As $2N$ amplitudes $b_n^{(l)}$, ($l = 1, 2$ e $n = 1, \dots, N$) das ondas que saem da amostra podem ser escritas como combinações lineares das $2N$ amplitudes $a_n^{(l)}$ das ondas que nele entram. Esta relação pode ser escrita na forma matricial

$$\mathbf{b} = \mathcal{S}\mathbf{a}, \quad (1.6)$$

em que $\mathbf{b} = (b_1^{(1)}, \dots, b_N^{(1)}, b_1^{(2)}, \dots, b_N^{(2)})$ é um vetor coluna com todas as amplitudes das ondas dirigidas para fora da amostra. O vetor \mathbf{a} é definido de forma análoga. A matriz $2N$ -dimensional \mathcal{S} é denominada matriz de espalhamento do sistema e tem a seguinte estrutura de blocos

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

em que \mathbf{r}, \mathbf{t} são matrizes $N \times N$ de reflexão e transmissão para partículas vindo da esquerda e, analogamente, \mathbf{r}', \mathbf{t}' são as matrizes de reflexão e transmissão para partículas incidindo pela direita, veja figura 1.6.

A matriz espalhamento conecta amplitudes das ondas incidentes com as dirigidas para longe do amostra. Também podemos relacionar as amplitudes no guia da esquerda ($l = 1$) com as do guia da direita ($l = 2$). Dessa forma, definimos os vetores coluna

$$\mathbf{c}^{(1)} = (a_1^{(1)}, \dots, a_N^{(1)}, b_1^{(1)}, \dots, b_N^{(1)})^T \quad (1.8)$$

$$\mathbf{c}^{(2)} = (b_1^{(2)}, \dots, b_N^{(2)}, a_1^{(2)}, \dots, a_N^{(2)})^T \quad (1.9)$$

em que as N primeiras (últimas) entradas contêm amplitudes de ondas dirigidas para a direita (esquerda). Esses vetores estão relacionados pela matriz de transferência

$$\mathbf{c}^{(2)} = \mathcal{M}\mathbf{c}^{(1)}. \quad (1.10)$$

¹Para um dado número de onda de Fermi k_F os números de onda longitudinais satisfazem $k_n^2 + (n\pi/W)^2 = k_F^2$, em que W é a largura do guia. Os diferentes valores de n para os quais k_n é real correspondem aos canais abertos

Apesar de matrizes de espalhamento e transferência serem descrições equivalentes da região desordenada, a matriz \mathcal{M} satisfaz a uma regra de composição multiplicativa, o que a torna conveniente para tratar regiões desordenadas em série, como mostrado na figura 1.7.

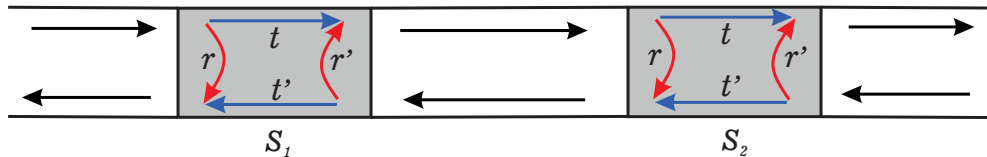


Figura 1.7: Modelo de duas amostras conectadas em sequência por um guia ideal.

Neste caso, se \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 são as matrizes de transferência dos condutores em série, a matriz de transferência do conjunto é dada por

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_2 \mathcal{M}_1. \quad (1.11)$$

Matrizes de espalhamento, em contraste, têm uma regra de composição mais complicada que envolve inversões matriciais [5]. Como veremos mais adiante, a regra de composição (1.11) faz com que a abordagem via matrizes de transferência seja particularmente útil para o estudo de transporte em fios quânticos.

Certas condições físicas impõem vínculos às matrizes de transferência e de espalhamento. Discutiremos a seguir os papéis da conservação de fluxo e da simetria de reversão temporal na estrutura da matriz de espalhamento.

1.5.1 Conservação de fluxo

As ondas planas na função de onda (1.5) são normalizadas para possuírem fluxo unitário. Dessa forma, a corrente no guia l pode ser escrita como

$$j_1 = \sum_n (|a_n^{(1)}|^2 - |b_n^{(1)}|^2) = \mathbf{a}^{(1)\dagger} \mathbf{a}^{(1)} - \mathbf{b}^{(1)\dagger} \mathbf{b}^{(1)} \quad (1.12)$$

$$j_2 = \sum_n (|b_n^{(2)}|^2 - |a_n^{(2)}|^2) = \mathbf{b}^{(2)\dagger} \mathbf{b}^{(2)} - \mathbf{a}^{(2)\dagger} \mathbf{a}^{(2)} \quad (1.13)$$

A conservação de corrente, $j_1 = j_2$, implica em

$$\mathbf{a}^{(1)\dagger} \mathbf{a}^{(1)} - \mathbf{b}^{(1)\dagger} \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(2)\dagger} \mathbf{b}^{(2)} - \mathbf{a}^{(2)\dagger} \mathbf{a}^{(2)},$$

que pode ser escrita na forma mais compacta

$$\mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}. \quad (1.14)$$

Utilizando a definição da matriz de espalhamento, eq. (1.6), temos

$$\mathbf{a}^\dagger \mathcal{S}^\dagger \mathcal{S} \mathbf{a} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \quad (1.15)$$

o que implica em

$$\mathcal{S}^\dagger \mathcal{S} = \mathbf{1}. \quad (1.16)$$

Portanto, a conservação de fluxo implica na unitariedade da matriz \mathcal{S} . A fim de encontrar o vínculo imposto por essa simetria na matriz \mathcal{M} , devemos reescrever as correntes (1.12) e (1.13) em termos das matrizes $\mathbf{c}^{(1)}$ e $\mathbf{c}^{(2)}$

$$j_1 = \mathbf{a}^{(1)\dagger} \mathbf{a}^{(1)} - \mathbf{b}^{(1)\dagger} \mathbf{b}^{(1)} = (\mathbf{a}^{(1)\dagger} \quad \mathbf{b}^{(1)\dagger}) \begin{pmatrix} \mathbf{1}_N & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1}_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^{(1)} \\ \mathbf{b}^{(1)} \end{pmatrix} = \mathbf{c}^{(1)\dagger} \Sigma_z \mathbf{c}^{(1)}, \quad (1.17)$$

$$j_2 = \mathbf{b}^{(2)\dagger} \mathbf{b}^{(2)} - \mathbf{a}^{(2)\dagger} \mathbf{a}^{(2)} = (\mathbf{b}^{(2)\dagger} \quad \mathbf{a}^{(2)\dagger}) \begin{pmatrix} \mathbf{1}_N & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1}_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{(2)} \\ \mathbf{a}^{(2)} \end{pmatrix} = \mathbf{c}^{(2)\dagger} \Sigma_z \mathbf{c}^{(2)}, \quad (1.18)$$

Dessa forma, a conservação de fluxo, $j_1 = j_2$, implica em

$$\mathbf{c}^{(1)\dagger} \Sigma_z \mathbf{c}^{(1)} = \mathbf{c}^{(2)\dagger} \Sigma_z \mathbf{c}^{(2)}. \quad (1.19)$$

Fazendo uso da equação 1.10, podemos escrever

$$\mathbf{c}^{(1)\dagger} \Sigma_z \mathbf{c}^{(1)} = \mathbf{c}^{(1)\dagger} \mathcal{M}^\dagger \Sigma_z \mathcal{M} \mathbf{c}^{(1)}, \quad (1.20)$$

o que implica em

$$\mathcal{M}^\dagger \Sigma_z \mathcal{M} = \Sigma_z. \quad (1.21)$$

Portanto, a conservação de fluxo faz com que a matriz de transferência seja pseudo-unitária. Na ausência de outras simetrias, teremos apenas esses vínculos para as matrizes \mathcal{S} e \mathcal{M} .

1.5.2 Reversão temporal

Invariância de reversão temporal na mecânica clássica é uma consequência da invariância das equações de movimento sob a transformação $t \rightarrow -t$, $\vec{r} \rightarrow \vec{r}$ e $\vec{p} = -\vec{p}$. Essa invariância é observada quando o hamiltoniano é uma função par nos momentos².

²O hamiltoniano de uma partícula de carga q num campo magnético contém o termo $(\vec{p} - q\vec{A})^2/2m$, deixando de ser par em \vec{p} . Dessa forma, um campo magnético quebra a simetria de reversão temporal.

Na mecânica quântica a reversão temporal está associada a um operador anti-unitário Θ , cuja ação nos operadores de posição e momento é dada por $\Theta\vec{R}\Theta^{-1} = \vec{R}$ e $\Theta\vec{P}\Theta^{-1} = -\vec{P}$. Diz-se que um sistema é invariante sob reversão temporal quando o hamiltoniano comuta com o operador de reversão temporal, $[H, \Theta] = 0$. Quando isso ocorre, temos dois casos de interesse:

1.5.2.1 Partículas sem spin

Em situações onde o spin pode ser ignorado, o operador de reversão temporal na representação de coordenadas torna-se o operador de conjugação complexa³. No problema de espalhamento representado na figura 1.6, a conjugação complexa inverte o sentido de propagação das ondas planas, trocando os papéis das amplitudes de acordo com $\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{a}^*$ e $\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{b}^*$. Desta forma, a matriz de espalhamento do problema revertido no tempo satisfaz

$$\mathbf{a}^* = \mathcal{S}\mathbf{b}^*. \quad (1.22)$$

Combinando (1.22) com a definição (1.6), vemos que a simetria de reversão temporal impõe o seguinte vínculo à matriz de espalhamento

$$\mathcal{S}\mathcal{S}^* = \mathbf{1}, \quad (1.23)$$

que combinada com a condição de unitariedade (1.16), resulta em

$$\mathcal{S}^T = \mathcal{S}. \quad (1.24)$$

Portanto, uma vez que o sistema preserva simetria de reversão temporal, a matriz de espalhamento \mathcal{S} desse sistema é, além de unitária, simétrica.

A troca dos papéis entre ondas entrando e saindo do sistema afeta os vetores de amplitudes usados na definição da matriz de transferência. Os vetores de amplitudes nos guias 1 e 2 se modificam de acordo com

$$\mathbf{c}^{(l)} \rightarrow \tilde{\mathbf{c}}^{(l)} = \Sigma_x \mathbf{c}^{(l)*}, \quad l = 1, 2. \quad (1.25)$$

com

$$\Sigma_x = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1}_N \\ \mathbf{1}_N & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

³Isto equivale a dizer que, para um potencial real, se $\psi(x, t)$ é solução da equação de Schrödinger, a solução revertida no tempo (com $t \rightarrow -t$) é obtida a partir da primeira por conjugação complexa $\psi^*(x, -t)$.

Dessa forma, a matriz de transferência para o sistema revertido no tempo satisfaz

$$\Sigma_x \mathbf{c}^{(2)*} = \mathcal{M} \Sigma_x \mathbf{c}^{(1)*}. \quad (1.27)$$

Combinando (1.27) com a definição (1.27), temos

$$\mathcal{M}^* = \Sigma_x \mathcal{M} \Sigma_x. \quad (1.28)$$

1.5.2.2 Partículas de spin 1/2

Em sistemas em que o grau de liberdade de spin torna-se relevante, como em sistemas com forte interação spin-órbita, cada modo na equação (1.4) é representado pelo spinor

$$\psi_n^{(l)}(x) = \begin{pmatrix} a_{n,\uparrow}^{(l)} \\ a_{n,\downarrow}^{(l)} \end{pmatrix} \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{\hbar k_n/m}} + \begin{pmatrix} b_{n,\uparrow}^{(l)} \\ b_{n,\downarrow}^{(l)} \end{pmatrix} \frac{e^{-ik_n x}}{\sqrt{\hbar k_n/m}}. \quad (1.29)$$

O operador de reversão temporal, por sua vez, é representado por [17]

$$\Theta = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{K}, \quad (1.30)$$

onde \mathcal{K} é o operador de conjugação complexa. Dessa forma, sua ação no spinor (1.29), além de conjugar amplitudes, inverte os sentidos dos spins. Efetuando esta operação para cada modo, os vetores de amplitudes dentro do guia l mudam de acordo com $\mathbf{a}^{(l)} \rightarrow \mathbf{K} \mathbf{b}^{(l)*}$ e $\mathbf{b}^{(l)} \rightarrow \mathbf{K} \mathbf{a}^{(l)*}$, onde introduzimos a matriz

$$\mathbf{K} = \mathbf{1}_N \otimes \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & & & 0 \\ 1 & 0 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ 0 & & & & 0 & -1 \\ & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Devido aos graus de liberdade de spin, as matrizes de espalhamento, de dimensão $4N$, satisfazem

$$\mathcal{S} \mathbf{V} \mathcal{S}^* = \mathbf{V}. \quad (1.32)$$

A matriz de transferência, por sua vez, satisfaz

$$\mathcal{M}^* = \mathbf{W} \mathcal{M} \mathbf{W}^T. \quad (1.33)$$

Nessas equações introduzimos as matrizes $4N \times 4N$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{K} \\ \mathbf{K} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (1.34)$$

Na próxima seção mostraremos como o formalismo de espalhamento pode ser usado no estudo das propriedades de transporte como a condutância de uma amostra mesoscópica.

1.6 Formalismo de Landauer

O estudo das propriedades de transporte em uma amostra unidimensional com dimensões mesoscópicas foi inaugurado pelos trabalhos apresentados por Landauer [18, 19]. Em sua visão do problema, a amostra passa a ser vista como um centro espalhador e a condutância passa a ser interpretada como uma medida do coeficiente de transmissão. Nesse sentido, Landauer introduziu o conceito de reservatórios, que são conectados na região de espalhamento para garantir que o fluxo de corrente através da amostra seja constante, como ilustrado na figura 1.8. Esses reservatórios são grandes em relação à amostra e estão em

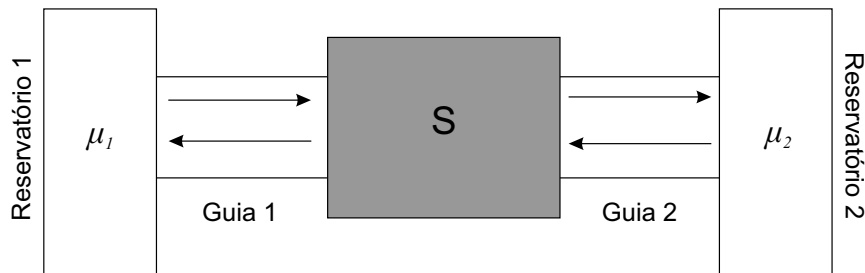


Figura 1.8: Modelo de reservatório segundo o formalismo de Landauer. A região S é a amostra, tratada como um centro espalhador e é conectada aos reservatórios por guias ideais (Guia 1 e Guia 2).

equilíbrio térmico. Eles são caracterizados por sua temperatura T e seu potencial químico μ_i (com $i = 1, 2$) e são ligados à amostra por guias ideais com N modos de propagação transversais, também chamados de canais. Dentro dos reservatórios, os elétrons obedecem à distribuição de Fermi-Dirac

$$f_i(E) = \frac{1}{\exp((E - \mu_i)/k_B T) + 1}. \quad (1.35)$$

O valor esperado do operador corrente nesse sistema é descrito por [20, 21]

$$\langle I \rangle = \frac{2e}{h} \int_0^\infty dE [f_1(E) - f_2(E)] \text{Tr} \mathbf{t}^\dagger(E) \mathbf{t}(E). \quad (1.36)$$

onde f_1 e f_2 são as distribuições de cada reservatório e \mathbf{t} é a matriz de transmissão. Garantindo que exista uma diferença de potencial V de tal forma que $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, a condutância nesse sistema, definida por $G = \lim_{V \rightarrow 0} \langle I \rangle / V$, pode ser escrita como

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_0^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \text{Tr} \mathbf{t}^\dagger(E) \mathbf{t}(E). \quad (1.37)$$

No caso específico em que $T = 0$ a expressão para a condutância simplifica-se para

$$G = G_0 \text{Tr}(\mathbf{t}\mathbf{t}^\dagger), \quad (1.38)$$

onde $G_0 = 2e^2/h$ é o quantum de condutância. Neste caso, apenas os elétrons no nível de Fermi contribuem para a condutância de modo que as matrizes \mathbf{t} são calculadas com $E = E_F$. A matriz hermitiana $\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}$ pode ser diagonalizada e a condutância pode ser escrita como a soma de seus autovalores τ_i , denominados autovalores de transmissão. Além disso, podemos definir a condutância adimensional, $g \equiv G/G_0$, de modo que

$$g = \text{Tr}(\mathbf{t}\mathbf{t}^\dagger) = \sum_{i=1}^N \tau_i. \quad (1.39)$$

A unitariedade da matriz S implica que os autovalores de transmissão satisfazem $0 \leq \tau_i \leq 1$. No caso de um sistema balístico devemos ter $\tau_i = 1$ de modo que $g = N$. Também se pode escrever a condutância em termos da matriz de transferência a partir da fórmula de Pichard [22]

$$g = 2 \text{Tr}[2 + \mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger + (\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger)^{-1}]^{-1}. \quad (1.40)$$

A pseudo-unitariedade da matriz de transferência, eq. (1.21), implica que as matrizes $\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger$ e $(\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger)^{-1}$ possuem os mesmos autovalores. Dessa forma, conclui-se que os autovalores de $\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger$ ocorrem aos pares $\{\lambda_i, \lambda_i^{-1}\}$ de modo que podemos escrever

$$g = 4 \sum_{i=1}^N \frac{1}{2 + \lambda_i + \lambda_i^{-1}}. \quad (1.41)$$

Escolhendo a parametrização $\lambda_i = e^{2x_i}$, podemos escrever

$$g = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\cosh^2 x_i}. \quad (1.42)$$

Dessa forma, os autovalores de transmissão podem ser escritos como $\tau_i = 1/\cosh^2 x_i$, com $0 \leq x_i < \infty$. Esta relação será usada na próxima seção, no estudo da condutância em um fio desordenado.

1.7 Teoria de Matrizes Aleatórias

Em meados do século XX, os trabalhos relacionados à descrição das propriedades estatísticas dos níveis de energia devido ao espalhamento de nêutrons lentos por núcleos pesados na Física Nuclear ganhou uma ferramenta crucial, a Teoria de Matrizes Aleatórias (TMA). Descrever esses sistemas era praticamente impossível, pois o sistema em si envolve um número muito grande de graus de liberdade, tornando inviável a construção de um hamiltoniano, além da descrição do processo de espalhamento ser bastante complexa. Na tentativa de resolver esses problemas, o Físico Eugene Wigner introduziu o conceito de Matrizes Aleatórias⁴ com o intuito de mapear o hamiltoniano do núcleo em uma matriz aleatória, onde dependendo de certas propriedades e simetrias, essa matriz pertenceria a um determinado ensemble. O uso da TMA não se limitou apenas aos trabalhos área de física nuclear e se estendeu nos mais diversos ramos da física, como: física molecular, gravitação quântica, casos quântico, óptica, informação quântica entre outros [6, 23]. Recentemente, na área de física mesoscópica, mais precisamente na descrição das propriedades de transporte, a TMA se consolidou como uma das principais ferramentas. Uma descrição detalhada do uso da TMA em problemas de transporte quântico pode ser encontrada na referência [24].

A teoria de matrizes aleatórias, de uma maneira geral, estuda propriedades estatísticas dos autovalores de matrizes com elementos distribuídos aleatoriamente. Ela tem sido aplicada com sucesso a sistemas desordenados ou caóticos. Esta formulação pode ser usada no estudo de níveis de energia (autovalores de um hamiltoniano) de um sistema fechado ou autovalores de transmissão (autovalores de $\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}$) em um sistema aberto. A grande virtude da formulação reside na perda de relevância estatística de informações microscópicas, como detalhes da distribuição de impurezas. Dessa forma, resultados universais são obtidos a partir de ensembles que dependem apenas de certas simetrias básicas do sistema, como reversão temporal e rotação de spin.

A estatística de níveis para uma cavidade caótica fechada, introduzida nos trabalhos

⁴O conceito de Matrizes Aleatórias foi introduzido em 1928 por Wishart, mas ganhou notoriedade apenas em 1950 com os trabalhos de Wigner em física nuclear.

de Wigner e Dyson [25–27], no contexto da física nuclear, pode ser obtida a partir de um ensemble de matrizes hermitianas \mathbf{H} , $M \times M$, cujos elementos são variáveis aleatórias independentes que obedecem a uma distribuição gaussiana do tipo

$$P(\mathbf{H}) = C \exp[-\beta V(\mathbf{H})], \quad (1.43)$$

em que C é uma constante de normalização, $V(\mathbf{H}) \propto \mathbf{H}^2$ e o índice β , introduzido por Dyson, depende das simetrias do sistema e indica o número de graus de liberdade das entradas da matriz \mathbf{H} , que podem assumir valores reais ($\beta = 1$), complexos ($\beta = 2$) ou quatérnions reais⁵ ($\beta = 4$). Dessa forma, temos três ensembles que descrevemos a seguir:

1. **Ensemble Gaussiano Ortogonal** ($\beta = 1$): \mathbf{H} possui elementos reais e descreve sistemas com simetria de reversão temporal (SRT) e simetria de rotação de spin (SRS).
2. **Ensemble Gaussiano Unitário** ($\beta = 2$): \mathbf{H} possui elementos complexos e descreve sistemas nos quais a simetria de reversão temporal é quebrada pela aplicação de um campo magnético.
3. **Ensemble Gaussiano Simplético** ($\beta = 4$): \mathbf{H} possui elementos quatérnionicos reais e descreve sistemas com simetria de reversão temporal, porém com quebra de simetria de rotação de spin devido à forte interação spin-órbita.

A classificação é baseada no fato de que os autovalores E_1, E_2, \dots, E_M da matriz hermitiana \mathbf{H} correspondem a uma matriz ortogonal (unitária, simplética) para $\beta = 1(2, 4)$. A distribuição conjunta dos autovalores é dada por

$$P(\{E\}) = C \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta \prod_{i=1}^N e^{-\beta V(E_j)}. \quad (1.44)$$

Dyson também estudou ensembles de matrizes unitárias, cujos autovalores $e^{i\theta_n}$, $n = 1, \dots, M$ se distribuem no círculo unitário. Daí o nome ensembles circulares. Em problemas de transporte quântico, eles são relevantes na modelagem da matriz de espalhamento em cavidades balísticas caóticas [28, 29]. Conectados a reservatórios de elétrons por meio de contatos ideais, esses pontos quânticos caóticos são descritos por uma matriz \mathbf{S} com densidade de

⁵Um quaternion pode ser representado por uma matriz 2×2 escrita como uma combinação linear da matriz identidade e das três matrizes de Pauli: $q = a\mathbf{1} + ib\sigma_x + jc\sigma_y + kd\sigma_z$. Um quatérnion é dito real se os coeficientes forem números reais.

probabilidade constante. Neste caso, a fim de estudar observáveis de transporte, é mais conveniente o estudo da distribuição dos autovalores de transmissão em vez das autofases da matriz unitária. No caso de um sistema de dois terminais, idealmente conectados a guias com N canais abertos, os autovalores são variáveis aleatórias com distribuição conjunta dada por

$$P(\{\tau\}) = C \prod_{i < j} |\tau_i - \tau_j|^\beta \prod_{i=1}^N \tau_i^{-1+\beta/2} \quad (1.45)$$

em que C é uma constante de normalização e β é o índice de simetria de Dyson com a mesma interpretação dos ensembles gaussianos quanto à presença ou ausência de SRT e SRS. Os ensembles também são denominados ortogonal, unitário e simplético para os valores $\beta = 1, 2,$ e 4 , respectivamente. A classificação dos ensembles das matrizes \mathbf{H} e \mathbf{S} é resumida na tabela

β	SRT	SRS	\mathbf{H}	\mathbf{S}	Ensemble
1	✓	✓	real e simétrica	unitária e simétrica	Ortogonal
2	✗	✓ / ✗	herminiana	unitária	Unitário
4	✓	✗	quaternion auto-dual	unitária e autodual	Simplético

Tabela 1.1: Classificação dos ensembles gaussianos e circulares quanto à presença (✓) ou ausência (✗) das simetrias de reversão temporal (SRT) e de rotação de spin (SRS). A tabela também mostra o índice de simetria de Dyson e as estruturas das matrizes envolvidas.

Existem outros ensembles de matrizes aleatórias fora do esquema de classificação de Wigner-Dyson que se aplicam em sistemas supercondutores e com simetria quiral [30, 31]. O estudo de tais sistemas está fora do escopo dessa dissertação.

1.7.1 Equação DMPK

Outra aplicação das ideias da teoria de matrizes aleatórias em transporte quântico se dá na descrição de fios desordenados. Um fio é um condutor coerente de comprimento L e largura W , tal que $L \gg W$, compatível com a existência de N canais abertos. Assim como em cavidades caóticas, a presença de desordem torna os autovalores de transmissão variáveis aleatórias e, conseqüentemente, a condutância. No entanto, a condutância média

deve depender do comprimento do fio, um parâmetro não acessível a partir dos ensembles circulares.

No caso do fio, não existe uma expressão fechada para distribuição conjunta de autovalores de transmissão, válida para todas as classes de universalidade. No entanto, pode-se obter informação sobre esta distribuição a partir da propriedade multiplicativa das matrizes de transferência. A ideia do método é entender como a distribuição de autovalores de transmissão para um fio de comprimento L é alterada ao adicionarmos uma pequena “fatia” de comprimento δL , macroscopicamente pequena mas suficientemente grande para conter muitas impurezas, como mostra a figura 1.9.



Figura 1.9: Amostra de comprimento L adicionada de uma “fatia” de comprimento δL .

À medida que mais fatias são adicionadas, os autovalores de transmissão executam um “movimento browniano” em que o comprimento do fio faz o papel do tempo. A equação de Fokker-Planck que descreve a evolução da distribuição conjunta dos autovalores de transmissão com o comprimento do fio é conhecida como equação DMPK⁶ [32]. Para um fio com N canais abertos a equação DMPK é dada por

$$\frac{\partial P}{\partial s} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_i} D^{(1)}(\{\tau\}) + \frac{\partial^2}{\partial \tau_i^2} D^{(2)}(\{\tau\}) \right) P \quad (1.46)$$

com

$$D^{(1)}(\{\tau\}) = \tau_i - \frac{2}{\gamma} \tau_i \left(1 - \tau_i + \frac{\beta}{2} \sum_{j \neq i} \frac{\tau_i + \tau_j - 2\tau_i \tau_j}{\tau_i - \tau_j} \right) \quad (1.47)$$

$$D^{(2)}(\{\tau\}) = \frac{4}{\gamma} \tau_i^2 (1 - \tau_i), \quad (1.48)$$

em que $\gamma = \beta N + 2 - \beta$ e $s = L/l$ é o comprimento do fio em unidades de livre caminho médio. A equação DMPK pode ser colocada numa forma mais compacta por uma mudança de

⁶Em referência aos autores Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar.

variáveis $\tau_i = (1 + \lambda_i)^{-1}$, resultando em

$$\frac{\partial P}{\partial s} = \frac{2}{\gamma} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \lambda_i (1 + \lambda_i) J \frac{\partial P}{\partial \lambda_i} J, \quad (1.49)$$

$$J = \prod_{i < j} |\lambda_j - \lambda_i|^\beta. \quad (1.50)$$

Esta equação, deduzida inicialmente por Dorokov para $\beta = 2$, depois por Mello, Pereyra e Kummur para $\beta = 1$ e, finalmente, por Macêdo e Chalker para $\beta = 4$, têm sido usada extensivamente no estudo de condutores normais quase unidimensionais desordenados. Posteriormente a teoria foi estendida a outras classes de universalidade, como em sistemas com simetria de subrede [33] ou com interface metal normal-supercondutor [34]. O conhecimento da distribuição de autovalores permite, em princípio, a obtenção de propriedades estatísticas de observáveis de transporte. Os momentos da condutância, por exemplo, são dados por

$$\langle g^m \rangle(s) = \int_0^\infty d\lambda_1 \dots \int_0^\infty d\lambda_N \lambda_N \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{1 + \lambda_n} \right)^m P(\{\lambda\}, s). \quad (1.51)$$

Embora a solução exata da equação DMPK seja conhecida apenas para o caso $\beta = 2$, pode-se obter resultados aproximados, para um β arbitrário, em alguns regimes de interesse. Por exemplo, no caso $N \gg 1$ podemos distinguir três regimes: O balístico para $L \lesssim l_e$, o difusivo para $l_e \lesssim L \lesssim \xi$ e o localizado para $L \gtrsim \xi$, em que $\xi = \beta N l_e$ é o comprimento de localização. Alguns desses resultados são listados abaixo:

1. **Regime Balístico** $L \lesssim l_e$ ($s \lesssim 1$): Todos os autovalores de transmissão são próximos de 1 e a condutância $g \simeq N$. Nesse regime, as flutuações na condutância são muito pequenas e a $\text{varg} \rightarrow 0$.
2. **Regime Difusivo** $l_e \lesssim L \lesssim \xi$ ($1 \lesssim s \lesssim \beta N$): As propriedades estatísticas da condutância são expressas em termos de uma expansão para N grande. A distribuição de condutância é gaussiana, com média e variância dadas por

$$\langle g \rangle = \frac{N}{1 + s} + \frac{\beta - 2}{3\beta} \frac{s^3}{(1 + s)^3} + \mathcal{O}(N^{-1}), \quad (1.52)$$

$$\text{varg} = \frac{2}{15\beta} \left(1 - \frac{1 + 6s}{(1 + s)^6} \right) + \mathcal{O}(N^{-1}). \quad (1.53)$$

O termo de ordem $\mathcal{O}(N)$ em $\langle g \rangle$ corresponde à lei de Ohm. De fato, para $L \gg l$ ($s \gg 1$), a condutância decresce linearmente com L : $g_0 \equiv N/s = Nl/L \propto W/L$. O termo de

ordem $\mathcal{O}(1)$ é conhecido como correlação de localização (anti-localização) fraca para $\beta = 1$ ($\beta = 4$), uma vez que provoca uma diminuição (aumento) da condutância clássica. No limite $s \gg 1$ a correção quântica $\delta g \equiv \langle g \rangle - g_0$ e variância da variância são universais

$$\delta g = \frac{\beta - 2}{3\beta} + \mathcal{O}(N^{-1}), \quad (1.54)$$

$$\text{var}g = \frac{2}{15\beta} + \mathcal{O}(N^{-1}), \quad (1.55)$$

uma vez que só dependem do índice de simetria e não de parâmetros característicos da amostra como N , l ou L .

3. **Regime Localizado** $L \gtrsim \xi$ ($s \gtrsim \beta N$): Todos os autovalores de transmissão decaem exponencialmente. A condutância é determinada pelo maior autovalor de transmissão τ_1 . Nesse regime, observa-se que a distribuição da condutância é log-normal⁷ de média e variância dadas por

$$-\langle \ln(g) \rangle = (1/2)\text{var}[\ln(g)] = 2L/\xi \quad (1.56)$$

1.7.1.1 Solução exata da equação DMPK

A equação de Fokker-Planck pode ser mapeada numa equação de Schrödinger com tempo imaginário [35]. Explorando essa conexão, Beenakker e Rejsei [36] obtiveram uma solução exata para a equação DMPK, no caso $\beta = 2$, mostrando a equivalência desta equação com a equação de Schrödinger para um sistema de N férmions não interagentes em uma dimensão. Neste trabalho eles introduziram as variáveis $\{x_n\}$, relacionadas aos autovalores de transmissão por $\tau_n = 1/\cosh^2 x_n$, $x_n \geq 0$, de modo que a equação DMPK assume a forma de uma equação de Fokker-Planck com coeficiente de difusão constante

$$\frac{\partial P}{\partial s} = \frac{1}{2\gamma} \sum_{n=1}^N \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial P}{\partial x_n} + \beta P \frac{\partial \Omega}{\partial x_n} \right), \quad (1.57)$$

com

$$\Omega = - \sum_{i < j} \ln |\sinh^2 x_i - \sinh^2 x_j| - \frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^N \ln |2x_i|. \quad (1.58)$$

⁷Uma variável aleatória X tem distribuição log-normal quando seu logaritmo $\ln(X)$ tem distribuição normal.

A solução desta equação com condição inicial balística

$$\lim_{s \rightarrow 0} P(\{x\}, s) = \prod_{i=1}^N \delta(x_i - 0^+), \quad (1.59)$$

de modo que os autovalores de transmissão sejam iguais a 1 para $s \ll 1$, é dada por

$$P(\{x\}, s) = C(s) \prod_{i < j} (\sinh^2 x_i - \sinh^2 x_j) \prod_{i=1}^N \sinh 2x_i \\ \times \det \left[\int_0^\infty dk e^{-k^2 s/4N} \tanh \left(\frac{1}{2} \pi k \right) k^{2m-1} P_{(1/2)(ik-1)}(\cosh 2x_n) \right], \quad (1.60)$$

em que $C(s)$ é uma constante de normalização, $P_{(ik-1)/2}$ são as funções de Legendre cônicas [37] e $\det[a_{n,m}]$ indica o determinante da matriz $N \times N$ com elementos $a_{n,m}$.

De posse da solução exata, usando o método das funções biortogonais, Frahm [38] obteve expressões fechadas para os dois primeiros momentos da condutância

$$\langle g \rangle = 2 \sum_{m=0}^{N-1} \int_0^\infty dk e^{-[(1+2m)^2+k^2]s/4N} k \tanh \left(\frac{\pi k}{2} \right) \frac{(2m+1)}{k^2 + (1+2m)^2} a(N, m, k), \quad (1.61)$$

$$\langle g^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{N-1} \int_0^\infty dk e^{-[(1+2m)^2+k^2]2/4N} k \tanh \left(\frac{\pi k}{2} \right) (2m+1) a(N, m, k), \quad (1.62)$$

onde foi introduzido o coeficiente

$$a(N, m, k) = \frac{\Gamma(N + \frac{1}{2} + i\frac{k}{2}) \Gamma(N + \frac{1}{2} - i\frac{k}{2})}{\Gamma(N - m) \Gamma(N - m + 1)}. \quad (1.63)$$

Os resultados (1.60), (1.61) e (1.62) são válidos para todas as escalas de comprimento desde o regime metálico $s \ll N$ até o localizado $s \gg N$. Por outro lado, no regime difusivo, $1 \ll s \ll N$, a solução pode ser simplificada. Inicialmente introduzida por Beenakker e Rejsei [36] para $\beta = 2$ e posteriormente generalizada por Caselle [39] para $\beta = 1$ e $\beta = 4$, esta aproximação pode ser escrita como

$$P(\{x\}, s) = C(s) \prod_{i < j} |(\sinh^2 x_i - \sinh^2 x_j)(x_i^2 - x_j^2)|^{\beta/2} \\ \times \prod_{i=1}^N \exp[-(\beta+2)x_i^2/2s] (x_i \sinh(2x_i))^{1/2}. \quad (1.64)$$

Esta aproximação serviu de base para simulações numéricas baseadas no método de Monte Carlo desenvolvidas na referência [1], na qual os autores estudaram a distribuição da condutância na região de transição entre o regime difusivo e o localizado. No próximo capítulo, discutiremos detalhadamente a utilização do método de Monte Carlo na teoria DMPK, em particular, verificaremos resultados para a média e variância da condutância mostrados neste capítulo.

CAPÍTULO 2

Métodos Numéricos

No capítulo anterior vimos que a densidade de autovalores de um fio desordenado é determinada pela equação DMPK, que descreve sua evolução com o comprimento do fio. A construção da solução exata dessa equação não é uma tarefa trivial, sendo realizada com sucesso apenas no caso unitário. No entanto, no regime difusivo, existem aproximações válidas para todas classes de universalidade. Apesar da existência dessas expressões, propriedades estatísticas de observáveis, como a condutância, são de conhecimento limitado. Por exemplo, não há na literatura um resultado analítico para a distribuição da condutância $P(g)$ em função do comprimento L do fio. Esta lacuna motiva uma abordagem numérica ao problema. Com este intuito, apresentaremos neste capítulo, dois métodos numéricos complementares. O primeiro, macroscópico, baseado em simulações de Monte Carlo construídas diretamente a partir da solução DMPK. O segundo, microscópico, baseado na solução numérica da equação de Schrödinger para o fio desordenado, o que equivale a um modelo *tight-binding* com desordem de Anderson. Nas próximas seções apresentaremos os dois métodos e faremos comparações entre os resultados obtidos através deles.

2.1 Método de Monte Carlo

A expressão “Método de Monte Carlo” refere-se ao procedimento numérico que busca a solução de um problema por uma abordagem que envolve o sorteio de números aleatórios. Métodos de Monte Carlo encontram aplicações em problemas diversos, desde o cálculo de integrais multidimensionais [40] até a simulação de sistemas físicos baseados numa descrição probabilística, tais como caminhantes aleatórios, formação de agregados e processos de percolação [41].

O método é particularmente útil para o estudo de propriedades de sistemas em equilíbrio termodinâmico. Nesta seção, discutiremos brevemente como o método pode ser usado para o cálculo de médias no ensemble canônico, que descreve um sistema de N partículas num volume fixo V em contato com um reservatório térmico com temperatura fixa T . A probabilidade do sistema ser encontrado num microestado s de energia E_s é dada por

$$P_s = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_s}, \quad (2.1)$$

em que $\beta = 1/kT$, sendo k a constante de Boltzmann e Z é a função de partição definida por

$$Z = \sum_s e^{-\beta E_s}, \quad (2.2)$$

em que a soma é efetuada sobre todos os microestados acessíveis do sistema. Dessa forma, a média de uma quantidade física arbitrária A é obtida por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s A_s e^{-\beta E_s}, \quad (2.3)$$

em que A_s é o valor da quantidade A no microestado s . Em geral o número de microestados N é muito grande. Numa simulação de Monte-Carlo podemos gerar apenas um número n do total de microestados. Dessa forma, a média é aproximada por

$$\langle A \rangle \approx \langle A \rangle_n = \frac{\sum_{s=1}^n A_s e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^n e^{-\beta E_s}}. \quad (2.4)$$

Um procedimento de Monte-Carlo para o cálculo da média consiste em gerar cada microestado s aleatoriamente, calcular as quantidades E_s , A_s e $e^{-\beta E_s}$, inserindo-as nas somas em (2.4). No entanto, este procedimento pode ser muito ineficiente: uma vez gerado um estado improvável, sua contribuição na somas em (2.4) pode ser desprezível. Dessa forma,

deve-se adotar uma estratégia de amostragem por importância, gerando-se estados com peso estatístico maior. O algoritmo de Metropolis [40], executa essa amostragem por importância gerando microestados s com probabilidade de Boltzmann

$$p_s = \frac{e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^n e^{-\beta E_s}}. \quad (2.5)$$

Com essa escolha, a estimativa $\langle A \rangle_n$ para a média $\langle A \rangle$ é calculada a partir da média aritmética simples

$$\langle A \rangle_n = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n A_s. \quad (2.6)$$

Neste método, partimos de uma configuração inicial e geramos aleatoriamente uma sequência de novas configurações. Cada configuração nesta sequência depende apenas da configuração anterior. Portanto, as configurações seguem uma cadeia de Markov com probabilidade de transição que depende apenas da diferença de energia entre os estados inicial e final

$$W(i \rightarrow j) = \min(1, e^{-\beta \Delta E}),$$

em que $\Delta E = E_j - E_i$. Com esta escolha para a probabilidade de transição o sistema, após um número suficiente de transições, relaxa para o equilíbrio, em que os estados seguem a distribuição de Boltzmann. O algoritmo de Metropolis consiste nos seguintes passos:

1. Escolha um microestado inicial s_i e calcule sua energia E_{s_i} ;
2. Escolha um novo microestado de teste s_j e calcule sua energia E_{s_j} ;
3. Calcule a diferença de energia entre os estados $\Delta E = E_{s_j} - E_{s_i}$;
4. Se $\Delta E \leq 0$, aceite o novo microestado s_j e vá para o passo 8;
5. Se $\Delta E > 0$, calcule a quantidade $w = e^{-\beta \Delta E}$;
6. Gere um número aleatório r uniformemente distribuído no intervalo $0 \leq r \leq 1$;
7. Se $r \leq w$, aceite o novo microestado, caso contrário o mantenha o microestado anterior;
8. Determine o valor da quantidade física desejada;
9. Repita os passos de 2 a 8 até obter número grande de microestados;
10. Calcule a média sobre os microestados.

2.1.1 Método de Monte Carlo para fios desordenados

O método de Monte Carlo foi introduzido no contexto de teoria de matrizes aleatórias no estudo de propriedades estatísticas dos autovalores de matrizes aleatórias hermitianas e unitárias [42]. Em problemas de transporte quântico, o método foi adaptado para o estudo de fios quânticos desordenados [1, 43] e de pontos quânticos caóticos [44]. Em todos os casos, explora-se a conexão entre as densidades de probabilidade dos “níveis” dos respectivos modelos com o Hamiltoniano do gás de Coulomb, como descreveremos a seguir no caso específico da equação DMPK.

Vimos no capítulo anterior que a evolução da densidade de níveis $P(x_1, \dots, x_N; s)$ em função do comprimento s do fio desordenado é governada pela equação DMPK. Esta equação tem solução exata apenas para o ensemble unitário ($\beta = 2$). No entanto, no regime difusivo $1 \ll s \ll N$, existe uma aproximação para a solução, válida para todas as classes de simetria, dada por

$$P_\beta(\mathbf{x} = x_1, x_2, \dots, x_N; s) = C(s) \prod_{i < j} |(\sinh^2 x_i - \sinh^2 x_j)(x_i^2 - x_j^2)|^{\beta/2} \times \prod_{i=1}^N \exp[-(\beta + 2)x_i^2/2s] (x_i \sinh(2x_i))^{1/2}, \quad (2.7)$$

em que $C(s)$ é uma constante de normalização. Esta distribuição pode ser convenientemente reescrita na forma de uma distribuição de Gibbs

$$P(\mathbf{x}, s) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x}, s)}, \quad (2.8)$$

em que o índice de simetria β faz papel de inverso de temperatura e

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}; s) = \sum_{i < j}^N U(x_i, x_j) + \sum_i^N V(x_i; s) \quad (2.9)$$

pode ser interpretado como o hamiltoniano de um gás N partículas em uma dimensão nas posições x_1, x_2, \dots, x_N , interagindo através do potencial

$$U(x_i, x_j) = -\frac{1}{2} \ln |2x_i - 2x_j| - \frac{1}{2} \ln |x_i^2 - x_j^2| \quad (2.10)$$

e confinadas pelo potencial

$$V(x; s) = \frac{\gamma}{2s\beta} x^2 - \frac{1}{2\beta} \ln |x(2x)|, \quad (2.11)$$

com $\gamma = \beta N + 2 - \beta$.

O algoritmo de Metropolis pode ser implementado para esse gás com as seguintes adaptações:

- O microestado do sistema é dado pelo vetor aleatório (x_1, \dots, x_N)
- As mudanças no microestado correspondem a mudanças nas posições nas partículas $(x_1, \dots, x_N) \rightarrow (x_1 + \Delta x_1, \dots, x_N + \Delta x_N)$
- A energia associada a cada configuração é calculada a partir do Hamiltoniano \mathcal{H}
- Para cada configuração obtemos a condutância a partir de

$$g = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\cosh^2 x_n} \quad (2.12)$$

Devemos repetir esse procedimento um grande número de passos de Monte Carlo (NPMC) para que o sistema relaxe para o equilíbrio. Em nosso caso, utilizamos a quantidade NPMC = 10^7 , tendo desprezado um certo número de passos iniciais (da ordem de 30% do NPMC) para garantir que as médias fossem calculadas a partir de configurações de equilíbrio. O gráfico 2.5 evidencia a escolha do NPMC. Na próxima seção apresentaremos alguns resultados da teoria DMPK obtidos a partir da simulação de Monte Carlo.

2.1.2 Resultados para Monte Carlo

Na figura 2.1 mostramos a evolução da média e variância da condutância g em função do comprimento s para o caso unitário ($\beta = 2$) para fios com $N = 5, 10$ e 20 canais abertos. Os resultados da simulação são representados pelos símbolos (círculos, quadrados e diamantes), enquanto a curva contínua corresponde aos resultados exatos dados pelas equações (1.52) e (1.53). A excelente concordância entre a simulação e os resultados exatos indica a validade da aproximação (2.7). Note que $\langle g \rangle \rightarrow N$ e $\text{var}(g) \rightarrow 0$ para $s \rightarrow 0$, o que indica o regime balístico. No regime difusivo, $1 \leq s \leq N$, a variância tende ao valor $1/15$ (mostrado na figura como a linha pontilhada vermelha) à medida que N cresce. Fizemos a mesma análise para o caso ortogonal ($\beta = 1$). Embora não existam na literatura resultados exatos para esse caso, acreditamos que os resultados da aproximação (2.7), mostrados na figura 2.2, sejam tão bons quanto os obtidos no caso unitário. Note a convergência de $\text{var}(g)$ para o valor $2/15$, no regime difusivo, à medida que N cresce.

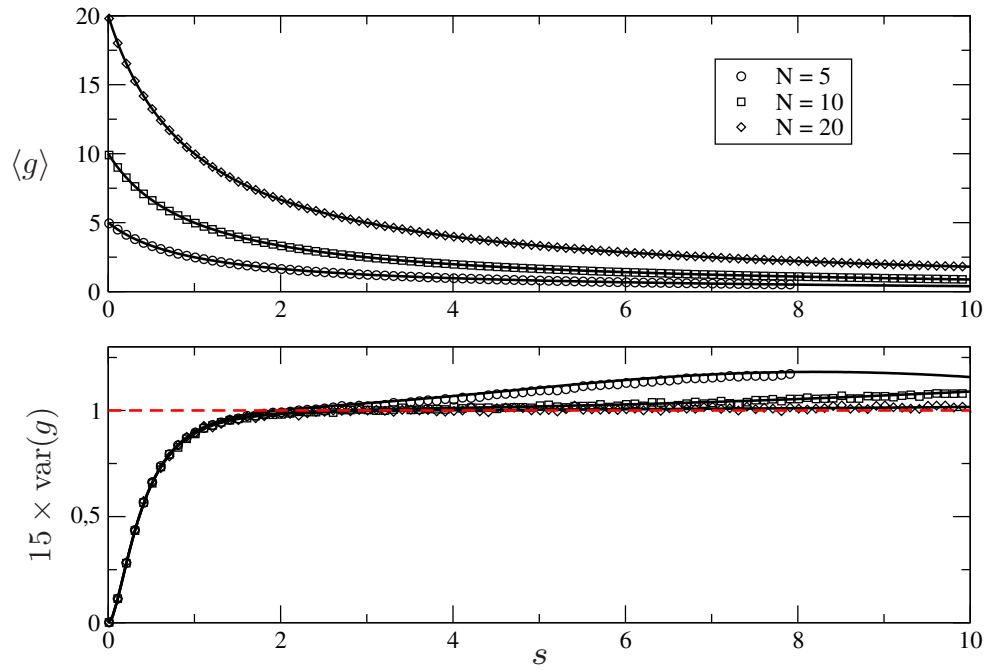


Figura 2.1: Média e variância da condutância para o caso unitário ($\beta = 2$).

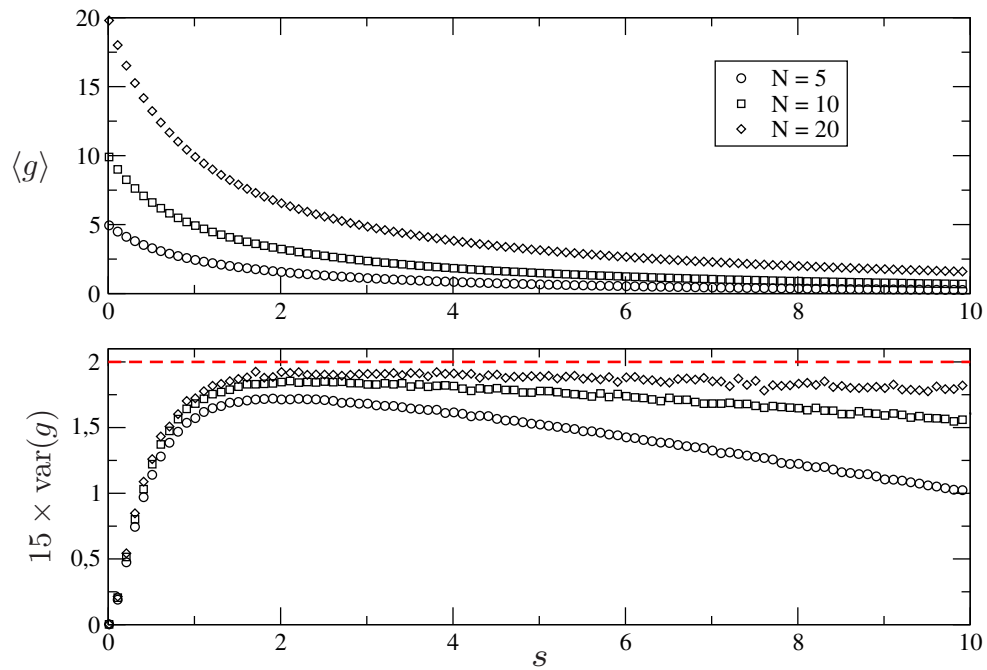


Figura 2.2: Média e variância da condutância para o caso ortogonal ($\beta = 1$).

No regime metálico, ou seja, para fios de comprimento muito menor que o comprimento de localização ($s \ll N$) a condutância deve se comportar de acordo com a lei de Ohm. De fato, o termo dominante da expansão (1.52) é dado por

$$g_0 = \frac{N}{1+s} \quad (2.13)$$

Com o aumento com comprimento s observamos um desvio δg à lei de Ohm, definido por $\delta g = \langle g \rangle - g_0$. Tal desvio, de ordem $\mathcal{O}(N^0)$ na expansão de $\langle g \rangle$, é denominado correção de localização fraca (para $\beta = 1$) e é dado por

$$\delta g = \frac{1}{3} \left(1 - \frac{2}{\beta} \right) \frac{s^3}{(1+s)^3} + \mathcal{O}(N^{-1}). \quad (2.14)$$

O comportamento ohmico, bem como a correção de localização fraca são mostrados na figura 2.3. Note que o comportamento ohmico, eq. (2.13), é dado pela linha reta no gráfico de $\langle g \rangle^{-1}$. A linha contínua no gráfico da correção δg corresponde ao resultado (2.14). Como é de se esperar, a concordância é melhor quanto maior o valor de N . No gráfico também está mostrado na linha pontilhada azul o valor $\delta g = -1/3$ no limite difusivo $s \rightarrow \infty$.

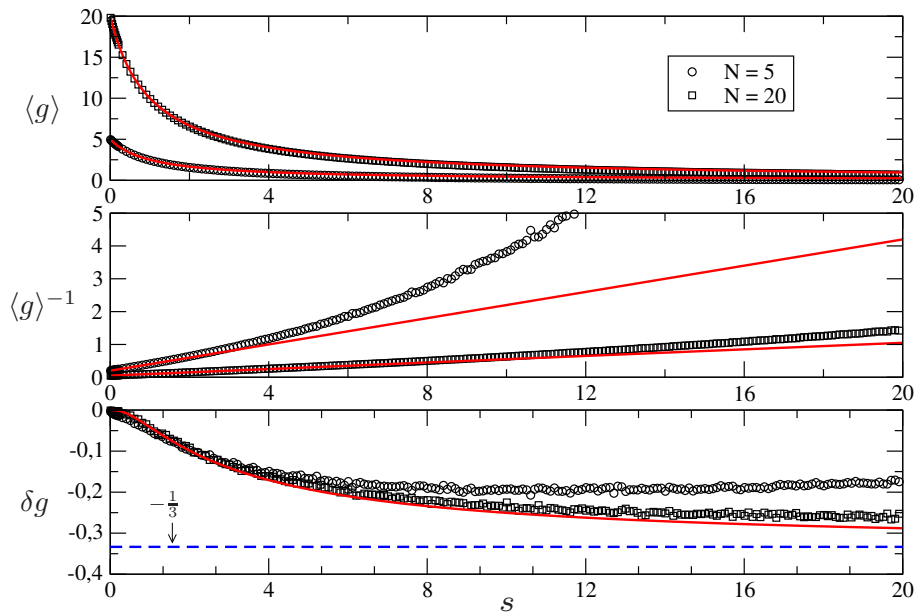


Figura 2.3: Condutância em função do comprimento no caso ortogonal ($\beta = 1$). Para s pequeno temos o comportamento ohmico previsto pela eq. (2.13). À medida que s cresce, os valores desviam de acordo com a correção de localização fraca (2.14).

Finalmente, para um s fixo podemos investigar a distribuição da condutância. Na figura 2.4 apresentamos um resultado típico da simulação. Nela mostramos a evolução da condutância adimensional com o número de passos de Monte Carlo (são mostrados apenas os primeiros 10^4 do total de 10^7 passos usados) para um fio na classe ortogonal ($\beta = 1$) com número de canais abertos $N = 5$ e comprimento $s = 6,39$. A figura também mostra a distribuição da condutância $P(g)$ obtida a partir do histograma da sequência de valores de g .

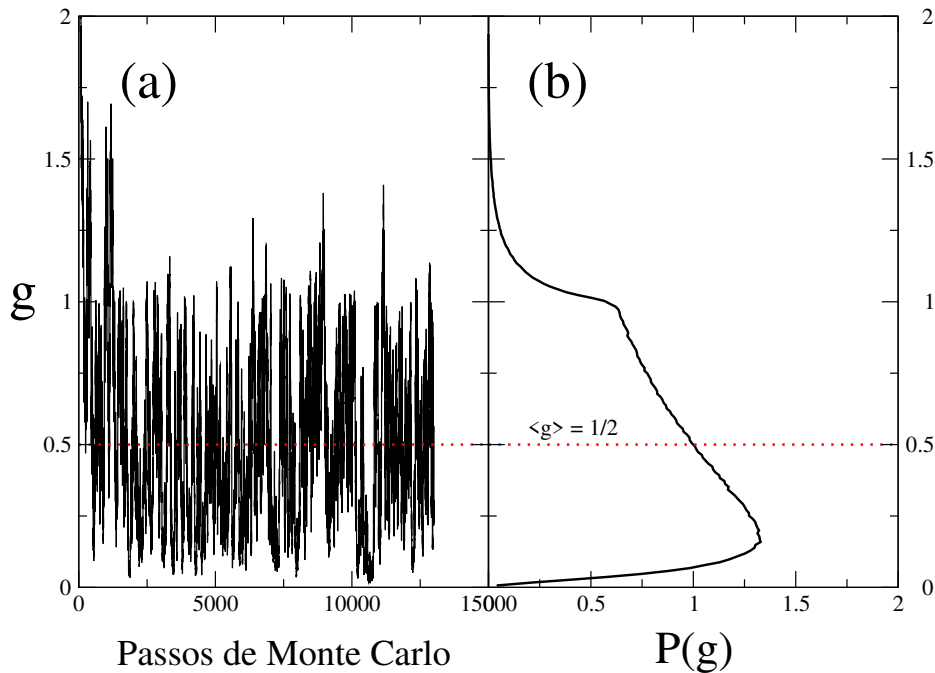


Figura 2.4: Fio quântico de comprimento $s = 6,39$ com $N = 5$ canais abertos na ausência de campo magnético ($\beta = 1$). (a) Evolução da condutância g durante os primeiros 10000 passos de Monte Carlo. (b) Distribuição da condutância $P(g)$ calculada a partir dos dados de (a) depois de acumular 10^7 passos de Monte Carlo.

A figura 2.5 mostra a evolução de $P(g)$ em função de NPMC. Note que à medida que esse número cresce, a distribuição fica cada vez mais suave. Podemos concluir que resultados com NPMC maiores que 10^7 serão mais acurados.

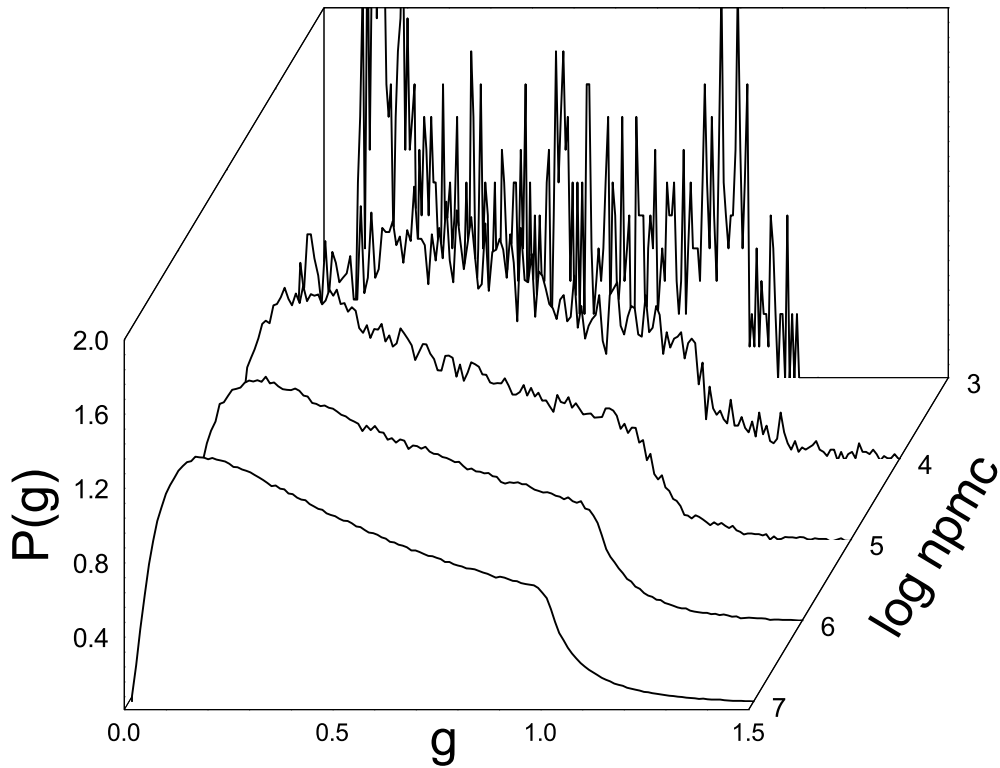


Figura 2.5: Evolução do histograma da condutância em função do logaritmo do número de passos de Monte Carlo para $\beta = 1$, $N = 5$ e $s = 6,39$.

Resultados para a distribuição da condutância de fios quânticos podem ser obtidos de maneira independente através da solução numérica da equação de Schrödinger, como descreveremos na próxima seção.

2.2 O modelo Tight-Binding

Vimos no capítulo anterior que, no transporte quântico em condutores coerentes, os elétrons podem ser vistos como ondas propagando-se em um potencial estático sem perder sua coerência. Dessa forma, diversos nanodispositivos são modelados por uma escolha conveniente do potencial. Soluções analíticas, no entanto, são obtidas apenas em casos muito simples, restando o uso de técnicas numéricas para a obtenção dos observáveis de transporte em problemas mais complexos. De fato, simulações numéricas em problemas de espalhamento têm sido utilizadas desde o início do desenvolvimento da física mesoscópica. A técnica mais

popular para obtenção de propriedades de transporte nestes sistemas é baseada no método da função de Green recursiva [45]. Neste trabalho utilizamos o Kwant¹, um pacote Python destinado a realizar cálculos de transporte quântico. O Kwant usa algoritmos eficientes e robustos que implementam a técnica da função de Green recursiva para sistemas descritos por hamiltonianos *tight-binding* obtidos pela discretização do sistema. De posse do Hamiltoniano para uma dada geometria, o pacote obtém a matriz de espalhamento e, a partir dela, a condutância do sistema. A seguir, mostraremos como obter o modelo *tight-binding* a partir da discretização do hamiltoniano e discutiremos alguns resultados obtidos com essa ferramenta.

2.2.1 Discretização do Hamiltoniano

O hamiltoniano para um elétron movendo-se numa região com campo magnético \vec{B} é dado por

$$H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla + e\vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}), \quad (2.15)$$

em que \vec{A} é o vetor potencial relacionado ao campo magnético por $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Nosso sistema de interesse é um fio quântico de comprimento L e largura W colocado no plano xy com um campo magnético uniforme perpendicular a ele. No calibre de Landau $\vec{A} = (-By, 0, 0)$ a equação de Schrödinger para este sistema é dada por

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + eBy \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi + V(x, y)\psi = E\psi. \quad (2.16)$$

Para ser implementado no Kwant esse hamiltoniano contínuo precisa ser discretizado. Para isso, introduzimos uma rede quadrada de constante a , como mostra a figura 2.7, de modo que as coordenadas dos pontos nessa rede são dadas por $x_n = na$ e $y_m = ma$, com n e m inteiros.

A função de onda e o potencial nos pontos da rede (x_n, y_m) são representados por $\psi_{n,m}$ e $V_{n,m}$. As derivadas presentes na equação diferencial são escritas na aproximação de diferenças finitas, sendo calculadas a partir de um número finito de pontos. Essa aproximação tem como base a expansão em série de Taylor

$$f(x \pm \Delta x, y) = f(x, y) \pm \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots, \quad (2.17)$$

¹Disponível em: <<https://kwant-project.org/>>

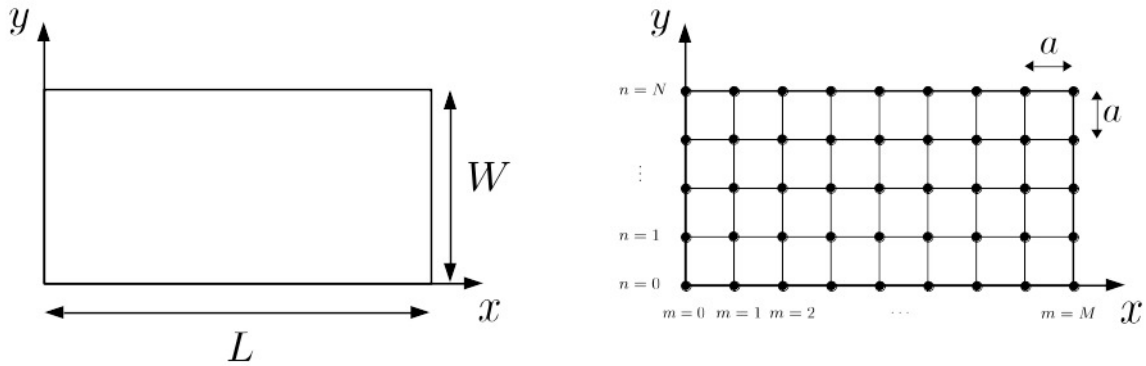


Figura 2.6: Discretização de condutor bidimensional.

que pode ser usada para escrevermos

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f(x + \Delta x, y) + f(x - \Delta x, y) - 2f(x, y)}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}(\Delta x)^2. \quad (2.18)$$

Dessa forma, considerando $\Delta x = a$ o parâmetro de rede, obtemos a aproximação mais comum encontrada na literatura para derivadas de segunda ordem

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=x_n, y=y_m} = \frac{\psi_{n+1,m} + \psi_{n-1,m} - 2\psi_{n,m}}{a^2} + \mathcal{O}(a^2). \quad (2.19)$$

Dessa forma, na ausência de campo magnético, a equação de Schrödinger (2.16), pode ser escrita como

$$-t(\psi_{n+1,m} + \psi_{n-1,m} + \psi_{n,m+1} + \psi_{n,m-1} - 4\psi_{n,m}) + V_{n,m}\psi_{n,m} = E\psi_{n,m}, \quad (2.20)$$

em que introduzimos o parâmetro (com dimensão de energia)

$$t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.21)$$

O hamiltoniano discretizado neste esquema de diferenças finitas é similar ao hamiltoniano *tight-binding* amplamente utilizado em modelos de transferência de elétrons em moléculas e na matéria condensada [5]

$$H = \sum_{n,m} ((V_{n,m} + 4t) |nm\rangle\langle nm| - t(|n+1, m\rangle\langle n, m| + |n-1, m\rangle\langle n, m| + |n, m+1\rangle\langle n, m| + |n, m-1\rangle\langle n, m|)). \quad (2.22)$$

Neste modelo, as funções de onda são expressas em termos de orbitais atômicos localizados nos sítios, o termo $V_{n,m} + 4t$ está associado à energia do orbital localizado no sítio (m, n) e o parâmetro t é a energia de *hopping* entre sítios vizinhos.

O caso de campo magnético não nulo pode ser tratado por um método um pouco diferente. Inicialmente introduzimos o parâmetro de rede na equação (2.16) que pode ser rescrita como

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left[\left(-ia \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eBa^2}{\hbar} y \right)^2 - \left(a \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right] \psi + V(x, y)\psi = E\psi. \quad (2.23)$$

ou, numa forma mais compacta,

$$-t \left[\left(a \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\gamma}{a} y \right)^2 - \left(a \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right] \psi + V(x, y)\psi = E\psi, \quad (2.24)$$

em que introduzimos os parâmetros t , eq.(2.21), e $\gamma = eBa^2/\hbar$. Os termos quadráticos nesta equação podem ser substituídos por exponenciais dos operadores através da aproximação $(aD)^2 \approx e^{aD} + e^{-aD} - 2 + \mathcal{O}(a^4)$. Dessa forma, podemos escrever

$$\left(a \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \psi = \left(e^{a \frac{\partial}{\partial y}} + e^{-a \frac{\partial}{\partial y}} - 2 \right) \psi = \psi(x, y + a) + \psi(x, y - a) - 2\psi(x, y), \quad (2.25)$$

onde usamos o fato de que $e^{\pm a \frac{\partial}{\partial y}}$ representa operador de translação das quantidades $\pm a$ no eixo y . Analogamente

$$\begin{aligned} \left(a \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\gamma}{a} y \right)^2 \psi &= \left(e^{a \frac{\partial}{\partial x} + i\gamma y/a} + e^{-a \frac{\partial}{\partial x} - i\gamma y/a} - 2 \right) \psi \\ &= \left(e^{i\gamma y/a} e^{a \frac{\partial}{\partial x}} + e^{-i\gamma y/a} e^{-a \frac{\partial}{\partial x}} - 2 \right) \psi \\ &= e^{i\gamma y/a} \psi(x + a, y) + e^{-i\gamma y/a} \psi(x - a, y) - 2\psi(x, y). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Aqui usamos o fato dos operadores de translação $e^{\pm a \frac{\partial}{\partial x}}$ comutarem com $e^{\pm i\gamma y/a}$ para fatorar as exponenciais. Dessa forma, temos a generalização da equação (2.20) na presença de campo magnético

$$-t(e^{i\gamma m} \psi_{n+1,m} + e^{-i\gamma m} \psi_{n-1,m} + \psi_{n,m+1} + \psi_{n,m-1} - 4\psi_{n,m}) + V_{n,m} \psi_{n,m} = E\psi_{n,m}. \quad (2.27)$$

Note que a presença de campo magnético introduz uma fase² no parâmetro de *hopping*. No

²Esta fase costuma ser introduzida na literatura através da substituição de Peierls[46].

$$t_{i,j} = t_{i,j}(0) \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \int_{\vec{r}_i}^{\vec{r}_j} \vec{A} \cdot d\vec{l} \right],$$

onde i e j indicam os sítios vizinhos ligados pelo parâmetro de *hopping*.

calibre de Landau essa fase está associada apenas aos saltos entre sítios vizinhos no eixo x . Não há ganho de fase para salto entre sítios vizinhos no eixo y . Os termos de *hopping* conectando um sítio arbitrário com seus quatro primeiros vizinhos é mostrado na figura 2.7. A fase adquirida está relacionada ao fluxo do campo magnético através de uma plaqueta da

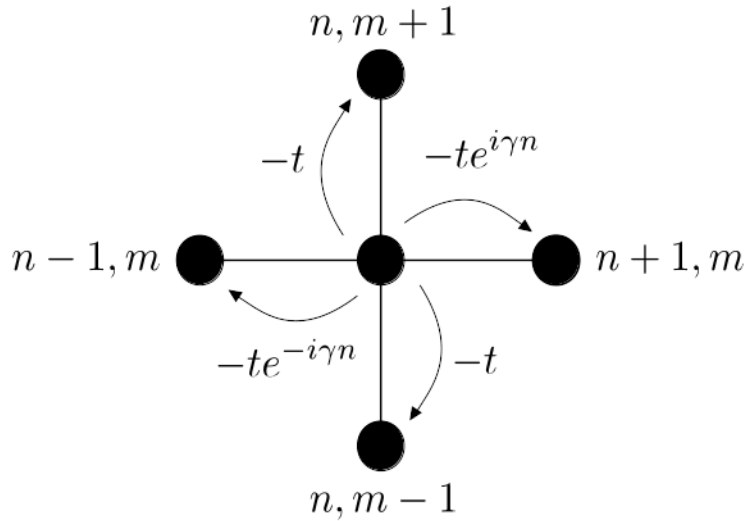


Figura 2.7: Modelo de *Hopping* com os 4 primeiros vizinhos na presença de um campo magnético externo.

rede

$$\gamma = \frac{eBa^2}{\hbar} = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (2.28)$$

onde $\Phi = Ba^2$ e $\Phi_0 = h/e$ é o quantum de fluxo.

2.2.2 Fio ideal

O pacote é projetado de modo que o usuário define a geometria e o hamiltoniano da amostra, sendo especificados a energia de cada sítio e o parâmetro de *hopping*. Um fio quântico é particularmente simples de implementar. Na figura 2.8 mostramos o sistema gerado pelo Kwant que representa um fio de comprimento $L = 15a$ e $W = 4a$. A amostra é representada pelos sítios azuis. Os sítios vermelhos indicam guias ideais semi-infinitos usados na definição do problema de espalhamento. Uma vez definido o sistema, o Kwant calcula a função de Green e, a partir dela, a matriz de espalhamento que permite o cálculo de vários observáveis de transporte.

O caso mais simples é o de um fio ideal acoplado aos guias. Neste caso, a equação de Schrödinger potencial $V_{n,m} = 0$,

$$-t(\psi_{n+1,m} + \psi_{n-1,m} + \psi_{n,m+1} + \psi_{n,m-1}) + 4t\psi_{n,m} = E\psi_{n,m}, \quad (2.29)$$

tem solução na forma

$$\psi_{n,m} \propto e^{ik_\nu ma} \sin\left(\frac{\nu\pi n}{N+1}\right), \quad \nu = 1, \dots, N$$

composta de onda plana na direção longitudinal e uma função seno na direção transversal que assegura o cancelamento da função de onda nas paredes do guia, em $n = 0$ e $n = N + 1$. A energia, por sua vez, é dada por

$$E = 4t - 2t \cos(k_\nu a) - 2t \cos\left(\frac{\nu\pi}{N+1}\right). \quad (2.30)$$

Note que as energias possíveis estão no intervalo $0 \leq E \leq 8t$. Para uma dada energia, o sistema possui um canal aberto ou modo propagante se o vetor de onda k_ν para um dado valor de ν for real. O número de canais abertos para uma dada energia é denotado por N_c . Teremos $N_c = N$ apenas no centro na banda, onde $E = 4t$. Esse comportamento pode ser verificado na figura 2.9 que mostra o diagrama de bandas, construído a partir da eq.(2.30), e a condutância adimensional $g = G/G_0$ em função da energia.

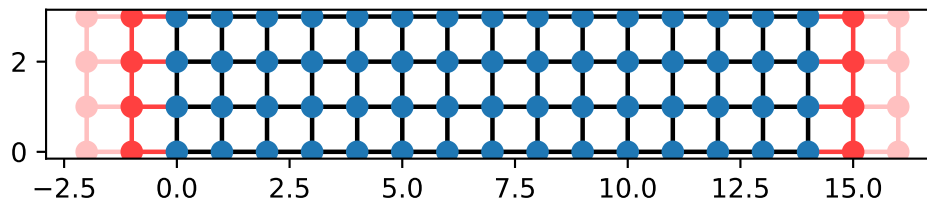


Figura 2.8: Estrutura gerada no Kwant correspondendo a um fio de comprimento $L = 15a$ e largura $W = 4a$.

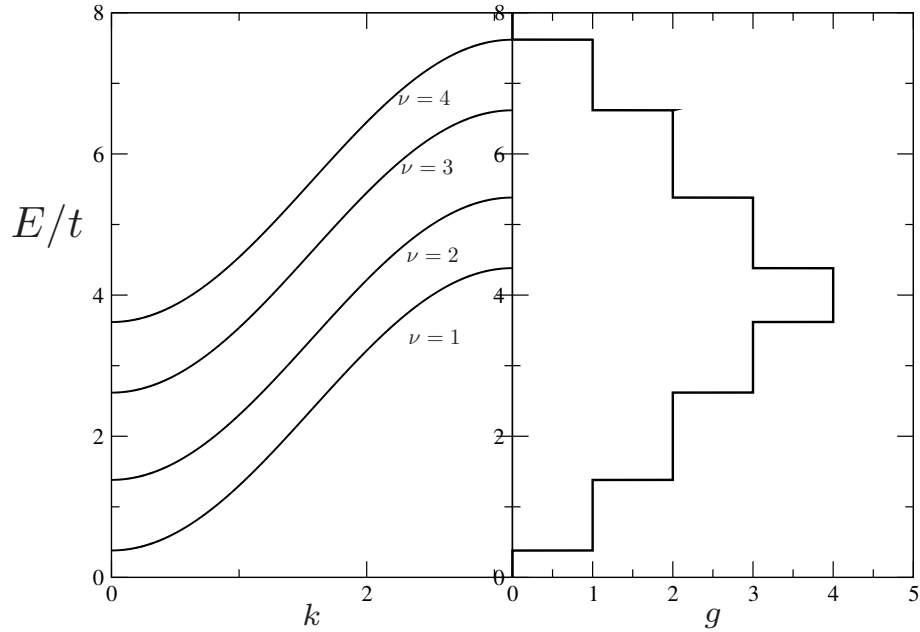


Figura 2.9: Quantização da condutância num fio ideal com $N = 4$ e $L = 15a$. À esquerda são mostradas as bandas e à direita a condutância.

2.2.3 Fio desordenado

A desordem é introduzida nesse sistema através de flutuações aleatórias no potencial em cada sítio. Para isso consideramos que a energia no sítio $V_{n,m}$ é uma variável aleatória com distribuição uniforme no intervalo $[-U/2, U/2]$. O parâmetro U é uma constante positiva que faz o papel de intensidade da desordem. Esta é a versão mais simples do modelo de Anderson [47], amplamente usado no estudo de sistemas desordenados. Na figura 2.10 apresentamos o efeito da desordem no mesmo sistema da seção anterior. Nela consideramos uma realização de desordem com intensidades $U = 1t$ e $U = 2t$. Note que o efeito da desordem é a redução da condutância, especialmente na região em que o sistema ideal tem maior transmissão.

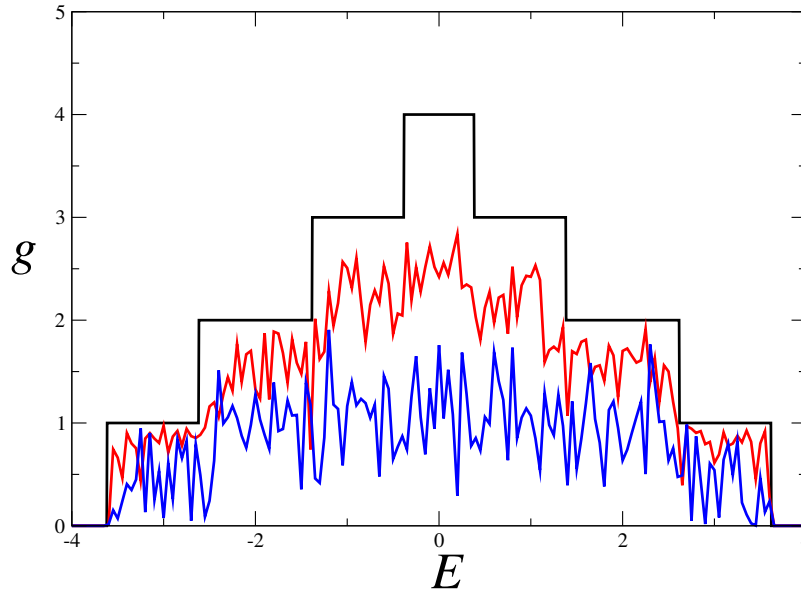


Figura 2.10: Condutância em função da Energia de Fermi para um fio quântico de largura $N = 4$ e comprimento $L = 15$. A linha preta representa um fio limpo (sem desordem). A linha vermelha representa $U = 1$ e a linha azul $U = 2$.

2.3 Comparação entre os métodos

Como aplicação dos métodos vamos construir a distribuição da condutância $P(g)$ para um dado comprimento do fio. Sabe-se que no regime difusivo $P(g)$ apresenta uma forma gaussiana cuja variância não depende do comprimento do fio nem da média da condutância. Neste regime observa-se o fenômeno da flutuação universal da condutância. Por outro lado, $P(g)$ é log-normal no regime localizado. A transição entre esses dois regimes tem chamado bastante atenção na literatura [48–50]. Nesta seção mostraremos alguns resultados obtidos na referência [1] usando os métodos de Monte Carlo e *tight-binding*. A fim de comparar os resultados devemos fixar a condutância média $\langle g \rangle$ e, a partir dela, determinar os parâmetros s e L dos dois modelos. Este procedimento está ilustrado na figura 2.11 em que mostramos $\langle g \rangle$ em função desses dos comprimentos. No modelo TB a simetria de reversão temporal é quebrada pela aplicação de um campo magnético perpendicular ao fio tal que $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. Seguindo [1] fixamos os valores da condutância $\langle g \rangle = 1$, $\langle g \rangle = 4/5$, $\langle g \rangle = 1/2$ e $\langle g \rangle = 1/3$. Usando os valores identificados para s e L geramos histogramas da condutância. Os resultados estão mostrados na figura 2.12 para um sistema com simetria de reversão temporal ($\beta = 1$) e na figura 2.13 para o sistema com simetria de reversão temporal quebrada ($\beta = 2$).

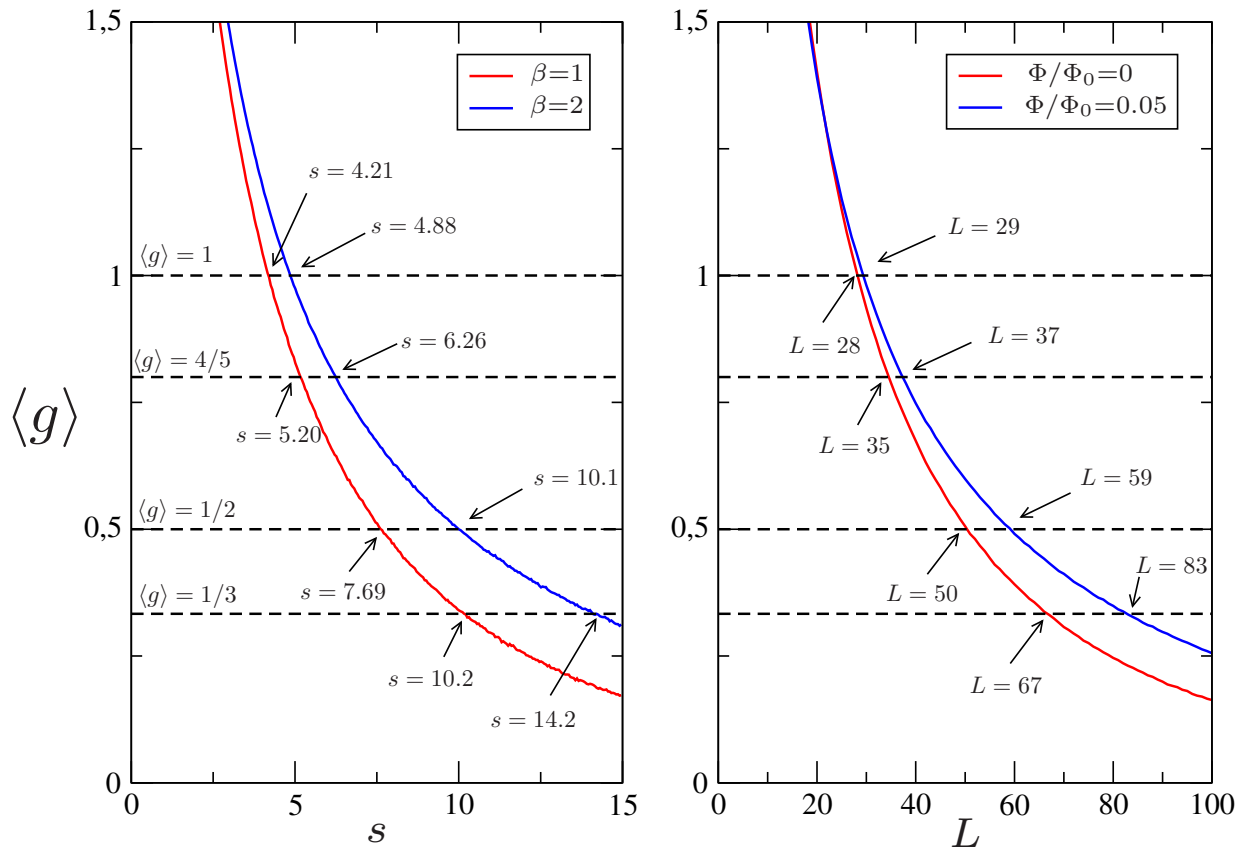


Figura 2.11: Média da condutância em função do comprimento. O gráfico da esquerda mostra os resultados do método Monte Carlo para um fio com $N = 6$ para os casos $\beta = 1$ (vermelho) e $\beta = 2$ (azul). Na direita estão os resultados obtidos a partir do modelo *tight-binding* com $N = 6$, $E = 4t$ e $U = 2t$ na ausência (vermelho) e na presença (azul) de campo magnético, especificado por $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. Também estão identificados os comprimentos nos dois modelos para os quais $\langle g \rangle = 1$, $\langle g \rangle = 4/5$, $\langle g \rangle = 1/2$ e $\langle g \rangle = 1/3$.

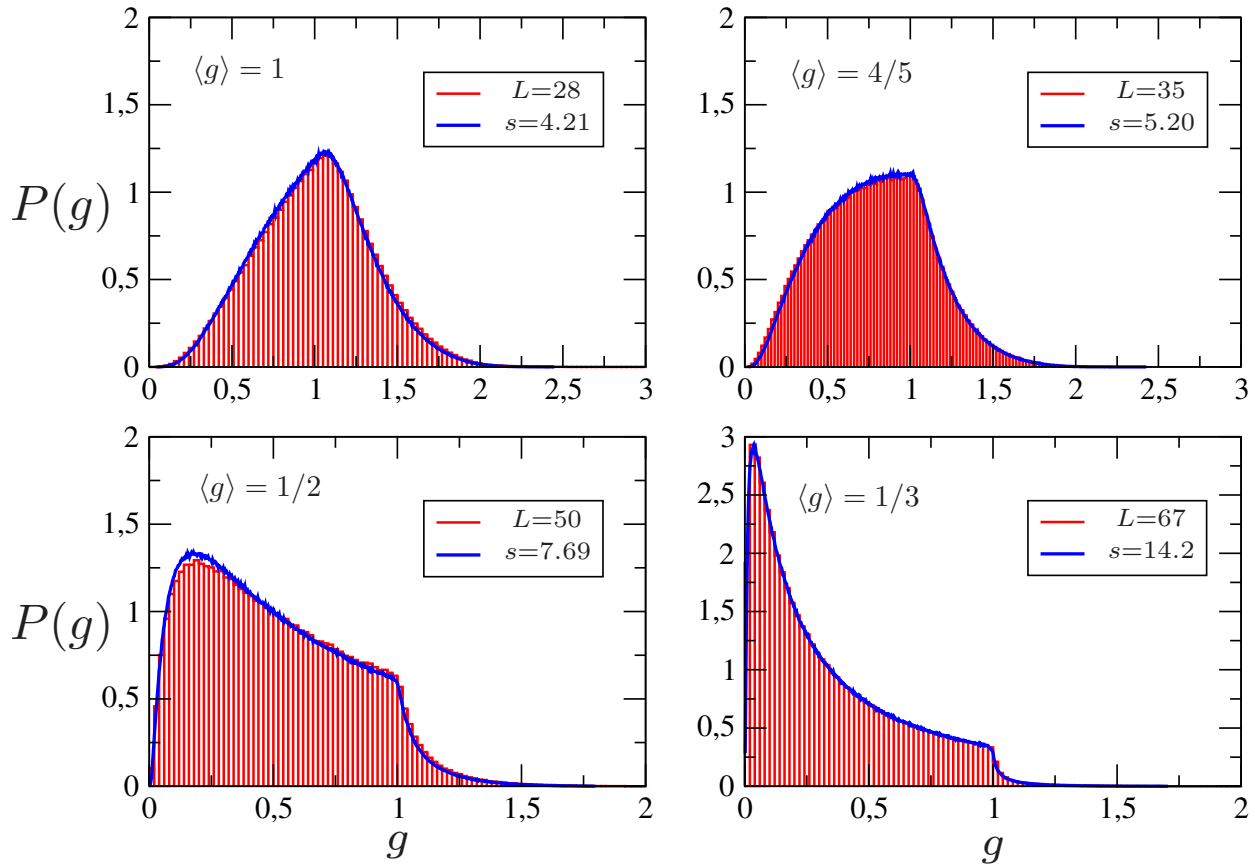


Figura 2.12: Distribuição da condutância para fios desordenados com simetria de reversão temporal ($\beta = 1$). Os histogramas correspondem a $P(g)$ obtida pelo método *tight-binding* com $N = 6$. A linha contínua corresponde a $P(g)$ obtida pela solução numérica da equação DMPK pelo método de Monte Carlo.

Nas figuras os histogramas foram obtidos a partir do modelo *tight-binding* com parâmetros $N = 6$, $E = 4t$, $U = 2t$. Neste modelo a presença de campo é indicada por $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. Por outro lado, as curvas foram obtidas a partir da simulação de Monte Carlo com $N = 6$. No primeiro caso foram consideradas com 10^6 amostras e, no segundo, 10^7 passos de passos de Monte Carlo. A concordância entre eles é excelente.

No próximo capítulo estudaremos o emaranhamento de elétrons produzido por um fio quântico. Os métodos numéricos deste capítulo serão utilizados para o estudo de propriedades estatísticas de concorrência.

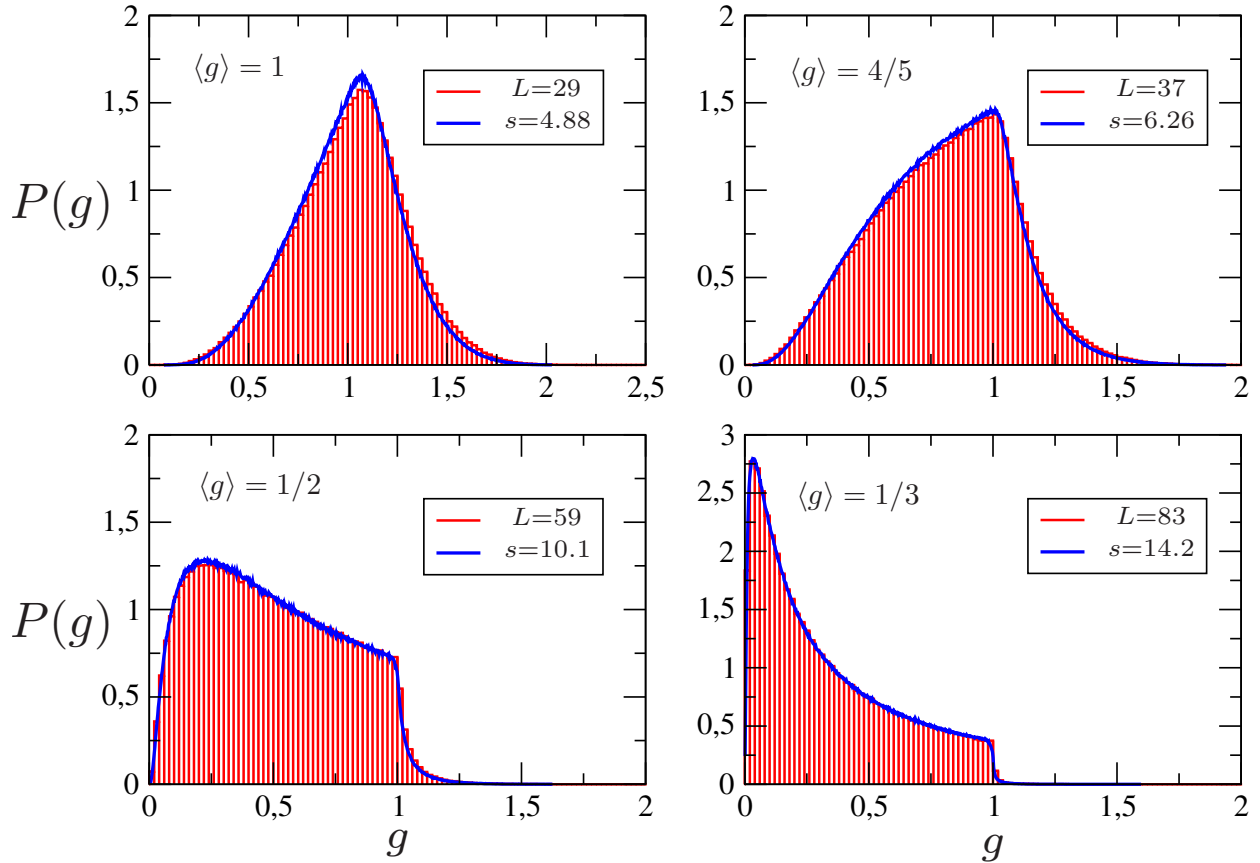


Figura 2.13: Distribuição da condutância para fios desordenados com simetria de reversão temporal quebrada por uma campo magnético perpendicular tal que $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. Os histogramas correspondem a $P(g)$ obtida pelo método *tight-binding* com parâmetros $N = 6$, $E = 4t$ e $U = 2t$. A linha contínua corresponde a $P(g)$ obtida pela solução numérica da equação DMPK pelo método de Monte Carlo com $N = 6$ e $\beta = 2$.

Emaranhamento num fio desordenado

Desde sua formulação no início do século XX, a mecânica quântica sempre motivou debates a respeito de onde seus conceitos estão fundamentados, o que é perfeitamente aceitável, uma vez que seus resultados confrontavam as definições aceitas pela comunidade científica da época. Independentemente das discussões, a teoria se firmou graças à validade de suas previsões e, após um século de testes e experimentos realizados, hoje não se pode duvidar de sua validade.

Essa natureza contra-intuitiva da mecânica quântica trouxe consigo uma das propriedades mais intrigantes da física, o emaranhamento. Esse conceito surgiu naturalmente depois de um experimento mental proposto inicialmente por Einstein em seu famoso artigo EPR onde ele ressaltava que a existência desse tipo correlação gerava evidências suficientes para provar a incompletude da teoria quântica, salientando que essa propriedade não possuía nenhum análogo clássico, tornando sua natureza puramente descrita pelo formalismo quântico. Anos mais tarde, com o advento da teoria da computação quântica e da informação quântica [51], o emaranhamento passou a ser entendido como um valioso recurso para o processamento e transmissão de informação quântica. Com isso, pesquisas envolvendo produção e quantificação de sistemas emaranhados passaram a ser intensamente estudadas no que podemos chamar de teoria do emaranhamento.

Na óptica, a produção de emaranhamento já dava passos largos há algum tempo com a

produção de fótons emaranhados [52]. Hoje em dia, muito tem sido feito no estudo do emaranhamento eletrônico com aplicações na física do estado sólido com o intuito de possíveis aplicações no campo da nanoeletrônica. Já existem várias propostas baseadas em mecanismos para a produção de emaranhamento entre elétrons interagentes e não interagentes. Nesse quesito, Beenakker *et al*[53] propuseram um modelo de um ponto quântico balístico como um produtor de emaranhamento orbital para pares de elétrons não interagentes e calcularam medidas estatísticas do grau de emaranhamento produzido por esse sistema. Mais recentemente, Ramos *et al* [54] utilizaram o mesmo modelo para investigar os aspectos estatísticos da produção de emaranhamento em uma diferente classe de simetria. Além dessas cavidades caóticas, Aleta *et al* [2] estudaram as assinaturas de desordem na produção do emaranhamento de elétrons em fios quânticos.

Neste capítulo, investigaremos a estatística de emaranhamento entre um par de elétrons não interagentes produzido por um fio quântico desordenado seguindo a referência [2]. As seções deste capítulo estão organizadas da seguinte forma: na seção 3.1 faremos uma breve descrição sobre o histórico envolvendo o conceito de emaranhamento. Na seção 3.2 apresentaremos um quantificador para estados puros bipartidos, a Concorrência. Na seção 3.3 faremos a descrição do nosso sistema gerador de emaranhamento, um fio quântico desordenado. Na seção 3.4 apresentaremos uma expressão para a distribuição da Concorrência. Na seção 3.5 discutiremos sobre a estatística da Concorrência com simulações baseadas em algoritmos de Monte Carlo e do modelo *tight-binding*.

3.1 Paradoxo EPR e Desigualdade de Bell

Em um artigo publicado em 1935 [55], Einstein, Podolsky e Rosen (EPR) projetaram um experimento mental que se baseava nos postulados da mecânica quântica com o intuito de verificar se a mesma é uma teoria completa. Nesse embate de ideias, EPR demonstraram que uma teoria física completa deve preservar duas definições importantes:

1. *Elementos de realidade*: Sistemas físicos tem propriedades bem definidas e podem ser previstos com certeza mesmo antes de uma medida (uma medição apenas os revela).
2. *Localidade*: Uma teoria local exclui a possibilidade de ação à distância instantânea.

A proposta do artigo seria criar um sistema inicial isolado que posteriormente seria dividido em dois subsistemas. Para a descrição do experimento, vamos adotar o modelo

formulado por David Bohm [56]. Considere uma par de partículas de spin $\frac{1}{2}$ que se afastam entre si ao longo do eixo x . Uma dessas partículas será recebida por Alice em seu laboratório e a outra por Bob que está em um laboratório diferente e muito distante. Vamos assumir que as partículas foram preparadas de forma a produzir o estado

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle). \quad (3.1)$$

Ambos os observadores optam por fazer a medida do spin ao longo do eixo z . Feito isto, o estado que chegará até Alice é indeterminado, ou seja, \uparrow ou \downarrow , mas se no momento da medida Alice obtiver o resultado \uparrow , podemos afirmar com certeza que Bob medirá \downarrow . Dessa forma, existe uma correlação entre as partículas mesmo estando desacopladas e separadas.

Com o trabalho de EPR, muitos passaram a acreditar que a mecânica quântica deveria ser complementada por um conjunto de variáveis na tentativa de uma melhor descrição do estado quântico. Por não serem desenvolvidas dentro da mecânica quântica, essas variáveis ficaram conhecidas por variáveis ocultas. É importante salientar que todos os debates sobre essas teorias tinham um viés mais filosófico, pois não havia previsões de resultados diferentes daqueles que a mecânica quântica podia descrever. Após a publicação do artigo de EPR, Schrödinger [57] publicou um trabalho revisitando as ideias de Einstein e nesse artigo, o termo *verschränkter*, emaranhamento em uma tradução literal, foi utilizado pela primeira vez.

O tema só voltou a ser discutido em 1964 quando John Bell percebeu que havia uma discordância entre a mecânica quântica e a teoria de variáveis ocultas inicialmente proposta. Bell mostrou que o que EPR sugeriram no artigo de 1935 é descrito pelo que conhecemos como realismo local. Isto quer dizer que uma quantidade física de um sistema tem um valor previamente definido independente de uma medida ser feita ou não e que sistemas que estão distantes não tem influência sobre o outro. Bell chegou a conclusão que se uma teoria é fundamentada a partir dessas definições, ela deve satisfazer um conjunto de desigualdades [58], que deveriam ser satisfeitas por qualquer teoria que não admitisse correlações não-locais.

Algumas versões alternativas dessas desigualdades terminaram sendo mais utilizadas, como é o caso da desigualdade CHSH (Clauser-Horne-Shimony-Holt) [59], em que o resultado da desigualdade para medidas que atendem a uma teoria definida como realista e local devem assumir valores de modo que $|CHSH| \leq 2$. No entanto, os limites impostos pela mecânica quântica para a mesma quantidade CHSH são $\pm 2\sqrt{2}$ [60].

Desta forma, a mecânica quântica viola essa desigualdade sendo generalizada por uma

teoria não local, e os estados responsáveis por tais resultados são chamados estados emaranhados. Vários experimentos realizados desde o início da década de 70 até hoje reportaram a violação das desigualdades de Bell [61–64]. Para uma ampla maioria, esses experimentos expressam evidentemente que as ideias contidas em teorias que contemplam apenas o realismo local devem ser abandonadas. Nas próximas seções apresentaremos alguns aspectos mais formais do emaranhamento, discutiremos um de seus quantificadores e faremos a descrição de um sistema capaz de produzir estados emaranhados.

3.2 Concorrência

Como discutido na seção anterior, o emaranhamento é uma propriedade que só pode ser descrita com o uso da mecânica quântica. Uma vez que um dado estado emaranhado é preparado, quão emaranhado esse estado pode ser? Antes de apresentar esse quantificador, vamos definir o conceito de estados puros e estados mistos. Um estado é dito puro quando pode ser escrito por um vetor de estado na seguinte representação:

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle. \quad (3.2)$$

Nesse caso, existe uma probabilidade dada por $|c_i|^2$ do sistema ser encontrado em um sub-estado ψ_i e o conjunto de todos os ψ_i formam um base ortogonal. Um estado é dito misto quando há um ensemble de estados $|\Psi_i\rangle$ que acontecem com probabilidade p_i . Dito isto, o estado não pode ser representado pela equação 3.2. Uma maneira mais apropriada para representar ambos os estados é descreve-los pelo operador densidade [17].

$$\hat{\rho} = \sum_i^N p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|. \quad (3.3)$$

Agora vamos considerar um sistema quântico composto por dois subsistemas \mathcal{A} e \mathcal{B} com espaços de Hilbert \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B , respectivamente. O espaço de Hilbert do sistema composto é o produto tensorial desses espaços

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (3.4)$$

Denotando as bases ortonormais dos espaços \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B por $|i_A\rangle$ e $|i_B\rangle$, podemos escrever um estado arbitrário do sistema composto como

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_{ij} \gamma_{ij} |i_A\rangle \otimes |j_B\rangle. \quad (3.5)$$

O operador densidade do sistema composto é dado por

$$\rho_{\mathcal{AB}} = |\Psi_{\mathcal{AB}}\rangle \langle \Psi_{\mathcal{AB}}| = \sum_{ij} \sum_{i'j'} \gamma_{ij} \gamma_{i'j'}^* (|i_{\mathcal{A}}\rangle \langle i'_{\mathcal{A}}|) (|j_{\mathcal{B}}\rangle \langle j'_{\mathcal{B}}|). \quad (3.6)$$

O operador densidade reduzido do subsistema \mathcal{A} é obtido através do traço parcial sobre os graus de liberdade do segundo subsistema

$$\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}} |\Psi_{\mathcal{AB}}\rangle \langle \Psi_{\mathcal{AB}}|, \quad (3.7)$$

ou seja,

$$\rho_{\mathcal{A}} = \sum_{ij} \sum_{i'j'} \gamma_{ij} \gamma_{i'j'}^* |i_{\mathcal{A}}\rangle \langle i'_{\mathcal{A}}| \text{Tr}_{\mathcal{B}} (|j_{\mathcal{B}}\rangle \langle j'_{\mathcal{B}}|). \quad (3.8)$$

Notando que

$$\text{Tr}_{\mathcal{B}} (|j_{\mathcal{B}}\rangle \langle j'_{\mathcal{B}}|) = \sum_{j''} \langle j''_{\mathcal{B}} | j_{\mathcal{B}}\rangle \langle j'_{\mathcal{B}} | j''_{\mathcal{B}}\rangle = \delta_{jj'}, \quad (3.9)$$

Podemos escrever

$$\rho_{\mathcal{A}} = \sum_{ii'} \left(\sum_j \gamma_{ij} \gamma_{i'j}^* \right) |i_{\mathcal{A}}\rangle \langle i'_{\mathcal{A}}|, \quad (3.10)$$

ou, numa forma mais compacta,

$$\rho_{\mathcal{A}} = \sum_{ii'} (\gamma \gamma^\dagger)_{ii'} |i_{\mathcal{A}}\rangle \langle i'_{\mathcal{A}}|. \quad (3.11)$$

em que introduzimos a matriz γ de elementos $(\gamma)_{i,j} = \gamma_{ij}$.

Uma vez obtido o $\rho_{\mathcal{A}}$ podemos obter o emaranhamento de formação. Apresentado inicialmente por Wootters [65], o emaranhamento de formação conecta os conceitos de informação com emaranhamento a partir da Entropia de Shannon [66], definida por

$$H = - \sum_i p_i \log p_i, \quad (3.12)$$

em que p_i é uma distribuição de probabilidade e o logaritmo é calculado na base 2. A versão quântica da entropia de Shannon é conhecida na literatura como entropia de von Neumann [67]. Uma vez conhecida a matriz densidade de estados puros, a Entropia de von Neumann $\varepsilon(\rho)$ é dada por

$$\varepsilon(\rho_{\mathcal{A}}) = -\text{Tr}(\rho_{\mathcal{A}} \log \rho_{\mathcal{A}}). \quad (3.13)$$

A entropia (3.13) pode ser reescrita em termos do autovalores do operador densidade $\rho_{\mathcal{A}}$, resultando em

$$\varepsilon = - \sum_i \lambda_i \log \lambda_i. \quad (3.14)$$

No caso específico onde os dois subsistemas \mathcal{A} e \mathcal{B} contêm um único *qubit*¹, a $\dim \mathcal{H}_{\mathcal{A}} = \dim \mathcal{H}_{\mathcal{B}} = 2$, podemos calcular explicitamente os autovalores de $\rho_{\mathcal{A}}$. De acordo com a equação (3.11), o operador densidade $\rho_{\mathcal{A}}$ é representado na base $|i_{\mathcal{A}}\rangle$ pela matriz

$$\gamma\gamma^\dagger = \begin{pmatrix} |\gamma_{11}|^2 + |\gamma_{12}|^2 & \gamma_{11}\gamma_{21}^* + \gamma_{12}\gamma_{22}^* \\ \gamma_{21}\gamma_{11}^* + \gamma_{22}\gamma_{12}^* & |\gamma_{21}|^2 + |\gamma_{22}|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Assumindo que o estado $|\Psi_{\mathcal{AB}}\rangle$ é normalizado, $\langle\Psi_{\mathcal{AB}}|\Psi_{\mathcal{AB}}\rangle = \text{Tr}\gamma\gamma^\dagger = 1$, os autovalores de $\gamma\gamma^\dagger$ serão dados por

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4 \det \gamma\gamma^\dagger}}{2}. \quad (3.16)$$

Dessa forma, como $\lambda_+ + \lambda_- = 1$, podemos escrever a entropia de emaranhamento na forma compacta

$$\varepsilon = h \left(\frac{1 + \sqrt{1 - \mathcal{C}^2}}{2} \right), \quad (3.17)$$

onde $h(x)$ é a entropia de Shannon binária

$$h(x) = -x \log x - (1 - x) \log(1 - x). \quad (3.18)$$

A quantidade \mathcal{C} , definida por

$$\mathcal{C} = 2\sqrt{\det \gamma\gamma^\dagger}, \quad (3.19)$$

é um quantificador do emaranhamento denominado concorrência. Note que o emaranhamento se anula quando $\mathcal{C} = 0$ e é máximo quando $\mathcal{C} = 1$. No caso geral em que, $\text{Tr}(\gamma\gamma^\dagger) \neq 1$, a concorrência é dada por

$$\mathcal{C} = \frac{2\sqrt{\det \gamma\gamma^\dagger}}{\text{Tr}(\gamma\gamma^\dagger)}. \quad (3.20)$$

Na próxima seção apresentaremos um sistema mesoscópico capaz produzir um estado emaranhado entre dois qubits e mostraremos como escrever a concorrência a partir dos autovalores de transmissão.

3.3 Emaranhamento em Sistemas Mesoscópicos

O estudo de emaranhamento de elétrons em sistemas de estado sólido tem atraído bastante atenção da comunidade [68, 69]. Dentre várias propostas de produção de elétrons

¹Um vetor que representa uma superposição de dois estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

emaranhados disponíveis na literatura, destacamos a feita por Beenakker *et al.* [70] que utiliza um dispositivo mesoscópico como emaranhador orbital de pares de elétrons não interagentes. Este emaranhador está esquematizado na figura 3.1 que mostra o dispositivo mesoscópico (região hachurada) conectado de cada lado a dois guias ideais. Cada guia possui apenas um canal aberto e está conectado a um reservatório de elétrons. A aplicação de uma pequena voltagem gera corrente coerente que atravessa o sistema da esquerda para a direita. As correlações devido ao espalhamento sofrido pelos elétrons dentro do dispositivo criam as condições para a produção de emaranhamento entre elétrons transmitidos, à direita, e refletidos, à esquerda.

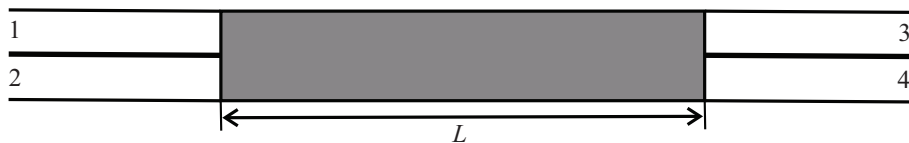


Figura 3.1: Emaranhador mesoscópico conectado a guias ideais à esquerda (1 e 2) e à direita (3 e 4). Um elétron ao escapar do sistema pela esquerda (direita) pode estar nos guias 1 ou 2 (3 ou 4), definindo um sistema de dois níveis.

O estado de duas partículas entrando pelos guias da esquerda é representado por

$$|\Psi_{\text{in}}\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle, \quad (3.21)$$

onde o operador a_i^\dagger cria um elétron entrando no sistema pelo guia i ($i = 1, 2$) e $|0\rangle$ denota o mar de Fermi à temperatura nula. O estado que descreve elétrons saindo do sistema é descrito por

$$|\Psi_{\text{out}}\rangle = \sum_{m,n} S_{m1} S_{n2} b_m^\dagger b_n^\dagger |0\rangle, \quad (3.22)$$

o operador b_j^\dagger cria uma partícula saindo do sistema pelo guia j ($j = 3, 4$). Nesta situação, as amplitudes de espalhamento $S_{i,j}$ podem ser agrupadas na matriz 4×4 que possui a seguinte estrutura de blocos

$$\mathbf{S} = \left(\begin{array}{cc|cc} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ \hline S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{array} \right) = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

onde $\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{t}$ e \mathbf{t}' são blocos 2×2 que descrevem reflexão e transmissão de estados incidentes pela direita e esquerda, respectivamente.

O estado espalhado pode ser reescrito na representação de número de ocupação indicando o número local de partículas à esquerda, n_L , e à direita, n_R , com o vínculo $n_L + n_R = 2$:

$$|\Psi_{\text{out}}\rangle = \sum_{n_L, n_R} |n_L, n_R\rangle = |2, 0\rangle + |0, 2\rangle + |1, 1\rangle. \quad (3.24)$$

Dessa forma, com o auxílio de (3.22) e da relação de anti-comutação $b_i^\dagger b_j^\dagger = -b_j^\dagger b_i^\dagger$, escrevemos cada setor do espaço de Fock em (3.24) da forma

$$|2, 0\rangle = (S_{11}S_{22} - S_{21}S_{12})b_1^\dagger b_2^\dagger |0\rangle, \quad (3.25)$$

$$|0, 2\rangle = (S_{31}S_{42} - S_{41}S_{32})b_3^\dagger b_4^\dagger |0\rangle, \quad (3.26)$$

$$|1, 1\rangle = \sum_{pq} (S_{p1}S_{q2} - S_{q1}S_{p2})b_p^\dagger b_q^\dagger |0\rangle, \quad (3.27)$$

onde $p \in 1, 2$ e $q \in 3, 4$. Desenvolvendo o somatório, podemos escrever explicitamente

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= (S_{11}S_{32} - S_{31}S_{12})b_1^\dagger b_3^\dagger |0\rangle + (S_{11}S_{42} - S_{41}S_{12})b_1^\dagger b_4^\dagger |0\rangle + \\ &\quad (S_{21}S_{32} - S_{31}S_{22})b_2^\dagger b_3^\dagger |0\rangle + (S_{21}S_{42} - S_{41}S_{22})b_2^\dagger b_4^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (3.28)$$

que representa uma combinação linear de estados de um elétron sendo espalhado para a esquerda e outro para a direita. Na notação da seção 3.2, a matriz dos coeficientes dessa combinação linear é

$$\gamma = \begin{pmatrix} S_{11}S_{32} - S_{31}S_{12} & S_{11}S_{42} - S_{41}S_{12} \\ S_{21}S_{32} - S_{31}S_{22} & S_{21}S_{42} - S_{41}S_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

A matriz γ pode ser escrita explicitamente em termos dos blocos de transmissão \mathbf{t} e reflexão \mathbf{r} da matriz \mathbf{S} . Para isso, notamos que ela pode ser fatorada como

$$\gamma = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{32} & S_{42} \\ -S_{31} & -S_{41} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

$$= \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{31} & S_{41} \\ S_{32} & S_{42} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

$$= \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{31} & S_{32} \\ S_{41} & S_{42} \end{pmatrix}^T, \quad (3.32)$$

onde T indica transposição. Da estrutura de blocos mostrada na eq.(3.23), vemos que a matriz da esquerda corresponde à matriz de reflexão \mathbf{r} e a matriz da direita corresponde à matriz de transmissão \mathbf{t} . Finalmente, notando que

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_y, \quad (3.33)$$

onde σ_y é a segunda matriz de Pauli, podemos escrever

$$\gamma = i\mathbf{r}\sigma_y\mathbf{t}^T. \quad (3.34)$$

Dessa forma, a concorrência pode ser calculada diretamente da eq. (3.20), resultando em

$$\mathcal{C} = 2 \frac{\sqrt{\det[\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r} \sigma_y (\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t})^T \sigma_y]}}{\text{Tr}[\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r} \sigma_y (\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t})^T \sigma_y]}. \quad (3.35)$$

Em termos de autovalores de transmissão $\{\tau_1, \tau_2\}$ a concorrência é dada por

$$\mathcal{C} = \frac{2\sqrt{\tau_1(1-\tau_1)\tau_2(1-\tau_2)}}{\tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2}. \quad (3.36)$$

O emaranhamento é máximo ($\mathcal{C} = 1$) quando $\tau_1 = \tau_2$ e mínimo ($\mathcal{C} = 0$) quando $\tau_1 = 0$ e $\tau_2 = 1$ ou $\tau_2 = 0$ e $\tau_1 = 1$.

O resultado (3.36) foi introduzido por Beenakker *et al.* [53, 70]. Esses autores também consideraram o caso específico de uma cavidade balística caótica como emaranhador e obtiveram a média e variância da concorrência. A distribuição da concorrência foi posteriormente obtida por Gopar e Frustaglia [71], o que permitiu uma descrição completa da estatística da concorrência em cavidades caóticas das classes Wigner-Dyson. Esses autores estenderam a análise considerando um fio quântico desordenado como emaranhador [2], obtendo uma expressão para a distribuição da concorrência em função do comprimento do fio. Esta análise será apresentada na próxima seção.

3.4 Emaranhamento em fios quânticos

A presença de desordem no fio quântico torna os autovalores de transmissão variáveis aleatórias cuja distribuição conjunta $P_\beta(\tau_1, \tau_2; s)$ evolui com o comprimento de acordo com a equação DMPK. A distribuição da concorrência, por sua vez, pode ser obtida a partir de

$$P_\beta(\mathcal{C}) = \int_0^1 d\tau_1 \int_0^1 d\tau_2 \delta\left(\mathcal{C} - \frac{2\sqrt{\tau_1(1-\tau_1)\tau_2(1-\tau_2)}}{\tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2}\right) P_\beta(\tau_1, \tau_2; s), \quad (3.37)$$

em que $\delta(x)$ é a função delta de Dirac. Efetuando a mudança de variáveis $\tau_i = 1/\cosh^2 x_i$ a equação (3.37) pode ser reescrita como

$$P_\beta(\mathcal{C}) = \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \delta\left(\mathcal{C} - \frac{2\sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2}\right) P_\beta(x_1, x_2; s). \quad (3.38)$$

A integral (3.38) pode ser resolvida com a aproximação da solução da equação DMPK no regime metálico. No caso de dois canais abertos essa aproximação pode ser escrita como

$$P_\beta(x_1, x_2; s) = \mathcal{N}(s) |(\sinh^2 x_1 - \sinh^2 x_2)(x_1^2 - x_2^2)|^{\beta/2} \times \prod_{i=1}^2 [\exp(-(\beta+2)x_i^2/2s(x_i \sinh(2x_i))^{1/2})], \quad (3.39)$$

em que $\mathcal{N}(s)$ é a constante de normalização. Usando a identidade²

$$\delta\left(\mathcal{C} - \frac{2\sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2}\right) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm} \frac{(K_\sigma^2 + 1)^2 \sinh x_2 \delta(x_1 - r_\sigma)}{|K_\sigma^2 - 1| \sqrt{1 + K_\sigma^2 \sinh^2 x_2}}, \quad (3.40)$$

em que

$$r_\pm = \sinh^{-1}(K_\pm \sinh x_2), \quad (3.41)$$

$$K_\pm = \frac{1 \pm \sqrt{1 - \mathcal{C}^2}}{\mathcal{C}}, \quad (3.42)$$

podemos efetuar a integral em x_1 , resultando em

$$P_\beta(\mathcal{C}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm} \frac{(K_\sigma^2 + 1)^2}{|K_\sigma^2 - 1|} \int_0^\infty dx_2 \frac{P_\beta(r_\sigma, x_2) \sinh x_2}{\sqrt{1 + K_\sigma^2 \sinh^2 x_2}}. \quad (3.43)$$

Usando a definição (3.41), temos as identidades

$$\sinh r_\sigma = K_\sigma \sinh x_2, \quad (3.44)$$

$$\cosh r_\sigma = \sqrt{1 + K_\sigma^2 \sinh^2 x_2}, \quad (3.45)$$

$$\sinh 2r_\sigma = 2K_\sigma \sinh(x_2) \sqrt{1 + K_\sigma^2 \sinh^2 x_2}, \quad (3.46)$$

o que permite escrever

$$P_\beta(r_\sigma, x_2; s) = 2\mathcal{N}(s) |K_\sigma^2 - 1|^{\beta/2} \sqrt{r_\sigma x_2} \exp\left(-\frac{\beta+2}{2s}(r_\sigma^2 + x_2^2)\right) \times \sinh^{2+\beta}(x_2) \sqrt{\cosh x_2} (1 + K_\sigma^2 \sinh x_2)^{1/4}. \quad (3.47)$$

²Para mais detalhes veja apêndice A

Substituindo (3.47) em (3.43), obtemos a seguinte expressão para a distribuição da concorrência

$$P_\beta(\mathcal{C}) = \mathcal{N}(s) \int_0^\infty [g(r_+(x_2)) + g(r_-(x_2))] dx_2, \quad (3.48)$$

em que

$$g(r_\pm) = \sqrt{K_\pm(K_\pm^2 + 1)^2 |(K_\pm^2 - 1)|^{\beta-2/2} \sqrt{r_\pm x_2} |x_2^2 - r_\pm^2|^{\beta/2}} \\ \times \exp \left[-\frac{\beta + 2}{2s} (r_\pm^2 + x_2^2) \right] \left(\frac{\cosh^2 x_2}{1 + K_\pm^2 \sinh^2 x_2} \right)^{1/4} \sinh^{2+\beta} x_2. \quad (3.49)$$

Este é o principal resultado de [2], e permite o cálculo da distribuição da concorrência por integração numérica para um dado valor de s . No limite balístico $s \ll 1$ a integral (3.48) foi calculada analiticamente, resultando em expressões simples para $P_\beta(\mathcal{C})$ nas classes $\beta = 1$ e $\beta = 2$, a saber

$$P_1(\mathcal{C}) = 2\mathcal{C}, \quad (3.50)$$

$$P_2(\mathcal{C}) = 3\mathcal{C}\sqrt{1 - \mathcal{C}^2}. \quad (3.51)$$

A partir desses resultados, pode-se calcular diversos cumulantes da distribuição da concorrência. Em particular, a média e variância são dados por

$$\langle \mathcal{C} \rangle = \begin{cases} 2/3 & \approx 0,66667 \text{ para } \beta = 1, \\ 3\pi/16 & \approx 0,58905 \text{ para } \beta = 2. \end{cases} \quad (3.52)$$

$$\text{var}(\mathcal{C}) = \begin{cases} 1/18 & \approx 0,055556 \text{ para } \beta = 1, \\ 2/5 - 9\pi^2/256 & \approx 0,053022 \text{ para } \beta = 2. \end{cases} \quad (3.53)$$

Na próxima seção obteremos a distribuição da concorrência integrando para alguns valores de comprimento s propostos na ref.[2]. Os resultados, obtidos por integração numérica de (3.48), são complementados pelos métodos numéricos introduzidos no capítulo 2.

3.5 Simulações numéricas

Além da distribuição completa, podemos usar a distribuição (3.39) para calcular momentos da concorrência

$$\langle \mathcal{C}^n \rangle = \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \left(\frac{2\sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2} \right)^n P_\beta(x_1, x_2; s). \quad (3.54)$$

A média $\langle \mathcal{C} \rangle$ e variância $\text{var}(\mathcal{C}) = \langle \mathcal{C}^2 \rangle - \langle \mathcal{C} \rangle^2$, obtidas por integração numérica para as classes de simetria $\beta = 1$ e $\beta = 2$, estão mostradas na figura 3.2. No limite balístico, $s \rightarrow 0$ as

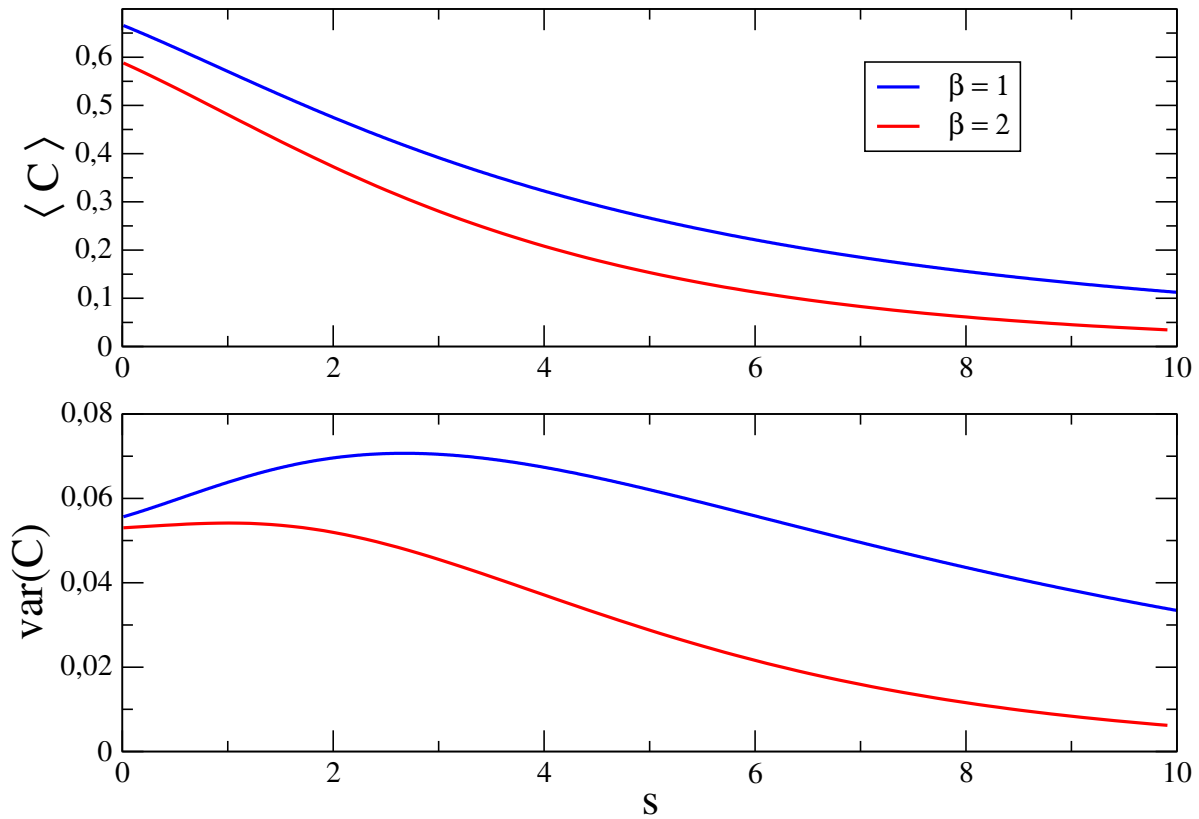


Figura 3.2: Média e variância da concorrência em função de s .

curvas passam pelos pontos especificados por (3.52) e (3.53).

Podemos obter a distribuição completa da concorrência para um dado valor do comprimento s , integrando (3.48) numericamente. Como alternativa a este procedimento podemos usar a simulação de Monte Carlo apresentada na seção 2.1. Neste caso, teremos apenas duas “partículas” no hamiltoniano (2.9) ocupando as posições x_1 e x_2 . Para uma dada configuração de equilíbrio desse sistema, a concorrência é calculada no passo 8 do algoritmo de Metropolis a partir de

$$\mathcal{C} = \frac{2 \sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2}. \quad (3.55)$$

Desta forma, as distribuições da concorrência $P_\beta(\mathcal{C})$ são obtidas a partir dos histogramas dos valores obtidos para \mathcal{C} em cada passo de Monte Carlo. Assim como feito na referência [2], vamos escolher quatro comprimentos correspondentes aos valores médios de condutância: $\langle g \rangle = 0,2$, $\langle g \rangle = 0,5$, $\langle g \rangle = 1,0$ e $\langle g \rangle = 1,9$, que cobrem do regime localizado ($\langle g \rangle \approx 0$) ao

regime balístico ($\langle g \rangle \approx 2$). Os respectivos comprimentos podem ser identificados a partir de um gráfico de $\langle g \rangle$ e função do comprimento normalizado s , como mostrado na figura 3.3. No gráfico da direita, válido na presença de simetria de reversão temporal ($\beta = 1$), identificamos os valores $s = 0,049, 0,896, 2,33,$ e $4,95$. O caso em que a reversão temporal é quebrada ($\beta = 2$), mostrado na direita, identificamos os comprimentos $s = 0,049, 0,932, 2,61,$ e $6,04$.

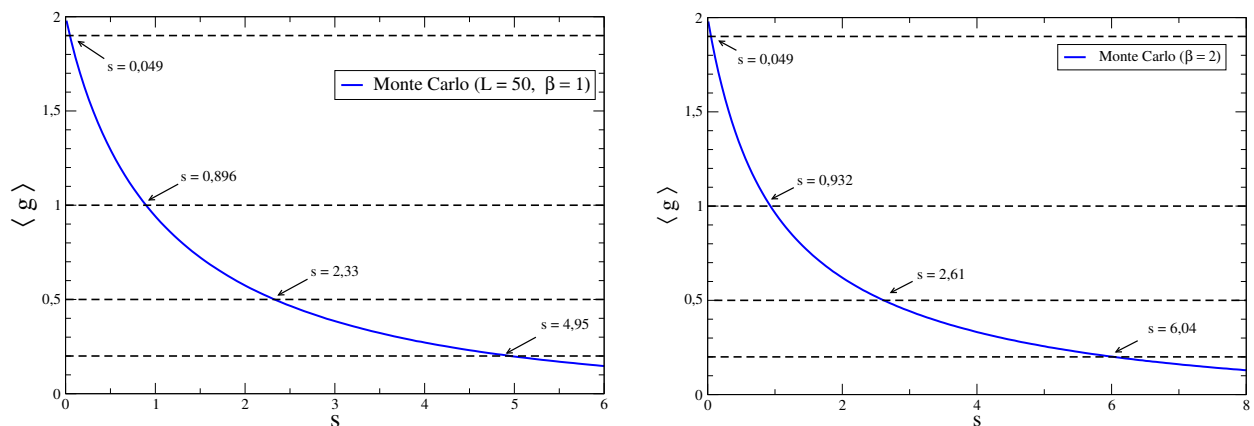


Figura 3.3: Média da condutância $\langle g \rangle$ em função do comprimento normalizado s para fios quânticos das classes $\beta = 1$ (esquerda) e $\beta = 2$ (direita). Na figura destacamos em linhas pontilhadas horizontais os valores $\langle g \rangle = 0,2, 0,5, 1,0$ e $1,9$ e são destacados os respectivos comprimentos em ambos os casos. que correspondem aos comprimentos $s = 0,049, 0,896, 2,33,$ e $4,95$, no caso $\beta = 1$, $s = 6,04, 2,61, 0,932,$ e $0,049$, no caso $\beta = 2$

As distribuições da concorrência para os valores de s escolhidos acima são mostradas nas figuras 3.4 e 3.5. Os histogramas são obtidos a partir da simulação de Monte Carlo e as curvas a partir da integral (3.48). Das figuras vemos que, em ambas as classes de simetria, as curvas tendem a apresentar um pico em valores mais baixos de \mathcal{C} , de modo que valores grandes da concorrência ($\mathcal{C} \approx 1$) são estatisticamente desfavorecidos. Apesar disso, $\mathcal{P}_1(\mathcal{C})$ é finita em $\mathcal{C} = 1$, o que possibilita a produção de estados maximamente emaranhados. Em contraste, $\mathcal{P}_2(\mathcal{C})$ se anula em $\mathcal{C} = 1$, mostrando que não pode haver produção de estados maximamente emaranhados quando a simetria de reversão temporal é quebrada.

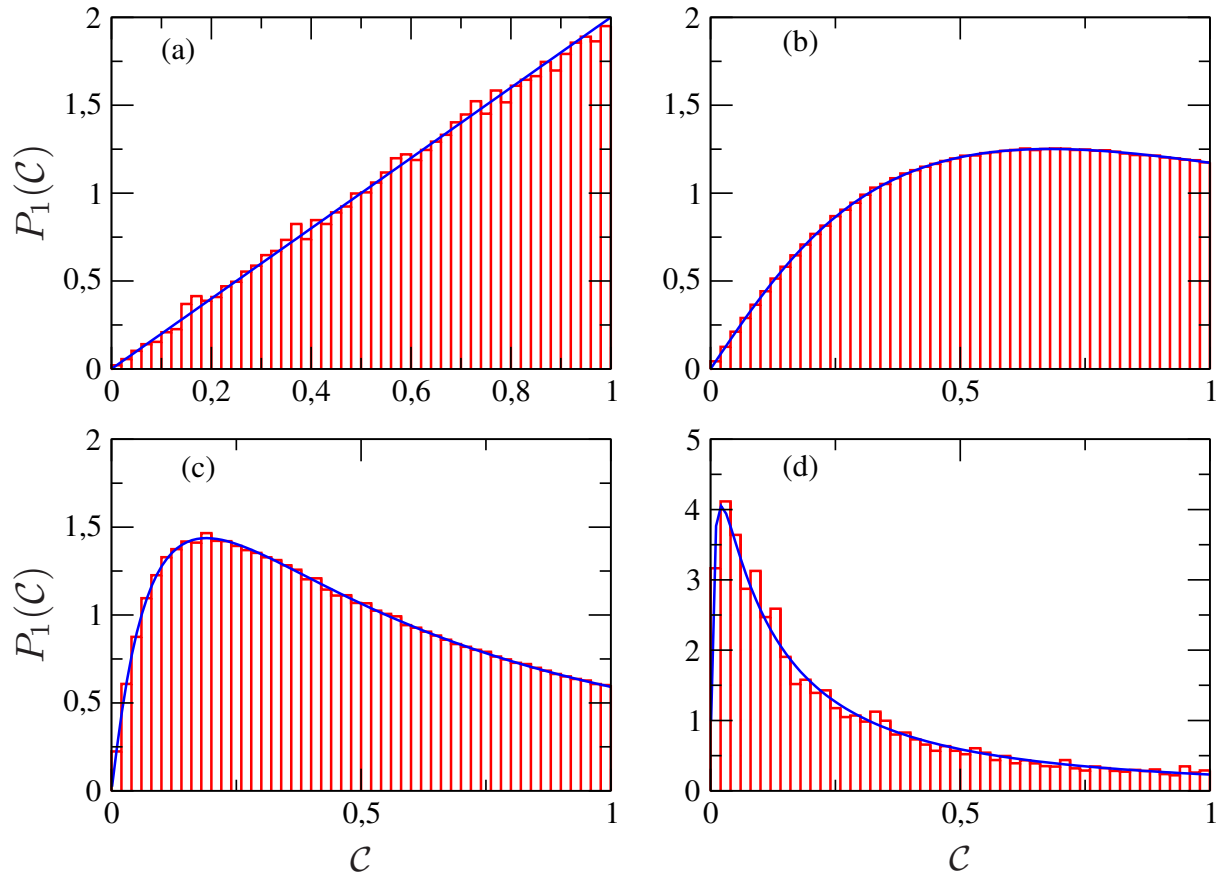


Figura 3.4: Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal ($\beta = 1$). Os histogramas em (a), (b), (c) e (d) foram obtidos da simulação de Monte Carlo para os comprimentos $s = 0,049$, $0,896$, $2,33$, e $4,95$, respectivamente. As linha azul no gráfico (a) é o resultado exato (3.50). As curvas nos demais gráficos foram obtidas pela a partir de (3.48).

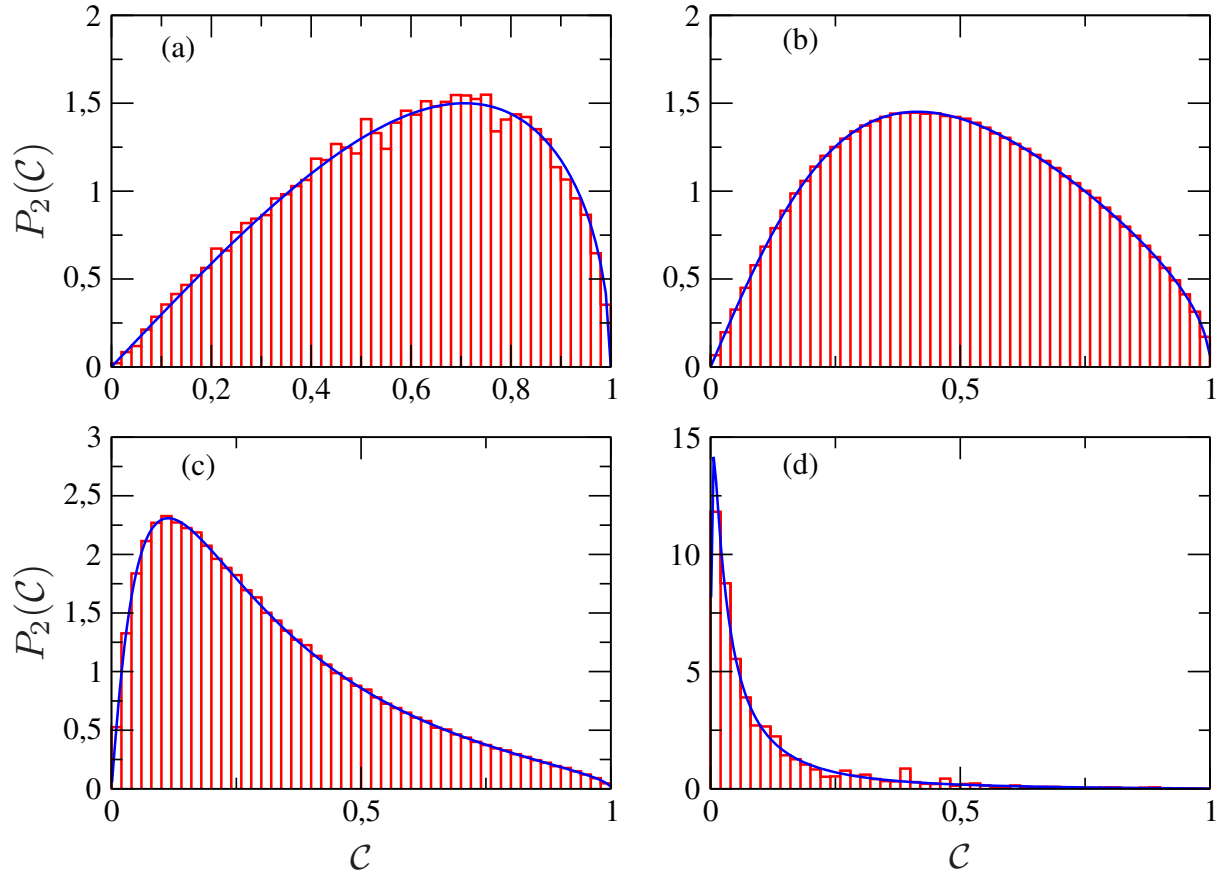


Figura 3.5: Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal quebrada ($\beta = 2$). Os histogramas em (a), (b), (c) e (d) foram obtidos da simulação de Monte Carlo para os comprimentos $s = 0,049$, $0,896$, $2,33$, e $4,95$, respectivamente. A linha azul no gráfico (a) é o resultado exato (3.50). As curvas nos demais gráficos foram obtidas pela a partir de (3.48).

Uma verificação independente dos resultados para $P_\beta(\mathcal{C})$ pode ser obtida a partir do modelo *tight-binding*. Em nossas simulações consideramos fios de comprimento fixo $L = 50a$ com diferentes realizações de desordem. Os diferentes regimes de transporte podem ser obtidos variando-se a intensidade da desordem U . Dessa forma, podemos fazer um gráfico da média da condutância $\langle g \rangle$ em função de U , como mostrado na figura 3.6. A fim de comparar os resultados obtidos pelos métodos de Monte Carlo e *tight-binding* consideramos os quatro os valores da média da condutância usados anteriormente: $\langle g \rangle = 0,2$, $\langle g \rangle = 0,5$, $\langle g \rangle = 1,0$ e $\langle g \rangle = 1,9$. Da figura 3.6 vemos que os valores correspondentes de desordem são $U = 1,967$, $1,368$, $0,868$, e $0,200$, respectivamente.

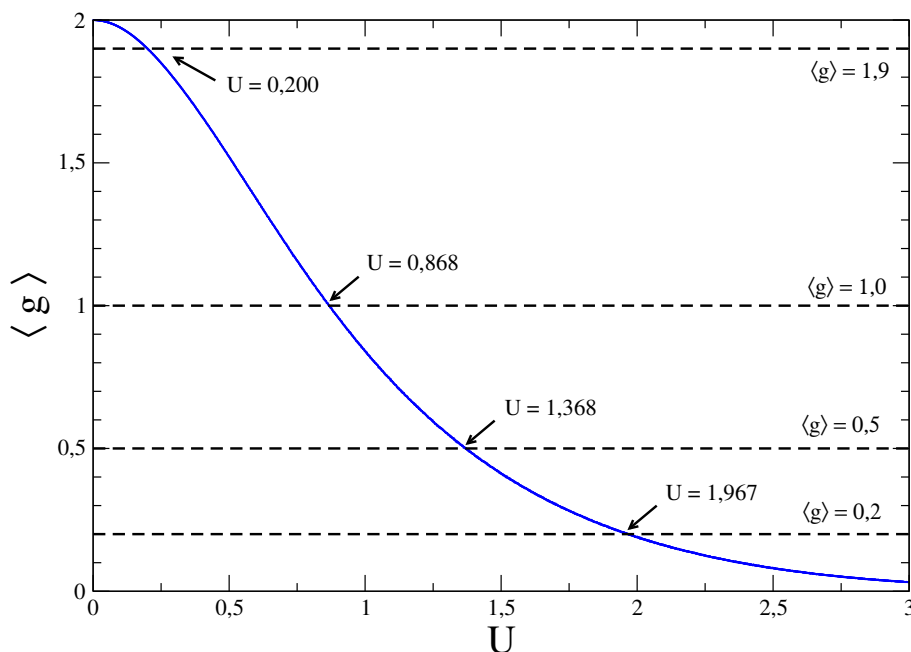


Figura 3.6: Média de da condutância $\langle g \rangle$ em função do comprimento da intensidade da desordem U do modelo *tight-binding* para o fio de comprimento $L = 50a$ na ausência de campo magnético. Na figura destacamos em linhas pontilhadas horizontais os valores $\langle g \rangle = 0,2$, $0,5$, $1,0$ e $1,9$ que correspondem aos valores de desordem $U = 1,967$, $1,368$, $0,868$, e $0,200$, respectivamente.

Uma vez identificados os valores U , podemos gerar a distribuição da concorrência $\mathcal{P}_\infty(\mathcal{C})$ para todos os valores de $\langle g \rangle$ considerados. Os resultados são mostrados na figura 3.7, na qual os histogramas correspondem a simulações numéricas do modelo *tigh-binding* e as curvas azuis são obtidas a partir da equação (3.48). Em todos os casos, temos uma excelente concordância entre a simulação numérica e a previsão da teoria DMPK.

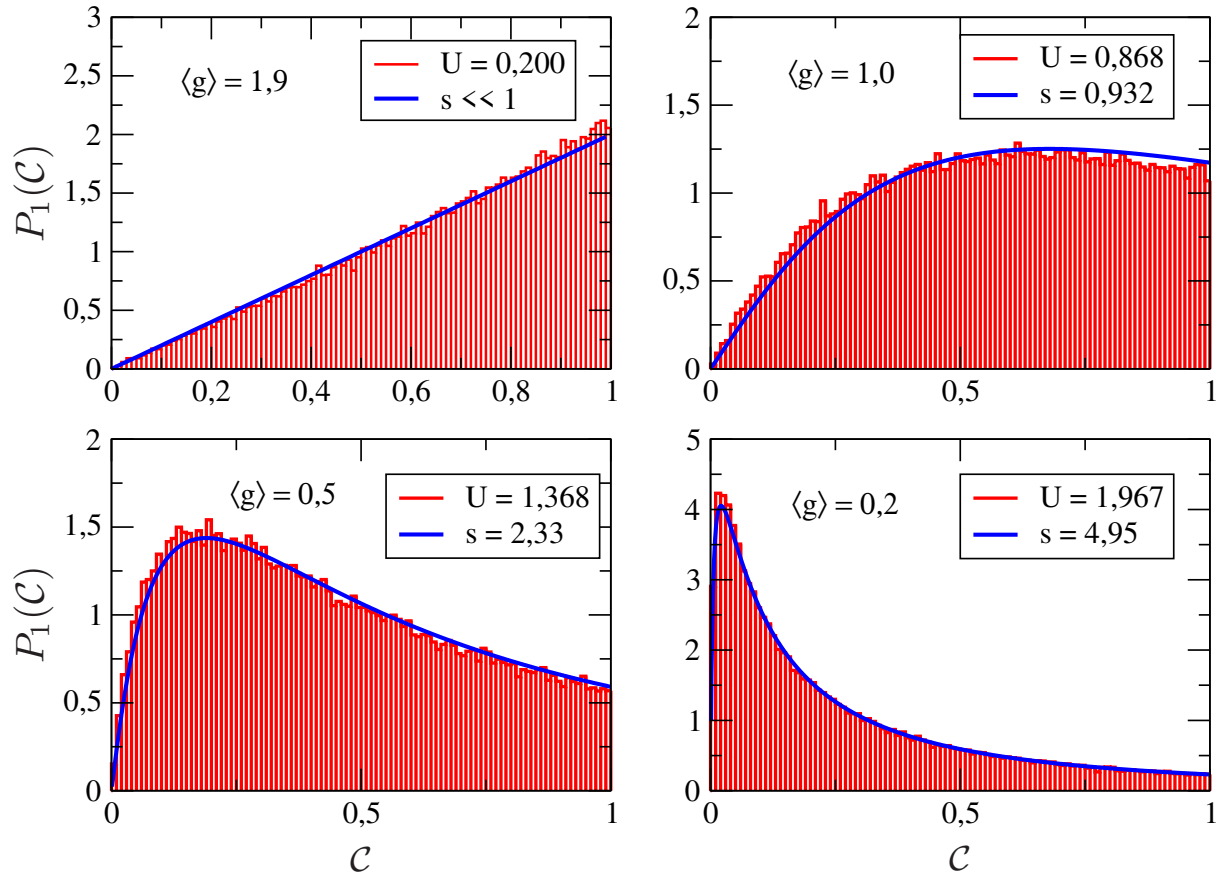


Figura 3.7: Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal. O histograma é o resultado da simulação do modelo *tight-binding* e as curvas são os resultados previstos a partir da teoria de matrizes aleatórias. As legendas nos gráficos mostram os parâmetros U e s usados nos dois modelos. No limite balístico usamos o resultado exato (3.50).

Para implementar a quebra da simetria de reversão temporal adicionamos um campo magnético perpendicular ao fio em nosso modelo TB. Os campos foram escolhidos segundo a referência [2] tais que $eBa^2/\hbar = 1$ e $eBa^2/\hbar = 0,5$. Novamente foram fixados os valores de condutância $\langle g \rangle = 0,2, 0,5, 1,0$ e $1,9$, que correspondem aos valores de desordem $U = 0,185, 0,861, 1,40$ e $6,04$, respectivamente. Os resultados são mostrados na figura 3.8.

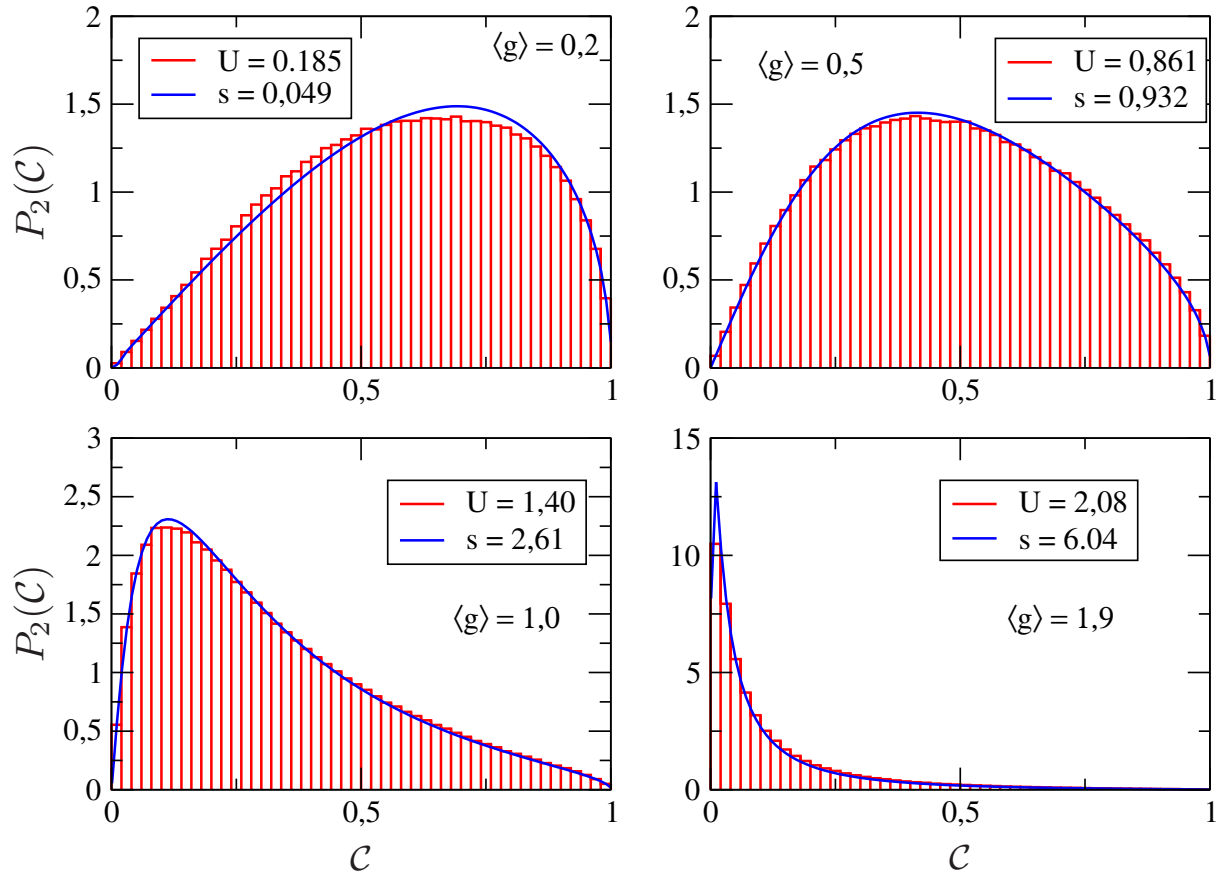


Figura 3.8: Distribuição da concorrência para um fio quântico com simetria de reversão temporal quebrada pela presença de um campo magnético. Os histogramas são resultados da simulação do modelo *tight-binding* e as curvas são os resultados previstos a partir da teoria de matrizes aleatórias. Nos casos em que $\langle g \rangle = 1,9$, $\langle g \rangle = 1,0$ e $\langle g \rangle = 0,5$ usamos um campo magnético perpendicular ao fio tal que $eBa^2/\hbar = 1$. Para o caso em que $\langle g \rangle = 0,2$ usamos $eBa^2/\hbar = 1$. As curvas são os resultados obtidos a partir da formulação de matrizes aleatórias. As legendas nos gráficos mostram os parâmetros U e s usados nos dois modelos.

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho estudamos propriedades universais transporte num fio quântico conectado a reservatórios de elétrons por guias ideais que suportam um número N de canais abertos. A formulação da teoria de matrizes aleatórias para esse problema é baseada na equação DMPK, uma equação de Fokker-Planck que descreve a evolução da distribuição conjunta dos autovalores de transmissão em função do comprimento do fio. A partir desta equação pode-se obter propriedades estatísticas da condutância em vários regimes de transporte: balístico, difusivo e localizado.

Seguindo a referência [1], apresentamos no capítulo 2, dois procedimentos numéricos para o estudo da condutância do fio. O primeiro, um método de Monte Carlo construído a partir de uma solução da equação DMPK para o regime difusivo, válida para todas as classes de simetria. Neste método os autovalores são interpretados como partículas interagentes num gás em que o índice de Dyson, β , faz papel de inverso de temperatura. O segundo método consiste na solução numérica da equação de Schrödinger através do método de diferenças finitas. Neste método, equivalente ao modelo *tight-binding*, a desordem é modelada por um potencial aleatório nos sítios da rede. Nós utilizando o pacote Kwant presente na linguagem Python para o cálculo de observáveis de transporte como a condutância. Os dois procedimentos foram usados no estudo da distribuição da condutância do fio para diversos regimes de transporte.

No capítulo 3, fizemos um estudo detalhado da referência [2] que usa um fio quântico para gerar emaranhamento de elétrons. No formalismo de espalhamento, a concorrência é escrita em termos dos autovalores de transmissão e pode ser estudada a partir da solução da equação DMPK. Aplicamos os métodos numéricos desenvolvidos no capítulo 2 ao estudo da distribuição do emaranhamento. Uma conclusão desse estudo é a possibilidade de produção de estados maximamente emaranhados em sistema que preservam simetria de reversão temporal.

O método de Monte Carlo mostrou-se uma poderosa ferramenta alternativa para investigar propriedades estatísticas em sistemas mesoscópicos. Todos os resultados aqui obtidos estão de acordo com a teoria de transporte via modelo *tight-binding*. Podemos estender a abordagem aqui desenvolvida para acessar informações sobre observáveis de transporte ou correlações quânticas em outras classes de universalidade com simetrias que ainda não possuem resultados analíticos ou numéricos.

APÊNDICE A

Identidade (3.40)

O integrando na equação (3.38) contém a função delta de Dirac

$$\delta\left(\mathcal{C} - \frac{2\sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2}\right). \quad (\text{A.1})$$

A fim de eliminar a variável x_1 identificamos o argumento da função delta (A.1) como

$$f(x_1) = \mathcal{C} - \frac{2\sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2} \quad (\text{A.2})$$

e usamos a propriedade

$$\delta(f(x_1)) = \sum_n \frac{\delta(x_1 - x_{1,n})}{f'(x_{1,n})}, \quad (\text{A.3})$$

em que $x_{1,n}$ são as raízes da equação $f(x_1) = 0$. Esta equação pode ser escrita como

$$\mathcal{C}(\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2) - 2\sinh x_1 \sinh x_2 = 0, \quad (\text{A.4})$$

que é uma equação quadrática em $\sinh x_1$. Dessa forma, temos duas raízes $f(x_1) = 0$ que podem ser escritas como

$$r_{\pm} \equiv x_{1\pm} = \sinh^{-1}(K_{\pm} \sinh x_2), \quad (\text{A.5})$$

em que definimos

$$K_{\pm} \equiv \frac{1 \pm \sqrt{1 - \mathcal{C}^2}}{\mathcal{C}}. \quad (\text{A.6})$$

Além disso, a equação (A.3) envolve a derivada da função $f(x_1)$, que pode ser escrita como

$$f'(x) = \frac{2\cosh x_1 \sinh x_2 (\sinh^2 x_1 - \sinh^2 x_2)}{(\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2)^2}. \quad (\text{A.7})$$

Dessa forma, podemos escrever

$$\delta(f(x_1)) = \sum_{\sigma=\pm} \frac{(\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2)^2 \delta(x_1 - r_\sigma)}{2\cosh x_1 \sinh x_2 |\sinh^2 x_1 - \sinh^2 x_2|}. \quad (\text{A.8})$$

Finalmente, usando a propriedade $f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)f(x - x_0)$, podemos substituir x_1 nos argumentos das funções hiperbólicas por r_\pm . Segue imediatamente da definição (A.5) que

$$\sinh r_\sigma = K_\sigma \sinh x_2, \quad (\text{A.9})$$

$$\cosh r_\sigma = \sqrt{1 + K_\sigma^2 \sinh^2 x_2}, \quad (\text{A.10})$$

o que nos leva à identidade

$$\delta\left(\mathcal{C} - \frac{2\sinh x_1 \sinh x_2}{\sinh^2 x_1 + \sinh^2 x_2}\right) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm} \frac{(K_\sigma^2 + 1)^2 \sinh x_2 \delta(x_1 - r_\sigma)}{|K_\sigma^2 - 1| \sqrt{1 + K_\sigma^2 \sinh^2 x_2}}. \quad (\text{A.11})$$

Referências Bibliográficas

- [1] L. S. Froufe-Pérez, P. García-Mochales, P. A. Serena, P. A. Mello, and J. J. Sáenz. Conductance Distributions in Quasi-One-Dimensional Disordered Wires. *Physical Review Letters*, **89**(24), (2002). Citado na(s) página(s): [VI](#), [VII](#), [23](#), [27](#), [39](#), [61](#)
- [2] A. Aleta, H. Villarrubia-Rojo, D. Frustaglia, and V. A. Gopar. Orbital entanglement and electron localization in quantum wires. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **89**(7), (2014). Citado na(s) página(s): [VI](#), [VII](#), [44](#), [51](#), [53](#), [54](#), [59](#), [62](#)
- [3] S.M. Rezende. *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 4th edition, (2015). Citado na(s) página(s): [1](#)
- [4] Y. Imry and M. Tinkham. *Introduction to Mesoscopic Physics*. Oxford University Press, 2th edition, (2008). Citado na(s) página(s): [1](#)
- [5] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, (1995). Citado na(s) página(s): [2](#), [4](#), [8](#), [10](#), [34](#)
- [6] T. Guhr, A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller. Random-matrix theories in quantum physics: Common concepts. *Physics Report*, **299**(4-5):189–425, (1998). Citado na(s) página(s): [3](#), [16](#)
- [7] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts

- in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, **60**(9), (1988). Citado na(s) página(s): 4
- [8] 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):209–214, (1988). Citado na(s) página(s): 4
- [9] M. Switkes. *Decoherence and adiabatic transport in semiconductor quantum dots*. PhD thesis, Department of Physics, Stanford University, California, (1999). Citado na(s) página(s): X, 5, 7
- [10] Y. V. Nazarov and Y. M. Blanter. *Quantum transport: Introduction to nanoscience*, volume 9780521832465. Cambridge University Press, (2009). Citado na(s) página(s): 5
- [11] C. P. Umbach, S. Washburn, R. B. Laibowitz, and R. A. Webb. Magnetoresistance of small, quasi-one-dimensional, normal-metal rings and lines. *Physical Review B*, **30**(7):4048–4051, (1984). Citado na(s) página(s): X, 6
- [12] W. J. Skocpol, L. D. Jackel, R. E. Howard, P. M. Mankiewich, D. M. Tennant, Alice E. White, and R. C. Dynes. Quantum transport in narrow MOSFET channels. *Surface Science*, **170**(1-2):1–13, (1986). Citado na(s) página(s): X, 6
- [13] A. D. Stone. Magnetoresistance fluctuations in mesoscopic wires and rings. *Physical Review Letters*, **54**(25):2692–2695, (1985). Citado na(s) página(s): X, 6
- [14] S. M. Goodnick. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, (2008). Citado na(s) página(s): 6
- [15] M. L. Roukes, A. Scherer, S. J. Allen, H. G. Craighead, R. M. Ruthen, E. D. Beebe, and J. P. Harbison. Quenching of the Hall Effect in a One-Dimensional Wire. *Physical Review Letters*, **59**:3011–3014, (1987). Citado na(s) página(s): X, 8
- [16] L. Pescini, A. Tilke, R. H. Blick, H. Lorenz, J. P. Kotthaus, W. Eberhardt, and D. Kern. Suspending highly doped silicon-on-insulator wires for applications in nanomechanics. *Nanotechnology*, **10**, (1999). Citado na(s) página(s): X, 8
- [17] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, (2017). Citado na(s) página(s): 13, 46

- [18] R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, **1**:223–231, (1957). Citado na(s) página(s): [14](#)
- [19] R. Landauer. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, **21**(172):863–867, (1970). Citado na(s) página(s): [14](#)
- [20] Ya M. Blanter and M. Büttiker. Shot noise in mesoscopic conductors. *Physics Report*, **336**(1-2):1–166, (2000). Citado na(s) página(s): [15](#)
- [21] C.W.J. Beenakker and M.J.M. De Jong. Shot noise in mesoscopic systems. *Mesoscopic electron transport*, (1):1–37, (1997). Citado na(s) página(s): [15](#)
- [22] J. L. Pichard and M. Sanquer. Quantum conductance fluctuations and maximum entropy ensembles for the transfer matrix. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **167**(1):66–92, (1990). Citado na(s) página(s): [15](#)
- [23] B. Collins and I. Nechita. Random matrix techniques in quantum information theory. *Journal of Mathematical Physics*, **57**(1):015215, (2016). Citado na(s) página(s): [16](#)
- [24] C. W.J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Reviews of Modern Physics*, **69**(3):731–808, (1997). Citado na(s) página(s): [16](#)
- [25] Freeman J. Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. I. *Journal of Mathematical Physics*, **3**(1):140–156, (1962). Citado na(s) página(s): [17](#)
- [26] Freeman J. Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. II. *Journal of Mathematical Physics*, **3**(1):157–165, (1962). Citado na(s) página(s):
- [27] Freeman J. Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. III. *Journal of Mathematical Physics*, **3**(1):166–175, (1962). Citado na(s) página(s): [17](#)
- [28] R. A. Jalabert, J. L. Pichard, and C. W.J. Beenakker. Universal quantum signatures of chaos in ballistic transport. *Epl*, **27**(4):255–260, (1994). Citado na(s) página(s): [17](#)
- [29] Harold U. Baranger and Pier A. Mello. Mesoscopic transport through chaotic cavities: A random S-matrix theory approach. *Physical Review Letters*, **73**(1):142–145, (1994). Citado na(s) página(s): [17](#)

- [30] Alexander Altland and Martin R. Zirnbauer. Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 55(2):1142–1161, (1997). Citado na(s) página(s): [18](#)
- [31] A. F. Macedo-Junior. Propriedades universais de transporte em pontos quânticos com simetria quiral. Master's thesis, Universidade Federal Rural de Pernambuco, (2002). Citado na(s) página(s): [18](#)
- [32] P. A. Mello, P. Pereyra, and N. Kumar. Macroscopic approach to multichannel disordered conductors. *Annals of Physics*, **181**:290–317, (1988). Citado na(s) página(s): [19](#)
- [33] P. W. Brouwer, C. Mudry, B. D. Simons, and A. Altland. Delocalization in coupled one-dimensional chains. *Physical Review Letters*, **81**(4):862–865, (1998). Citado na(s) página(s): [20](#)
- [34] P. W. Brouwer, A. Furusaki, I. A. Gruzberg, and C. Mudry. Localization and delocalization in dirty superconducting wires. *Physical Review Letters*, **85**(5):1064–1067, (2000). Citado na(s) página(s): [20](#)
- [35] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation*. Springer, (1989). Citado na(s) página(s): [21](#)
- [36] C. W.J. Beenakker and B. Rejaei. Nonlogarithmic repulsion of transmission eigenvalues in a disordered wire. *Physical Review Letters*, **71**(22):3689–3692, (1993). Citado na(s) página(s): [21](#), [22](#)
- [37] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 9th edition, (1965). Citado na(s) página(s): [22](#)
- [38] K. Frahm. Equivalence of the Fokker-Planck approach and the nonlinear σ model for disordered wires in the unitary symmetry class. *Physical Review Letters*, **74**(23):4706–4709, (1995). Citado na(s) página(s): [22](#)
- [39] M. Caselle. Distribution of transmission eigenvalues in disordered wires. *Physical Review Letters*, **74**(14):2776–2779, (1995). Citado na(s) página(s): [22](#)
- [40] K. Binder, D. Heermann, Lyle Roelofs, A. John Mallinckrodt, and Susan McKay. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, volume **7**. (1993). Citado na(s) página(s): [25](#), [26](#)

- [41] H. Gould, J. Tobochnik, and W. Christian. *Introduction to Computer Simulation Methods*. Addison-Wesley, (2006). Citado na(s) página(s): 25
- [42] C. Canali. Model for a random-matrix description of the energy-level statistics of disordered systems at the Anderson transition. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **53**(7):3713–3730, (1996). Citado na(s) página(s): 27
- [43] L. S. Froufe-Pérez, P. García-Mochales, P. A. Serena, P. A. Mello, and J. J. Sáenz. A Monte Carlo approach to determine conductance distributions in quasi-one-dimensional disordered wires. *Microelectronics Journal*, **36**(10):893–899, (2005). Citado na(s) página(s): 27
- [44] P. S. Antonio. Transporte de Elétrons em Cavidades Caóticas da Classe BdG. Master’s thesis, Universidade Federal Rural de Pernambuco, (2011). Citado na(s) página(s): 27
- [45] Pier A. Mello and Narendra Kumar. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems*. (2007). Citado na(s) página(s): 33
- [46] R. Peierls. Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen. *Zeitschrift für Physik*, **80**(11-12):763–791, (1933). Citado na(s) página(s): 35
- [47] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, **109**(5):1492–1505, (1958). Citado na(s) página(s): 38
- [48] B.L. Altshuler, P.A. Lee, and R.A. Webb. *Mesoscopic Phenomena in Solids*. North Holland, (1991). Citado na(s) página(s): 39
- [49] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, and H. B. Shore. Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition. *Physical Review B*, **47**(17):11487–11490, (1993). Citado na(s) página(s):
- [50] Peter Markoš. Probability distribution of the conductance at the mobility edge. *Physical Review Letters*, **83**(3):588–591, (1999). Citado na(s) página(s): 39
- [51] C. H. Bennett and D. P. Divincenzo. Quantum information and computation. *Nature*, **404**(6775):247–255, (2000). Citado na(s) página(s): 43

- [52] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger. Experimental tests of realistic local theories via Bell's theorem. *Physical Review Letters*, **47**(7):460–463, (1981). Citado na(s) página(s): [44](#)
- [53] C. W. J. Beenakker, M. Kindermann, C. M. Marcus, and A. Yacoby. Entanglement Production in a Chaotic Quantum Dot. *Fundamental Problems of Mesoscopic Physics*, pages 167–177, (2004). Citado na(s) página(s): [44](#), [51](#)
- [54] J. G.G.S. Ramos, A. F. Macedo-Junior, and A. L.R. Barbosa. Entanglement distribution statistic in Andreev billiards. *European Physical Journal B*, **90**(11), 2017. Citado na(s) página(s): [44](#)
- [55] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Physical Review*, **47**(10):777–780, (1935). Citado na(s) página(s): [44](#)
- [56] D. Bohm and Y. Aharonov. Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky. *Physical Review*, **108**(4):1070–1076, (1957). Citado na(s) página(s): [45](#)
- [57] E. Schrödinger. Die naturwissenschaften. **23**:807–821, (1935). Citado na(s) página(s): [45](#)
- [58] J. S. Bell. On the Einstein Podolsky Rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, **1**(3):195–200, (1964). Citado na(s) página(s): [45](#)
- [59] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, and R. A. Holt. Proposed Experiment to Test Local Hidden-Variable Theories. *Physical Review Letters*, **23**(15):880–884, (1969). Citado na(s) página(s): [45](#)
- [60] B. S. Cirel'son. Quantum generalizations of Bell's inequality. *Letters in Mathematical Physics*, **4**(2):93–100, (1980). Citado na(s) página(s): [45](#)
- [61] M. Laméhi-Rachti and W. Mittig. Quantum mechanics and hidden variables: A test of Bell's inequality by the measurement of the spin correlation in low-energy proton-proton scattering. *Physical Review D*, **14**(10):2543–2555, (1976). Citado na(s) página(s): [46](#)
- [62] M. A. Rowe, D. Kielpinski, V. Meyer, C. A. Sackett, W. M. Itano, C. Monroe, and D. J. Wineland. Experimental violation of a Bell's inequality with efficient detection. *Nature*, **409**(6822):791–794, (2001). Citado na(s) página(s):

- [63] D. N. Matsukevich, P. Maunz, D. L. Moehring, S. Olmschenk, and C. Monroe. Bell Inequality Violation with Two Remote Atomic Qubits. *Physical Review Letters*, **100**(15):150404, (2008). Citado na(s) página(s):
- [64] A. Aspect. Bell's Theorem: The Naive View of an Experimentalist. In *Quantum [Un]speakables*. Springer Berlin Heidelberg, (2002). Citado na(s) página(s): [46](#)
- [65] W. K. Wootters. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, **80**(10):2245–2248, (1998). Citado na(s) página(s): [47](#)
- [66] C. E. Shannon. A Mathematical Theory of Communication. *Bell System Technical Journal*, **27**(3):379–423, (1948). Citado na(s) página(s): [47](#)
- [67] J. Von Neumann. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton University Press, (1996). Citado na(s) página(s): [47](#)
- [68] A. Imamoglu, D. D. Awschalom, G. Burkard, D. P. DiVincenzo, D. Loss, M. Sherwin, and A. Small. Quantum information processing using quantum dot spins and cavity qed. *Physical Review Letters*, **83**(20):4204–4207, (1999). Citado na(s) página(s): [48](#)
- [69] V. Cerletti, W. A. Coish, O. Gywat, and D. Loss. Recipes for spin-based quantum computing. *Nanotechnology*, 16(4), (2005). Citado na(s) página(s): [48](#)
- [70] C. W.J. Beenakker, C. Emary, M. Kindermann, and J. L. van Velsen. Proposal for production and detection of entangled electron-hole pairs in a degenerate electron gas. *Physical Review Letters*, **91**, (2003). Citado na(s) página(s): [49](#), [51](#)
- [71] V. A. Gopar and D. Frustaglia. Statistics of orbital entanglement production in quantum-chaotic dots. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **77**(15), (2008). Citado na(s) página(s): [51](#)