

Eduardo Henrique dos Santos

Simulação computacional da produção de emaranhamento em ponto quântico caótico não ideal para ensembles de Wigner-Dyson

São Cristóvão - SE - Brasil

2015

Eduardo Henrique dos Santos

**Simulação computacional da produção de emaranhamento em ponto quântico caótico não ideal para ensembles de Wigner-Dyson**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Universidade Federal de Sergipe – UFS

Departamento de Física

Núcleo de Pós-Graduação em Física (NPGFI)

Orientador: Prof. Dr. Francisco Assis Gois de Almeida

São Cristóvão - SE - Brasil

2015

*Dedicado a todos os que me apoiaram durante a realização deste trabalho,  
especialmente aos meus pais que tanto me incentivaram.*

# Agradecimentos

Primeiramente a **Deus** por permitir esta conquista. Ele faz coisas maravilhosas e perfeitas que não somos capazes de entender, mas somos capazes de aceitar e crer.

Aos meus pais **Getulio de Jesus** e **Maria Lourenço** por me educarem com tanto cuidado e carinho. Certamente isso foi crucial para alcançar este resultado. Também agradeço aos meus irmãos pela contribuição.

A toda a minha **família** que me incentivaram e compartilharam comigo a satisfação em eu estar realizando este trabalho tão importante.

A minha namorada **Géssyca Ferreira**, por estar sempre me apoiando carinhosamente e com muito amor, acompanhando meu desenvolvimento na pesquisa que resultou nesta dissertação. Sua contribuição bastante notável.

Ao meu orientador e amigo **prof. Dr. Francisco Assis**, cuja dedicação e preocupação pela minha carreira é intensa. Seu esforço é essencial para o sucesso desta pesquisa e, certamente, acarretará em uma importante colaboração para a ciência e a tecnologia.

Aos meus amigos **Me. Elenilda Josefa**, **Me. José Jaédson** (também orientandos do prof. Dr. Francisco Assis), **Me. Francisco de Assis** e demais alunos de pós-graduação em física, pelos momentos de descontração e união durante os estudos.

Aos demais **professores do departamento de física**, especialmente ao **prof. Dr. Gerson Cortês** pelo apoio e conversas descontraídas e aos professores das disciplinas que cursei durante o mestrado.

Aos professores **Dr. André Maurício** e **Dr. Sergio Rodríguez** por fazerem parte da banca de avaliação da minha defesa de dissertação. Seus questionamentos me ensinaram mais e suas dicas servirão para o aperfeiçoamento do meu trabalho.

A todos os **amigos**, sem exceção, por demonstrarem o desejo de que eu conseguisse realizar este sonho e pelo apoio, especialmente a amigos que deixei no Ceará, a exemplo de **Roberto Duarte**, **Gleson Moreira** e **Jonas Teixeira**.

*“E não vos conformeis com este mundo,  
mas transformai-vos  
pela renovação do vosso entendimento,  
para que experimenteis qual seja a boa,  
agradável e perfeita vontade de Deus.  
(Bíblia Sagrada, Romanos 12:2)*

# Resumo

Os recentes avanços da tecnologia requisitam da ciência um tratamento cada vez mais complexo. Os dispositivos com intensa miniaturização, em especial, já não podem ser estudados utilizando-se somente a física clássica. A abordagem quântica se torna essencial quando os condutores alcançam tamanhos da ordem dos comprimentos característicos dos elétrons que são transportados. Sistemas neste regime apresentam algumas características importantes, como interferência quântica e quantização de algumas grandezas, e são chamados mesoscópicos. O emaranhamento é uma propriedade com grande aplicabilidade tecnológica e que só pode ser explicada através do tratamento quântico. A função de onda de um sistema emaranhado não pode ser decomposta em funções de ondas de cada constituinte. Um sistema mesoscópico que tem sido bastante utilizado como emaranhador de elétrons é o ponto quântico. O transporte de elétrons em um ponto quântico pode ser caracterizado pela matriz de espalhamento. Os autovalores de transmissão extraídos da matriz de espalhamento fornecem algumas quantidades relacionadas ao transporte de elétrons, inclusive a quantificação do emaranhamento. Nesta dissertação estudamos estatisticamente a produção de emaranhamento em um ponto quântico caótico (PQC) com contatos não ideais. Esses PQCs são modelados por centros de espalhamento conectados a guias de ondas com barreiras de potencial e o transporte de elétrons é descrito por matrizes de espalhamento aleatórias. Consideramos para as cavidades dos PQCs as simetrias de reversão temporal e invariância sob rotação de spin, sendo suas matrizes de espalhamento pertencentes aos ensembles de Wigner-Dyson. A concorrência foi utilizada para quantificar o emaranhamento e o estudamos estatisticamente. Analisamos da mesma forma a norma quadrada, também dependente dos autovalores de transmissão e que representa a probabilidade do sistema retornar um estado final emaranhado. Definimos o fator de produção de emaranhamento para determinar de forma mais precisa a eficiência do emaranhamento no PQC. Utilizamos um algoritmo para gerar as matrizes de espalhamento e obter os autovalores de transmissão de cada matriz. Calculamos as médias da concorrência, da norma quadrada e do fator de produção de emaranhamento e também algumas distribuições dessas quantidades variando-se a opacidade dos guias de onda.

**Palavras-chave:** Emaranhamento. Ponto quântico. Simulação numérica.

# Abstract

The recent advances in technology require an increasingly complex treatment from science. Devices intensely miniaturized especially cannot be treated with classical physics only. The quantum approach becomes essential when the size of the conductors reaches the order of the electron characteristic lengths. Systems in this regime exhibit some important features, such as quantum interference and quantization of some quantities, and are named mesoscopic systems. Entanglement is a property with large technological applicability and can only be explained with the quantum approach. The quantum dot is very useful as mesoscopic entangler of electrons. The electron transport in a quantum dot can be described by the scattering matrix. The transmission eigenvalues obtained from the scattering matrix provide some quantities related to the electron transport, including the quantifier of entanglement. In this work we study statistically the entanglement production in a chaotic quantum dot (CCD) with nonideal contacts. These CCDs are modeled as scattering centers attached to two wave guides having potential barriers and the electron transport is described by random scattering matrices. We consider time reversal and spin rotation symmetries for the cavities so that the scattering matrices belong to the Wigner-Dyson ensembles. The concurrence was used for quantifying entanglement and was also statistically investigated. Similarly, we analyse the squared norm which is also dependent of the transmission eigenvalues and represents the probability of the scatterings result in an entangled state. We define the entanglement production factor for determining more precisely the efficiency of the entangler. We used a third-party algorithm to generate the scattering matrices and then we found the transmission eigenvalues for each matrix. We computed the averages of concurrence, squared norm and entanglement production factor and generated some of their distribution curves varying the opacities of the leads.

**Keywords:** Entanglement. Quantum dot. Numerical simulation.

# Lista de ilustrações

Figura 1	– Esquema contendo exemplos de funções de onda em dois regimes: a) não-localizado e b) localizado. . . . .	17
Figura 2	– Esquema mostrando os comprimentos característicos e os regimes de transporte em função da dimensão $L$ do sistema. . . . .	18
Figura 3	– Ilustração de dois sistemas que apresentam, respectivamente, regimes a) balístico e b) difusivo. . . . .	19
Figura 4	– Comparação entre escalas características de diversos sistemas. . . . .	19
Figura 5	– Esquema da a) heteroestrutura que gera um gás bidimensional de elétrons na interface Ga[Al]As-GaAs e de suas bandas de energia b) antes e c) depois da formação da interface. . . . .	22
Figura 6	– a) Ilustração de um ponto de contato quântico. Os sinais $-$ e $+$ representam a voltagem aplicada de forma que o fluxo de elétrons ocorra. b) Imagem de um ponto de contato quântico obtida através de microscopia eletrônica de varredura. . . . .	23
Figura 7	– Ilustração a) de um guia de onda retangular com potencial nulo no interior e infinito nas paredes e no exterior e b) sua visualização lateral em duas situações: quando a altura $a$ e a largura $b$ do guia são constantes (imagem superior) e variáveis (imagem inferior). c) Potencial efetivo dos canais de transporte. As curvas em azul e vermelho representam, respectivamente, os canais abertos e fechados para transporte de elétrons. . . . .	25
Figura 8	– Condutância em função do potencial do portão de voltagem de um ponto de contato quântico formado em um gás bidimensional de elétrons. . . . .	27
Figura 9	– Ilustração de condutores não ideais, representado por um guia de ondas contendo uma zona de bloqueio cuja probabilidade de um elétron ser transmitido em um canal $i$ é $T_i$ . . . . .	29
Figura 10	– Imagens feitas por microscopia eletrônica de varredura de a) um ponto quântico com dois pontos de contato com canais abertos e b) um sistema formado por dois pontos quânticos conectados. As regiões preenchidas com malhas coloridas representam pontos quânticos distintos e os pontos de contato especificados são aqueles com canais abertos. . . . .	30

Figura 11 – Esquema de modelos de pontos quânticos para diversos números de canais abertos para a condução de elétrons e a forma de suas respectivas matrizes de espalhamento. Cada canal está representado por $C_{g,c}$ , em que os subscritos $g$ e $c$ representam o guia e o canal, respectivamente. As cores distintas representam os diferentes guias e as linhas tracejadas delimitam os blocos de reflexão dos guias e de transmissão entre dois guias distintos. Os pontos quânticos apresentados são os seguintes: a) com dois guias de canal único; b) o mesmo que $a$ adicionando-se um segundo canal ao primeiro guia; c) o mesmo que $b$ adicionando-se um terceiro guia de canal único e d) o mesmo que $c$ adicionando-se um quarto guia de três canais. . . . .	34
Figura 12 – Esquema de rede de centros de espalhamento a) em paralelo e b) em série ( $N_i$ e $N'_i$ representam o número de canais nos respectivos guias conectados nos centros de espalhamento). c) A combinação resultará em apenas uma matriz de espalhamento $S_{ef}$ conectada a guias com $N_{1,ef}$ e $N_{2,ef}$ canais. $N_{1,ef} = \sum_i N_i$ e $N_{2,ef} = \sum_i N'_i$ na associação de rede em paralelo, enquanto $N_{1,ef} = N_0$ e $N_{2,ef} = N_{m+1}$ na associação de rede em série. . . . .	36
Figura 13 – Ilustração de dois centros de espalhamentos conectados em série. Uma das amplitudes de saída de um centro é a amplitude de entrada do outro e vice versa.	37
Figura 14 – Ilustração de a) um sistema regular, sem caos, e b) um sistema caótico. Duas partículas (esferas em azul e vermelho) se movem no sentido da esquerda para a direita sofrendo reflexões nas paredes tracejadas. Após a adição de falhas, o número de graus de liberdade aumenta e a dinâmica se torna muito sensível às condições iniciais. A distância entre as partículas deixa de ter uma relação linear com o tempo, aumentando exponencialmente a uma taxa $\lambda_L$ conhecido como expoente de Lyapunov. . . . .	41
Figura 15 – Gráfico da entropia de von Neumann em função do módulo de uma das amplitudes do par de <i>qubits</i> . . . . .	50
Figura 16 – Ilustração de um ponto quântico contendo dois guias. Cada guia $i$ possui dois canais e uma probabilidades de reflexão representada por opacidade $\gamma_i$ . . . .	54
Figura 17 – Gráficos tridimensionais da média da concorrência $\langle C \rangle$ em função das opacidades $\gamma_1$ e $\gamma_2$ nos guias para a) $\beta = 1$ , b) $\beta = 2$ e c) $\beta = 4$ . . . . .	56
Figura 18 – Gráficos tridimensionais da média da norma quadrada $\langle \mathcal{N} \rangle$ em função das opacidades $\gamma_1$ e $\gamma_2$ nos guias para a) $\beta = 1$ , b) $\beta = 2$ e c) $\beta = 4$ . . . . .	57
Figura 19 – Gráficos tridimensionais do fator de produção de emaranhamento $\langle \eta \rangle$ em função das opacidades $\gamma_1$ e $\gamma_2$ nos guias para a) $\beta = 1$ , b) $\beta = 2$ e c) $\beta = 4$ . . . .	58
Figura 20 – Média da concorrência $\langle C \rangle$ em função da opacidade $\gamma_1$ do guia 1 (o guia 2 tem opacidade fixa $\gamma_2 = 0$ ). As cores distinguem os gráficos referentes as diferentes simetrias $\beta = 1, 2, 4$ . . . . .	59

Figura 21 – Média da norma quadrada $\langle \mathcal{N} \rangle$ em função da opacidade $\gamma_1$ do guia 1 (o guia 2 tem opacidade fixa $\gamma_2 = 0$ ). As cores distinguem os gráficos referentes as diferentes simetrias $\beta = 1, 2, 4$ . . . . .	60
Figura 22 – Média fator de produção de emaranhamento $\langle \eta \rangle$ em função da opacidade $\gamma_1$ do guia 1 (o guia 2 tem opacidade fixa $\gamma_2 = 0$ ). As cores distinguem os gráficos referentes as diferentes simetrias $\beta = 1, 2, 4$ . . . . .	60
Figura 23 – Distribuições da concorrência $\mathcal{C}$ para as simetrias $\beta = 1, 2, 4$ . . . . .	62
Figura 24 – Distribuições da norma quadrada $\mathcal{N}$ para as simetrias $\beta = 1, 2, 4$ . . . . .	63
Figura 25 – Distribuições do fator de produção de emaranhamento $\eta$ para as simetrias $\beta = 1, 2, 4$ . . . . .	64

# Lista de tabelas

Tabela 1	–	Classes de Wigner-Dyson para o ensemble circular . . . . .	45
Tabela 2	–	Máximos valores de $\langle C \rangle$ , $\langle \mathcal{N} \rangle$ e $\langle \eta \rangle$ nas três simetrias com os respectivos valores de $\gamma_2$ para $\gamma_1 = 0$ . . . . .	58
Tabela 3	–	Pares de coordenadas das intersecções entre curvas $\langle C \rangle$ e $\langle \eta \rangle$ . . . . .	59

## Lista de abreviaturas e siglas

PCQ	Ponto de contato quântico
GBE	Gás bidimensional de elétrons
MEV	Microscopia eletrônica de varredura
PQ	Ponto quântico
SRT	Simetria de reversão temporal
IRS	Invariância sob rotação de spin

# Lista de símbolos

$l_m$	Caminho livre médio elástico
$l_\phi$	Comprimento de coerência de fase
$\tau_c$	Tempo médio de relaxação do momento no modelo de Drude-Sommerfeld
$\tau_m$	Tempo médio de relaxação do momento corrigido
$\tau_\phi$	Tempo médio de relaxação de fase
$\lambda_F$	Comprimento de onda de Fermi
$\xi$	Comprimento de localização eletrônica
$D$	Constante de difusão
$L$	Dimensão do sistema

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>15</b>
1.1	Escalas características	16
1.2	Regimes de transporte	17
1.3	Visão geral da dissertação	18
<b>2</b>	<b>Sistemas mesoscópicos</b>	<b>21</b>
2.1	Gás bidimensional de elétrons	21
2.2	Ponto de contato quântico	23
2.2.1	Quantização da condutância	26
2.2.2	Cálculo da condutância do ponto de contato quântico	26
2.2.3	A fórmula de Landauer	28
2.3	Ponto quântico	29
2.4	Sumário	30
<b>3</b>	<b>Matriz de espalhamento</b>	<b>32</b>
3.1	Histórico	32
3.2	Formulação da matriz $S$	32
3.3	Associação de centros de espalhamento	35
3.3.1	Associação de centros de espalhamento em paralelo	36
3.3.2	Associação de centros de espalhamento em série	37
3.4	Sumário	39
<b>4</b>	<b>Teoria de matrizes aleatórias</b>	<b>40</b>
4.1	Histórico	40
4.2	Simetria de reversão temporal	41
4.3	Ensemble circular e núcleo de Poison	43
4.4	Sumário	45
<b>5</b>	<b>Emaranhamento</b>	<b>46</b>
5.1	Histórico	46
5.2	Emaranhamento de <i>qubits</i>	47
5.3	Grau de emaranhamento	48
5.3.1	Estados mistos e puros	49
5.3.2	Entropia de von Neumann	49
5.3.3	Emaranhamento de formação	50
5.4	Concorrência	51
5.5	Emaranhamento em pontos quânticos	52
<b>6</b>	<b>Simulação computacional</b>	<b>54</b>
6.1	Metodologia	54
6.2	Resultados	55

6.2.1	Contatos com opacidades arbitrárias . . . . .	55
6.2.2	Um contato ideal . . . . .	57
<b>7</b>	<b>Conclusões . . . . .</b>	<b>65</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>67</b>
 <b>Apêndices</b>		<b>74</b>
	<b>APÊNDICE A Unitariedade da matriz <math>\mathbb{S}</math> . . . . .</b>	<b>75</b>

# 1 | Introdução

Nos últimos 50 anos, algumas características tecnológicas têm sido bastante aprimoradas. Podemos destacar algumas delas: aumento de desempenho, facilidade de uso, atribuição de novas funções, redução de custos de fabricação e manutenção, aumento da durabilidade e redução no tamanho dos dispositivos. Cada uma dessas características é limitada por barreiras a serem rompidas com intensas pesquisas teóricas e experimentais[1]. Atrelada à redução de custo de fabricação e requerida pelos consumidores cada vez mais exigentes, a redução no tamanho dos dispositivos se torna de grande interesse.

Os maiores desafios da tecnologia estão associados a fenômenos físicos tanto descobertos recentemente (como a magnetoresistência gigante) quanto tradicionais (como propriedades ópticas e de condução elétrica e campo magnético). As pesquisas em um determinado fenômeno nunca estarão esgotadas nem serão suficientes para que seja possível atender às novidades. Um grande exemplo disso é que a miniaturização de dispositivos requer uma reformulação da teoria de condução eletrônica. Isso ocorre porque efeitos exclusivamente quânticos se tornam mais abrangentes em escala reduzida e devem ser levados em consideração.

Na situação em que um sistema físico tem suas dimensões reduzidas de forma que há uma miscelância entre efeitos clássicos e quânticos, o mesmo pode ser analisado através de uma abordagem semiclássica. O ramo da física que estuda sistemas nesta circunstância é a *física mesoscópica*<sup>1</sup>. Este campo tem se desenvolvido desde a década de 1980. Nos últimos anos, o termo mesoscópico tem sido mais usado para diferenciar escalas, enquanto o ramo tem sido renomeado para transporte quântico<sup>2</sup>[2].

<sup>1</sup> Muitas vezes o termo física mesoscópica é mal interpretado na tentativa de simplificar seu significado. Embora *meso-* seja um prefixo que significa intermediário, o adjetivo mesoscópico não deve ser atribuído a sistemas que estão em uma escala entre microscópico e macroscópico, mas sim a sistemas em que efeitos quânticos e clássicos estão presentes. O motivo é que essas designações (micro- e macroscópico) não são bem definidas e variam entre diversos tipos de sistema

<sup>2</sup> A Ref. 2 utiliza o termo *transporte quântico* substituindo *física mesoscópica*, embora o segundo apresente um significado mais geral.

## 1.1 Escalas características

É importante definir quando o sistema se encontra no regime mesoscópico a partir de algumas escalas, chamadas escalas de comprimentos característicos. Os fenômenos quânticos são acentuados à medida que o sistema diminui para dimensões da ordem dos comprimentos característicos. Se o sistema for muito maior que esses comprimentos, os efeitos quânticos em geral são enfraquecidos e o sistema pode ser caracterizado classicamente. As principais escalas de comprimento utilizadas no transporte quântico são [3, 4]:

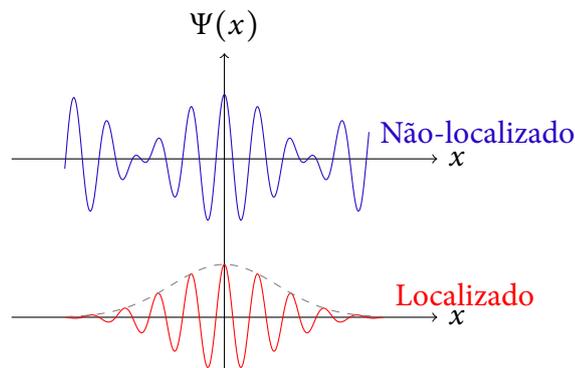
- a) **Caminho livre médio elástico**,  $l_m$ : É a distância média que um elétron percorre entre sucessivas colisões<sup>3</sup> elásticas, ie., colisões sem mudança de energia.  $l_m$  está associado ao tempo de relaxação do momento<sup>4</sup>  $\tau_m$  por  $l_m = v_F \tau_m$ , em que a velocidade de Fermi  $v_F$  é dada por  $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ .
- b) **Comprimento de onda de Fermi**,  $\lambda_F$ : Corresponde ao comprimento de onda de Broglie de elétrons com energia de Fermi  $\epsilon_F$ . Em baixas temperaturas somente elétrons com energias próximas à energia de Fermi podem ser conduzidos. O comprimento de onda de Fermi pode ser calculado através de  $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \frac{h}{\sqrt{2m^* \epsilon_F}}$  em que  $m^*$  é a massa efetiva do elétron<sup>5</sup>, com  $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$  e  $E$  é a energia do elétron. O caráter ondulatório do elétron é evidenciado se as dimensões do sistema são comparáveis a  $\lambda_F$ .
- c) **Comprimento de localização eletrônica**,  $\xi$ : Caracteriza a extensão da função de onda. A função de onda associada a um elétron é mais extensa em um meio condutor e mais localizada em um meio isolante. Então, no primeiro caso o comprimento de localização é maior que no segundo. Este comprimento é determinado pela a média do logaritmo de  $|\Psi(x)|$  já que, por definição,  $|\Psi(\vec{r})| \sim \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\xi)$  cai exponencialmente nas localizações extremas[5, 6]. A [Figura 1](#) ilustra de forma genérica situações de funções de onda com alto e baixo comprimento de localização.
- d) **Comprimento de coerência de fase**,  $l_\phi$ : Semelhante ao livre caminho médio, este comprimento é referente à distância média que um elétron percorre sem que sua onda perca coerência de fase. Duas ondas são coerentes se elas possuem uma fase relativa constante e decoerentes se suas fases não possuem correlação entre si. Quando as ondas deixam de ser coerentes, dizemos que há relaxação de fase. A coerência é muito importante no processo de interferência de duas ondas ou mesmo de uma onda com si mesma após os espalhamentos. A interferência, por sua vez, evidencia as

<sup>3</sup> Os elétrons na verdade sofrem espalhamentos e não colisões. Entretanto, alguns autores utilizam o termo colisão por uma questão de simplicidade.

<sup>4</sup> O modelo de Drude-Sommerfeld utiliza o tempo médio entre sucessivas colisões,  $\tau_c$ , ao invés de  $\tau_m$ . Isso ocorre porque este modelo considera processos de espalhamento instantâneos. Logo,  $\tau_m$  é o tempo efetivo que corrige  $l_m$  em modelos que consideram espalhamentos não-instantâneos. Os dois tempos são relacionados por  $\tau_m = \frac{\tau_c}{\alpha_m}$ , em que  $\alpha_m$  denota a efetividade do espalhamento em destruir o momento inicial da partícula.

<sup>5</sup> Quando um elétron é submetido a potenciais periódicos (como os da rede cristalina, por exemplo), a ação de uma força externa (como o campo elétrico) faz com que o elétron se desloque como se sua massa estivesse alterada.

Figura 1 – Esquema contendo exemplos de funções de onda em dois regimes: a) não-localizado e b) localizado.



Fonte: Figura produzida pelo autor e baseada na Ref. 7.

características quânticas do sistema. Espalhamentos elétron-elétron, elétron-fônon e a partir de impurezas magnéticas são alguns dos processos que causam relaxação de fase. Em sistemas de alta mobilidade, o comprimento de coerência de fase é da ordem do caminho livre médio e dado por

$$l_\phi = v_F \tau_\phi \sim l_m,$$

sendo  $\tau_\phi$  o tempo médio de relaxação de fase. Entretanto, em sistemas com baixa mobilidade, o elétron pode ser espalhado várias vezes sem perder sua coerência de fase, por defeitos ou impurezas não-magnéticas, por exemplo, caracterizando um regime difusivo. Neste caso, o comprimento de coerência de fase costuma ser bem maior que o caminho livre médio e dado por

$$l_\phi = v_F \sqrt{\frac{\tau_m \tau_\phi}{2}} = \sqrt{D \tau_\phi},$$

e  $D = \sqrt{v_F^2 \tau_m / 2}$  é chamado constante de difusão.

Um sistema está no regime mesoscópico quando pelo menos uma de suas dimensões é menor que seu comprimento de coerência de fase. No regime mesoscópico, o sistema não pode ser totalmente caracterizado apenas por teorias clássicas. O comprimento de coerência de fase é então o principal comprimento característico quando se determina os fenômenos de transporte eletrônico.

## 1.2 Regimes de transporte

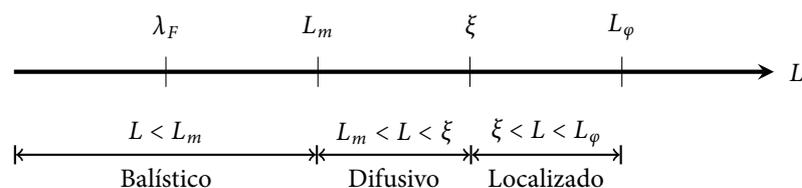
Os regimes de transporte informam as características de condução dos elétrons no sistema e são definidos pela relação entre o tamanho da amostra e os comprimentos característicos.

Considerando um sistema com dimensões de comprimento  $L$ , o regime de transporte pode ser classificado como:

- Regime balístico** Neste regime os elétrons se deslocam praticamente sem sofrer espalhamento. Colisões podem ocorrer eventualmente, mas com frequência irrelevante. Ocorrem quando as dimensões do sistema são menores que o livre caminho médio ( $L < L_m$ ).
- Regime difusivo** Nesta situação, o elétron é espalhado com muita frequência comparado ao regime balístico. Entretanto, no regime difusivo o elétron ainda pode percorrer todo o sistema. Então esse regime ocorre para  $L_m < L < \xi$ .
- Regime localizado** Se o elétron se encontra confinado em uma região pequena e sem sofrer espalhamentos frequentes, o regime será chamado localizado. Neste caso, a função de onda é mais estreita na região de confinamento, diminuindo a probabilidade de se encontrar o elétron em outra região. A relação satisfeita é  $\xi < L < L_\phi$ .

A [Figura 2](#) agrupa as escalas características com os regimes de transporte, mostrando quando cada regime ocorre ao se alterar a dimensão  $L$  do sistema. A diferença entre os regimes balístico e difusivo é esquematizado na [Figura 3](#). Os comprimentos característicos podem variar bastante entre diferentes sistemas e, conseqüentemente, as dimensões em que cada regime de transporte se encontra. Esse é o motivo pelo qual não existe um intervalo pequeno nas dimensões de um sistema que o caracteriza como mesoscópico. Segue na [Figura 4](#) comparações entre alguns comprimentos característicos e dimensões na escala logarítmica de sistemas no regime mesoscópico.

Figura 2 – Esquema mostrando os comprimentos característicos e os regimes de transporte em função da dimensão  $L$  do sistema.

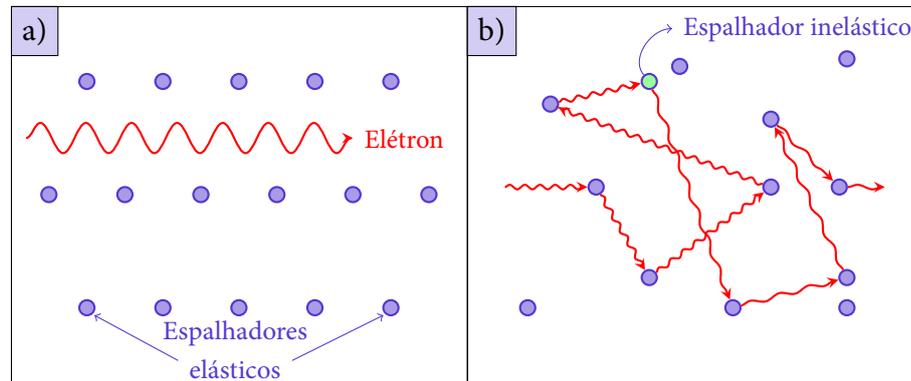


Fonte: Baseado na Ref. 8.

### 1.3 Visão geral da dissertação

Vimos neste capítulo como as requisições da tecnologia são importantes para o desenvolvimento de diversas áreas da ciência, especialmente a física mesoscópica. O recíproco também é válido, quando as pesquisas aprimoram as teorias para posterior uso em alguma situação prática. Apresentamos então as condições para caracterizar o transporte de elétrons em sistemas mesoscópicos e quando o sistema se encontra neste regime.

Figura 3 – Ilustração de dois sistemas que apresentam, respectivamente, regimes a) balístico e b) difusivo.



Fonte: Próprio autor.

Figura 4 – Comparação entre escalas características de diversos sistemas.

1 mm	Caminho livre médio no regime de Hall quântico
100 $\mu\text{m}$	Caminho livre médio/comprimento de relaxação de fase em semicondutores de alta mobilidade em $T < 4\text{K}$
10 $\mu\text{m}$	
1 $\mu\text{m}$	Dispositivos semicondutores comercializados na década de 1990
100 nm	
10 nm	Comprimento de onda de Broglie em semicondutores Caminho livre médio em filmes metálicos policristalinos
1 nm	Comprimento de onda de Broglie em metais
1 Å	Distância entre átomos

Fonte: Adaptado da Ref. 3.

No [Capítulo 2](#) abordaremos alguns sistemas mesoscópicos importantes para este trabalho, e também suas propriedades e aplicações. O gás bidimensional de elétrons e o ponto de contato quântico são exemplos dos sistemas que discutiremos.

No [Capítulo 3](#) estudaremos como o transporte de elétrons em um ponto quântico pode ser descrito pela matriz de espalhamento relacionando amplitudes de entrada e de saída.

O [Capítulo 4](#) será destinado para a teoria de matrizes aleatórias. Uma discussão básica acerca dos ensembles de Wigner-Dyson será feita para que possamos compreender como as matrizes de espalhamento que representam os pontos quânticos são geradas.

O [Capítulo 5](#) será reservado para emaranhamento, que é o efeito quântico mais estudado nesta dissertação.

No [Capítulo 6](#) são mostrados os resultados obtidos através de simulação computacional do sistema ponto quântico formados por dois pontos de contato. Verificaremos a produção de emaranhamento neste sistema e compararemos resultados para os ensembles de Wigner-Dyson.

Para finalizar, no [Capítulo 7](#) apresentamos um resumo dos resultados obtidos como conclusão da dissertação.

## 2 | Sistemas mesoscópicos

Neste capítulo serão apresentados alguns dos mais importantes sistemas na física mesoscópica. Embora existam vários tipos de sistemas neste regime, nosso trabalho se baseia em um agrupamento de três sistemas. Primeiramente, apresentaremos o gás bidimensional de elétrons. Este sistema é a base de construção dos pontos de contato. Um conjunto de pontos de contato, por sua vez, pode formar uma ou várias cavidades. Este conjunto se chama ponto quântico e é nosso principal sistema de estudo.

### 2.1 Gás bidimensional de elétrons

Entre as décadas 1960 e 1970, o gás bidimensional de elétrons (GBE) começou a ser muito pesquisado na área de semicondutores. Embora o sistema inteiro não seja necessariamente bidimensional, o nome bidimensional está associado ao movimento elétrons em apenas duas dimensões. O termo gás, por sua vez, é uma analogia ao comportamento livre dos elétrons. Desta forma, os elétrons muitas vezes se comportam como partículas não-interagentes, formando um gás ideal bidimensional de elétrons. Embora existam, de fato, interações elétron-elétron e de elétrons com outros constituintes do sistema, elas podem ser desprezadas se forem suficientemente fracas[9].

Há vários sistemas GBE e alguns dos mais estudados são a superfície do líquido de hélio, casos especiais de filmes finos e agrupamento de camadas de materiais semicondutores[10]. Devido a sua maior importância para o tema de pesquisa desta dissertação, este trabalho se limitará ao último exemplo.

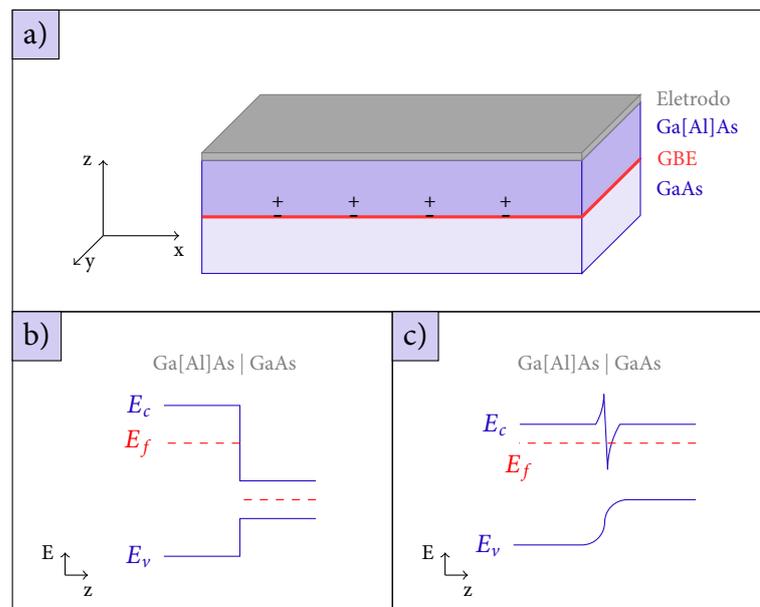
Semicondutores puros possuem densidades de cargas negativa e positiva iguais e não são bons condutores em baixas temperaturas. Ao aumentar a temperatura, alguns elétrons podem saltar da banda de valência para a banda de condução. Entretanto, alta temperatura desfaz muitos efeitos quânticos (por exemplo, coerência de fase de onda) devido principalmente aos espalhamentos do tipo elétron-fônon. A solução é obtida através da dopagem desses materiais, tornando-os semicondutores extrínsecos. A dopagem consiste de adição de elementos extras em pequenas concentrações e seu objetivo é aumentar ou diminuir a densidade de cargas negativas em relação às positivas. Com uma dopagem doadora de elétrons, mesmo em temperaturas quase

nulas, alguns desses elétrons podem contribuir para a condução no semicondutor. Uma das grandes vantagens do uso de semicondutores dopados é o alto controle da densidade de elétrons através da concentração de dopagem. Particularmente no caso de uma camada semicondutora bidimensional, é também possível controlar a densidade de elétrons por meio de uma placa metálica próxima à camada, aplicando-se a ela uma voltagem negativa.

O GBE mais utilizado na física mesoscópica é a heteroestrutura formada por camadas de GaAs (Arseneto de gálio) e Ga[Al]As (Arseneto de gálio dopado com alumínio). O AlGaAs fornece elétrons que se acumulam na interface Ga[Al]As-GaAs, formando uma camada praticamente bidimensional. Esse acúmulo reduz a energia de *gap*<sup>1</sup>. Em geral, a redução é suficiente para que a energia de Fermi seja maior que a energia da banda de condução. Nesta situação a camada bidimensional deixa de se comportar como isolante e passa a conduzir os elétrons. É importante que se crie uma heteroestrutura cristalina com bastante cuidado no intuito de gerar o mínimo de defeitos. Desta forma, os espalhamentos eletrônicos no GBE serão reduzidos aumentando o livre caminho médio. Isso possibilita alcançar o regime mesoscópico mais facilmente[11].

A Figura 5 esquematiza uma heteroestrutura formada por camadas Ga[Al]As-GaAs e suas bandas de energia. Quando a interface é formada e as cargas dos elementos dopantes se acumulam nela, a energia de Fermi fica acima da energia da banda de condução. A partir deste momento esses elétrons podem ser conduzidos.

Figura 5 – Esquema da a) heteroestrutura que gera um gás bidimensional de elétrons na interface Ga[Al]As-GaAs e de suas bandas de energia b) antes e c) depois da formação da interface.



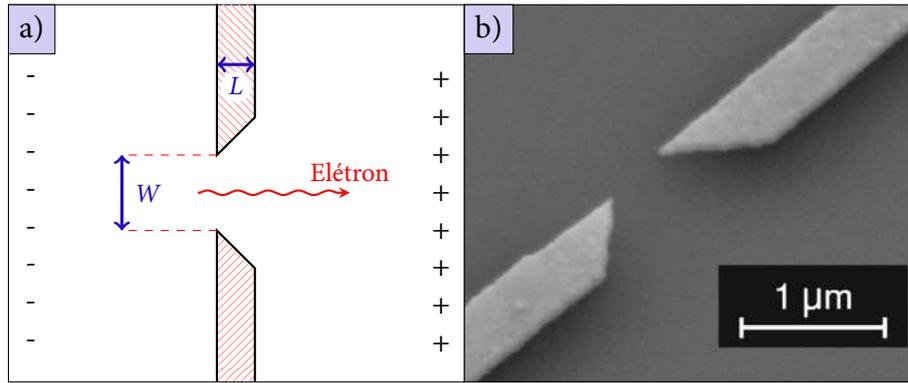
Fonte: a) Próprio autor; b) e c) Adaptados da Ref. 3.

<sup>1</sup> Energia de *gap* é a diferença entre as energias das bandas de valência e de condução.

## 2.2 Ponto de contato quântico

O ponto de contato quântico (PCQ) é o sistema mesoscópico mais simples, similar ao sistema formado pelo confinamento dos elétrons em um guia de ondas retangular de comprimento infinito. O PCQ é formado por uma constrição com largura  $L$  e abertura  $W$  e está representado na Figura 6 por uma imagem obtida através de microscopia eletrônica de varredura MEV e sua ilustração. As constrições são formadas por contatos com a aplicação de voltagens apropriadas para controlar o fluxo de elétrons pela abertura. O fluxo de elétrons ocorre na região branca da Figura 6.a e na região mais escura da Figura 6.b de forma balística ( $l_m \gg L$ ). O PCQ pode ser modelado por um guia de ondas com barreira de potencial e vamos nos basear na Ref. 2 para descrever como isso é feito.

Figura 6 – a) Ilustração de um ponto de contato quântico. Os sinais – e + representam a voltagem aplicada de forma que o fluxo de elétrons ocorra. b) Imagem de um ponto de contato quântico obtida através de microscopia eletrônica de varredura.



Fonte: a) Baseado na Ref. 12 e b) Retirado da Ref. 13.

Primeiramente, consideremos um elétron confinado em um guia de ondas retangular e sem barreira de potencial, como mostra a Figura 7. Por simplicidade, a altura e a largura do guia de ondas são mantidas constantes iguais a  $a$  e  $b$  (Figura 7.a e Figura 7.b superior), respectivamente, e o elétron se desloca livremente ao longo do eixo- $x$ . Ao selecionar  $y = 0$  e  $z = 0$  no centro do retângulo, o potencial será  $U = 0$  nas regiões em que  $|y| < \frac{a}{2}$  e  $|z| < \frac{b}{2}$  e  $U = \infty$  no espaço restante. Neste caso, a solução da equação de Schrödinger<sup>2</sup> fornece a seguinte função de onda associada ao elétron com massa  $m$  que se desloca no sentido  $+x$ :

$$\Psi_{k_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \psi_{k_x}(x) \Phi_{n_y, n_z}(y, z) \quad (2.1)$$

$$\psi_{k_x}(x) = e^{ik_x x} \quad (2.2)$$

$$\Phi_{n_y, n_z}(y, z) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin(k_y^n (y - a/2)) \sin(k_z^n (z - b/2)), \quad (2.3)$$

<sup>2</sup>  $\hat{\mathcal{H}}\Psi = i\hbar \frac{d}{dt}\Psi$  é a equação geral de Schrödinger. Quando os potenciais são independentes do tempo, a solução  $\Psi$  também é solução da equação de Schrödinger independente do tempo,  $(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V})\Psi = E\Psi$ .

em que  $k_x$  assume valores reais contínuos enquanto  $k_y^n = \pi n_y/a$  e  $k_z^n = \pi n_z/b$  são valores discretos pois  $n_y$  e  $n_z$  assumem apenas valores inteiros não negativos. Dessa forma, o movimento transversal do elétron está quantizado com determinados *modos de propagação*, chamadas também de *canais de propagação* e definidos pelo par  $n = (n_y, n_z)$ . A energia do elétron é então dependente do seu momento e do canal de transporte e escrita por

$$E_n(k_x) = E(k_x) + E_n = \frac{(\hbar k_x)^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_y^2}{a^2} + \frac{n_z^2}{b^2} \right). \quad (2.4)$$

O guia de onda descrito acima é bastante simples e permite que o elétron se propague sempre no mesmo sentido. É possível, entretanto, adicionar um potencial em uma região delimitada no interior do guia de ondas chamado *barreira de potencial*. No espalhamento do elétron ocasionado pela barreira de potencial, uma parte da onda é transmitida e outra parte é refletida. Vamos considerar o guia de ondas com a seguinte barreira de potencial:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{para } 0 < x < d \\ 0, & \text{outros casos.} \end{cases} \quad (2.5)$$

A barreira divide o guia de ondas em três regiões e a função de onda associada ao movimento longitudinal do elétron agora é dada pela solução da equação de Schrödinger em cada região:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}, & x < 0 \\ B e^{i\kappa x} + C e^{-i\kappa x}, & 0 < x < d \\ t e^{i\kappa x}, & x > d \end{cases}, \quad (2.6)$$

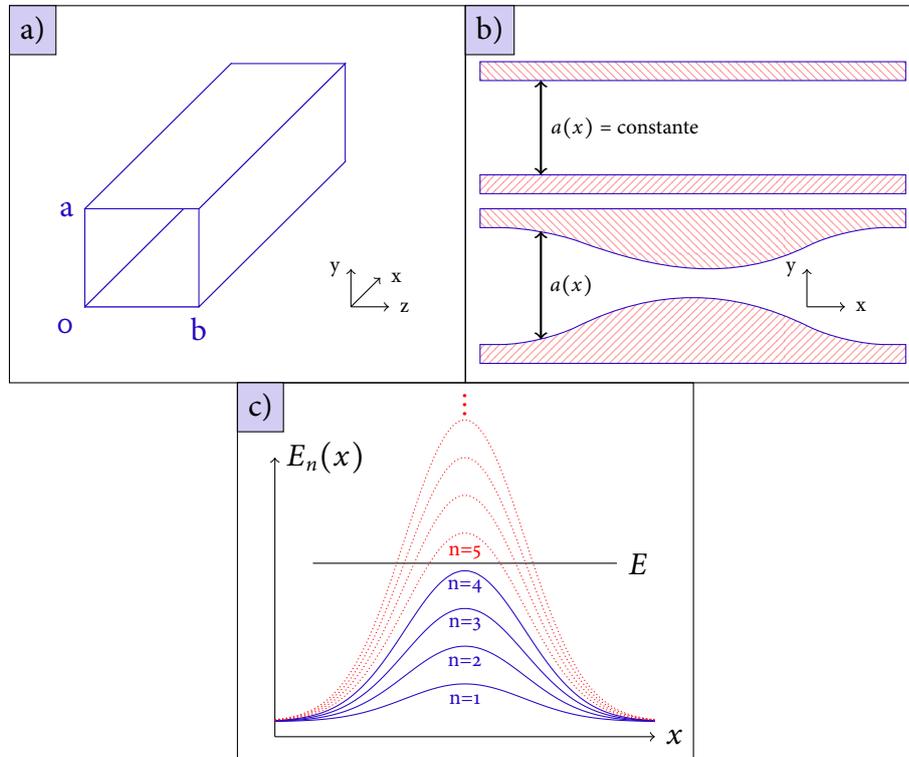
sendo  $k_x = \sqrt{2m(E - E_n)}/\hbar$  e  $\kappa = \sqrt{2m(E - E_n - U_0)}/\hbar$ . Na região  $x < 0$ ,  $\phi(x)$  possui dois termos referentes ao movimento inicial do elétron no sentido  $+x$  e à reflexão do elétron no sentido  $-x$ . Na região  $0 < x < d$ ,  $\phi(x)$  possui dois termos com coeficientes a serem encontrados. A região  $x > d$  contém apenas um termo referente à parte transmitida da onda. Os coeficientes  $r$ ,  $B$ ,  $C$  e  $t$  são obtidos pelas *condições de Dirichlet*<sup>3</sup>. Além disso,  $|t|^2 + |r|^2 = 1$  são, respectivamente, as probabilidades de transmissão (transmitância) e reflexão (reflectância) do elétron pela barreira de potencial.

Consideremos agora um guia de ondas sem barreira de potencial com altura  $a(x)$  e largura  $b(x)$  variáveis, de forma que em  $x = \pm\infty$  a altura e a largura são assintóticas e seus valores são  $a_\infty$  e  $b_\infty$ . No meio do guia de ondas,  $a(x)$  e  $b(x)$  diminuem e formam uma constrição. Nesta situação, a visualização lateral do guia de ondas está mostrada na parte inferior da [Figura 7.b](#). Achar a solução da equação de Schrödinger para este guia de ondas é bem mais complexa que para a situação anterior. Entretanto, quando a variação de  $a(x)$  e  $b(x)$  é muito suave, localmente as paredes podem ser consideradas planas e paralelas. Assim, também localmente, as variáveis são separáveis e a [Equação 2.1](#) se torna válida também para este caso. Esta situação ocorre quando

$$|a'(x)|, |b'(x)| \ll 1 \quad \text{e} \quad a(x)|a''(x)|, b(x)|b''(x)| \ll 1 \quad (2.7)$$

<sup>3</sup> A função de onda e sua primeira derivada são contínuas em todo o espaço, mesmo quando os potenciais não são contínuos.

Figura 7 – Ilustração a) de um guia de onda retangular com potencial nulo no interior e infinito nas paredes e no exterior e b) sua visualização lateral em duas situações: quando a altura  $a$  e a largura  $b$  do guia são constantes (imagem superior) e variáveis (imagem inferior). c) Potencial efetivo dos canais de transporte. As curvas em azul e vermelho representam, respectivamente, os canais abertos e fechados para transporte de elétrons.



Fonte: Baseado na Ref. 2.

A energia do canal de transporte<sup>4</sup>, dependente de  $x$  neste caso, é

$$E_n(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_y^2}{a(x)^2} + \frac{n_z^2}{b(x)^2} \right). \quad (2.8)$$

As energias dos canais de propagação formam uma barreira de potencial no centro da constrição. Considerando-se que barreira é impenetrável, em um determinado canal  $n$ , um elétron com energia  $E$  será transmitido se a altura da barreira de potencial  $E_{n,\max}$  for menor que  $E$  (canal aberto). Caso contrário, o elétron será refletido (canal fechado). Como a energia do canal é crescente com o índice  $n$ , há apenas um número finito de canais abertos cujas energias são menores que  $E$ .

Cada canal de transporte possui um coeficiente de transmissão  $T_n(E)$  dependente da energia do elétron. Exceto para canais cuja energia máxima estão muito próximas da energia do elétron ( $E \cong E_n, \max$ ), a barreira de potencial tem comportamento praticamente clássico, isto é,  $T_n(E) = 1$  para canais abertos e  $T_n(E) = 0$  para canais fechados. Assim, uma das propriedades

<sup>4</sup> Energia do canal de transporte será aqui definida como a energia quantizada referente à movimento transversal do elétron.

mais importantes do PCQ é a reflexão praticamente total de elétrons em canais fechados. Dizemos que os contatos são ideais e definimos por energia de corte  $\varepsilon_n$  a energia mínima que um elétron deve possuir para ser transmitido através do canal  $n$ .

### 2.2.1 Quantização da condutância

Uma propriedade importante observada em PCQs é a quantização da condutância, observada em heteroestruturas semicondutoras de Ga[Al]As-GaAs (ver seção 2.1). O transporte de elétrons neste sistema está restrito a duas dimensões e, por isso, é equivalente ao guia de ondas com largura  $b(x) \rightarrow 0$ . Nesta situação, apenas o primeiro canal de transporte associado à coordenada  $z$  é relevante e consideramos apenas os canais  $n = (n_y, 1)$  como abertos. A voltagem negativa aplicada aos eletrodos ilustrados na Figura 6 modifica  $a(x)$  cujo valor mínimo  $a_{\min}$  controla o número de canais abertos. Um novo canal  $n = (n_y, 1)$  é aberto quando sua energia de corte  $\varepsilon_n$  passa a ser menor que a energia de Fermi do sistema,

$$\varepsilon_n \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a_{\min}^2} n_y^2 = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad (2.9)$$

Então, o número de canais abertos é dado por

$$N_{\text{abertos}} = [k_F a_{\min} / \pi]. \quad (2.10)$$

À medida que a voltagem nos eletrodos (portão de voltagem<sup>5</sup>) é reduzida, mais canais são liberados de forma quantizada para o transporte de elétrons e a condutância aumenta discretamente e proporcional a  $N_{\text{abertos}}$ . Então é esperado um comportamento “do tipo escada” da condutância de um PCQ em função do potencial nos eletrodos. A Figura 8 mostra este comportamento no experimento pioneiro de medição de condutância em um PCQ em 1988. É interessante notar que esse experimento foi realizado antes da descrição teórica do PCQ[11].

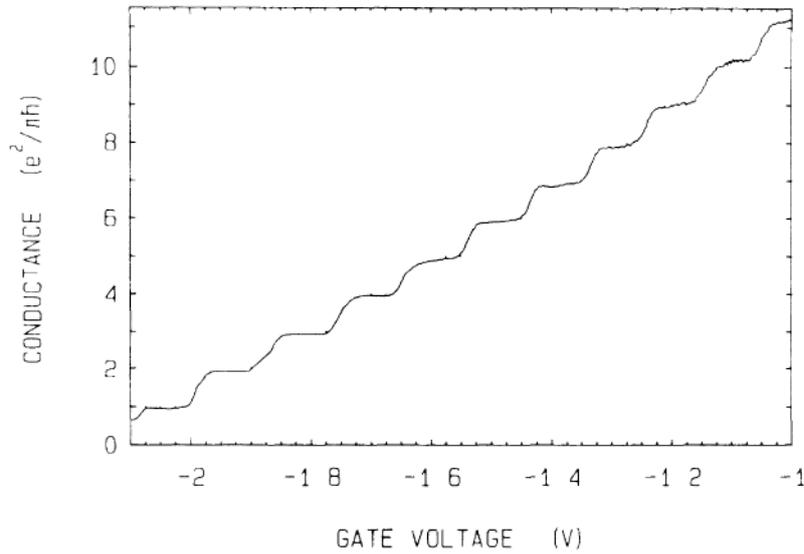
### 2.2.2 Cálculo da condutância do ponto de contato quântico

Vimos na subseção anterior que a condutância de um ponto de contato quântico é quantizada e dependente do número de canais abertos. Esta subseção será reservada para um detalhamento de como ocorre o transporte de elétrons nesse sistema e como determinar o valor da condutância. Essas informações serão necessárias para melhor entender o transporte de elétrons em sistemas mais complexos, como o ponto quântico na próxima seção. Para isso, vamos nos basear no desenvolvimento encontrado na Ref. 3.

Como vimos, para que um elétron com energia  $E$  seja propagado por um canal  $n$ , sua energia deve ser no mínimo a energia de corte dada pela Equação 2.9. O número de canais abertos

<sup>5</sup> Tradução da expressão *gate voltage*, muito comum na literatura.

Figura 8 – Condutância em função do potencial do portão de voltagem de um ponto de contato quântico formado em um gás bidimensional de elétrons.



Fonte: Figura retirada da Ref. 14.

$N(E)$  pode ser contado pela equação

$$N(E) = \sum_n \vartheta(E - \varepsilon_n), \quad (2.11)$$

equivalente à Equação 2.10, e  $\vartheta(x)$  é a função de Heaviside ou função degrau,

$$\vartheta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \frac{1}{2}, & x = 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}.$$

Os terminais do PCQ podem ser modelados como reservatórios macroscópicos em equilíbrio cujos potenciais eletroquímicos são  $\mu_1$  e  $\mu_2$ . Os reservatórios fornecem elétrons para o PCQ ou os recebem após a transmissão ou reflexão na constrição. Consideremos um canal  $n$  com elétrons se movendo no sentido  $+x$ . Sejam seus estados  $+k_x$  ocupados segundo o fator de preenchimento  $f^+(E)$  dado pela função de Fermi

$$f^+(E) \equiv f_F(E - \mu_1) = \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu_1)/k_B T]},$$

em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura. A corrente gerada por um gás unidimensional de elétrons com velocidade  $v$  e densidade uniforme  $\lambda$  é  $I = \lambda e v$ , sendo  $e$  a carga elementar do elétron. Ao se fazer as substituições  $\lambda = \frac{1}{L} \sum_{k_x} f^+(E)$  e  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_x}$ , temos

$$I_n^+ = \frac{e}{L} \sum_{k_x} v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_{k_x} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_x} f^+(E).$$

Como  $k_x$  é uma variável contínua, o somatório é substituído por uma integral,

$$\sum_{k_x} \rightarrow 2 \times \frac{L}{2\pi} \int dk_x,$$

em que a multiplicação por 2 é devido à degeneração de spin. Então,

$$I_n^+ = \frac{2e}{h} \int_{\varepsilon_n}^{+\infty} f^+(E) dE.$$

A corrente de todos os canais abertos é

$$I^+ = \sum_N I_n^+ = \frac{2e}{h} \sum_N \int_{\varepsilon_n}^{+\infty} f^+(E) dE = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} N(E) f^+(E) dE,$$

em que a [Equação 2.11](#) foi utilizada na última passagem para estender os limites da integral. A corrente gerada por elétrons que se deslocam no sentido  $-x$  e possuem estados  $-k$  preenchidos por um fator de preenchimento  $f^-(E) \equiv f_F(E - \mu_2)$  é obtida de forma análoga, encontrando-se

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

Dessa forma, a corrente total é dada pela subtração de  $I^+$  e  $I^-$ , de forma que

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} N(E) (f^+(E) - f^-(E)) dE. \quad (2.12)$$

Se a diferença entre os potenciais eletroquímicos for bem pequena, de forma que  $N(E)$  é constante no intervalo  $\mu_1 < E < \mu_2$ , a [Equação 2.12](#) pode ser simplificada por

$$I \equiv \frac{2e}{h} \sum_{i=1}^N (\mu_1 - \mu_2) = \frac{2e}{h} N (\mu_1 - \mu_2) = G_0 N V, \quad (2.13)$$

em que  $G_0 = \frac{2e^2}{h} \approx 7.7480917 \times 10^{-5} \text{ Ohm}^{-1}$  é o quantum de condutância e  $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$  é a diferença de potencial entre os dois reservatórios.

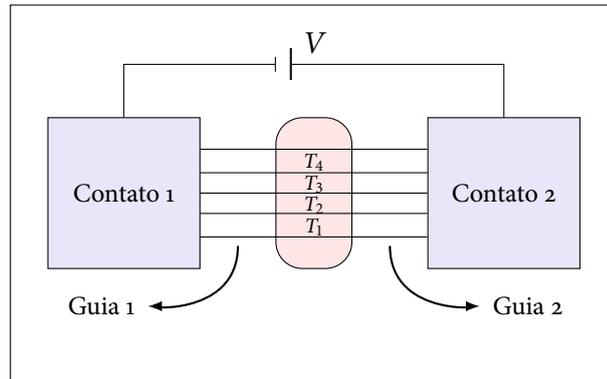
### 2.2.3 A fórmula de Landauer

Até agora, os contatos foram todos considerados ideais, ou seja, se um elétron é conduzido dos contatos até o condutor, então certamente este elétron chegará à outra extremidade do condutor. Entretanto, é possível tornar o sistema mais realístico considerando-se também contatos não ideais. Neste caso,  $T_n(E)$  é a probabilidade de um elétron ser transmitido do início até o fim do condutor. Este é um caso mais generalizado do guia de ondas com comportamento praticamente clássico visto na [seção 2.2](#). Basendo-se na referência [3](#), vamos calcular a condutância de um condutor não ideal que está representado na [Figura 9](#) no caso especial em que há quatro canais abertos.

A diferença deste modelo para o anterior é que agora o elétron pode ser refletido no próprio condutor. Então, o fluxo de elétrons  $I_1^+$  que entra no guia 1 através do contato 1 é dado pela [Equação 2.13](#). Ao alcançar a barreira de potencial, parte do fluxo igual a

$$I_1^- = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N T_i$$

Figura 9 – Ilustração de condutores não ideais, representado por um guia de ondas contendo uma zona de bloqueio cuja probabilidade de um elétron ser transmitido em um canal  $i$  é  $T_i$ .



Baseado na Ref. 3.

é transmitido ao guia 2, enquanto a outra parte dada por

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N (1 - T_i)$$

é refletido de volta. Dessa forma, o fluxo resultante nos guias 1 e 2 são

$$I_1^+ - I_1^- = I_2 = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N T_i.$$

Se as probabilidades  $T_i$  são iguais a  $T$ , a equação da corrente em qualquer um dos guias se torna

$$I = \frac{2e^2}{h} NTV, \quad (2.14)$$

que é conhecida como a fórmula de Landauer.

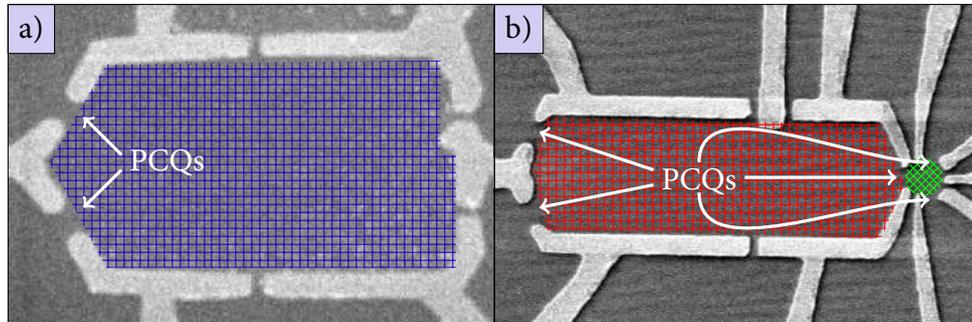
## 2.3 Ponto quântico

Uma cavidade fechada cujas dimensões são menores que o comprimento de relaxação de fase é chamado bilhar mesoscópico. Este nome é devido ao comportamento balístico ( $L \ll l_m$ , sendo  $L$  o raio médio da cavidade) das partículas confinadas na cavidade, que interagem umas com as outras ou com as paredes do sistema. Para que os elétrons não sejam localizados na cavidade, é necessário que o meio condutor seja um bom metal e assim as funções de onda dos elétrons se estendem por todo o bilhar.

O ponto quântico (PQ) se assemelha ao bilhar mesoscópico por possuir uma cavidade. Porém, essa cavidade é aberta<sup>6</sup> e o ponto quântico passa a ser definido como um grão metálico conectado a dois ou mais pontos de contato, pelos quais os elétrons são conduzidos[15]. Embora

<sup>6</sup> A cavidade é aberta de forma que permita a entrada e saída de elétrons (se não houvesse nenhum canal aberto no ponto quântico teríamos apenas uma cavidade fechada).

Figura 10 – Imagens feitas por microscopia eletrônica de varredura de a) um ponto quântico com dois pontos de contato com canais abertos e b) um sistema formado por dois pontos quânticos conectados. As regiões preenchidas com malhas coloridas representam pontos quânticos distintos e os pontos de contato especificados são aqueles com canais abertos.



Fonte: Figuras *a* e *b* retiradas das referências 18 e 19, respectivamente.

exista um número muito grande de elétrons em um ponto quântico, apenas alguns estão disponíveis para o transporte. Por esse motivo, os pontos quânticos são também chamados de *átomos artificiais*[16]. Outros nomes encontrados na literatura são *caixa quântica* e *sistemas de dimensão nula*<sup>7</sup>[17].

A cavidade (centro de espalhamento) se conecta a dois reservatórios de elétrons por meio dos pontos de contato e o transporte ocorre ao se retirar os dois reservatórios do equilíbrio. O fluxo de elétrons é controlado pela voltagem nos pontos de contato, abrindo ou fechando canais de transporte. Ao entrar na cavidade, o elétron é espalhado diversas vezes pelas paredes até sair por qualquer um dos canais de propagação. O tempo de permanência do elétron no centro de espalhamento  $\theta_{\text{permanência}}$  deve ser maior que o tempo ergódico<sup>8</sup>  $\theta_{\text{ergódico}}$ . Com essa condição, as propriedades do ponto quântico são consideradas universais pois deixam de depender das características microscópicas do PQ. Sistemas mais complexos podem ser montados com pontos quânticos multi-terminais ou mesmo conectando-se vários pontos quânticos. A Figura 10 mostra um ponto quântico (à esquerda) e um acoplamento de dois pontos quânticos (à direita), em que cada ponto quântico é formado por dois PCQs.

## 2.4 Sumário

Este capítulo abordou os principais sistemas utilizados no estudo de transporte de elétrons no regime mesoscópico. Discutimos como se dá o transporte de elétrons através de pontos de contato quânticos e como calcular esta corrente, apresentando a quantização da condutância,

<sup>7</sup> Mais encontrado no idioma inglês (*zero-dimensional systems*).

<sup>8</sup> Tempo ergódico é o tempo mínimo que a partícula necessita para explorar toda a geometria do sistema (a cavidade, neste caso).

fenômeno exclusivo de sistemas que exibem coerência de fase. Em seguida, o ponto quântico foi mostrado como nosso sistema principal, e será abordado mais a frente nesta dissertação.

No próximo capítulo o foco será a teoria de matriz de espalhamento, que nos ajudará no estudo do ponto quântico já que facilita o estudo de transporte de elétrons em cavidades abertas. Mostraremos como ela é construída e como ela pode auxiliar na descrição total do transporte de elétrons em sistemas mesoscópicos.

## 3 | Matriz de espalhamento

No [Capítulo 2](#), discutimos o transporte de elétrons em um ponto de contato quântico e algumas de suas características, como modelagem por meio de guias de onda, conceitos de canais fechados e abertos, quantização de condutância e, por fim, calculamos a corrente em um PCQ. Para sistemas mais complexos que envolvem espalhamento, como o ponto quântico (ver [seção 2.3](#)), existe um formalismo simplificado (porém eficiente) para se estudar o transporte de elétrons em um sistema mesoscópico.

### 3.1 Histórico

O formalismo da matriz de espalhamento ou matriz  $\mathbb{S}$  foi introduzido em 1937 com o objetivo de se estudar o núcleo atômico em situações que outros processos além do espalhamento não precisam ser detalhados. A grande vantagem do uso desse formalismo é que, na maioria das vezes, não há necessidade de se obter as funções de onda das partículas ou uma função de onda que descreve todo o sistema, o que requer muito esforço[20, 21]. No fim da década de 1960, os processos de espalhamento começaram a ser estudados no campo de transporte de elétrons em sistemas unidimensionais[22]. A utilização de matriz de espalhamento para o transporte de elétrons se tornou bastante ampla e de grande interesse uma década mais tarde, com alguns trabalhos em condutores desordenados que formam uma base para os trabalhos atuais. [23, 24, 25, 26, 27]

### 3.2 Formulação da matriz $\mathbb{S}$

Vamos desenvolver a formulação das matrizes  $\mathbb{S}$  considerando primeiramente um sistema simples, constituído de um ponto quântico formado por dois pontos de contato. O modelo para este sistema é um centro de espalhamento (representando a cavidade do ponto quântico) conectado a dois reservatórios termodinâmicos de elétrons por meio de dois guias de onda (representando os pontos de contato e que simplificaremos daqui em diante usando apenas o termo “guia”). Suponhamos que as voltagens nos contatos sejam controladas de forma que há apenas um canal aberto em cada guia e uma pequena diferença entre os potenciais químicos dos

reservatórios de elétrons. Este sistema está ilustrado na [Figura 11.a](#). Para facilitar, vamos identificar cada canal de cada guia do ponto quântico por  $C_{g,c}$  (canal  $c$  do guia  $g$ ). Com o desequilíbrio, alguns elétrons do reservatório mais energético serão transportados para o reservatório menos energético, passando pelo centro de espalhamento. Ao ser espalhado, parte da onda do elétron é refletida e outra é transmitida.

Definimos então por  $a_{g,c}$  ( $b_{g,c}$ ) a amplitude da onda no canal  $c$  do guia  $g$  antes (depois) dos espalhamentos ocorrerem. Vamos supor também que o elétron entre no centro de espalhamento pelo canal  $C_{1,1}$  (que está conectado ao reservatório com maior potencial) de forma que o estado inicial seja dado amplitude de onda  $a_{1,1}$ . Após os espalhamentos, haverá duas amplitudes de onda, uma em cada guia, dadas por

$$\begin{aligned} b_{1,1} &= {}^{1,1}r_{1,1} \times a_{1,1} \\ b_{2,1} &= {}^{2,1}t_{1,1} \times a_{1,1}, \end{aligned}$$

em que as constantes  ${}^{g,c_2}r_{g,c_1}$  e  ${}^{g_2,c_2}t_{g_1,c_1}$  são os coeficientes de reflexão do canal  $c_1$  para o canal  $c_2$  do mesmo guia  $g$  e transmissão do canal  $c_1$  do guia  $g_1$  para o canal  $c_2$  do guia  $g_2$ , respectivamente.

Se inicialmente, além da onda no canal  $C_{1,1}$ , houver uma onda  $a_{2,1}$  no canal  $C_{2,1}$ , esta também será espalhada e logo após distribuída de modo análogo, adicionando-se um termo a cada amplitude de saída

$$\begin{aligned} b_{1,1} &= {}^{1,1}r_{1,1} \times a_{1,1} + {}^{1,1}t_{2,1} \times a_{2,1} \\ b_{2,1} &= {}^{2,1}t_{1,1} \times a_{1,1} + {}^{2,1}r_{2,1} \times a_{2,1}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Note que a [Equação 3.1](#) pode ser escrita através da multiplicação de matrizes

$$\begin{pmatrix} b_{1,1} \\ b_{2,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^{1,1}r_{1,1} & {}^{1,1}t_{2,1} \\ {}^{2,1}t_{1,1} & {}^{2,1}r_{2,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathcal{B} = \mathbb{S}\mathcal{A}, \quad (3.2)$$

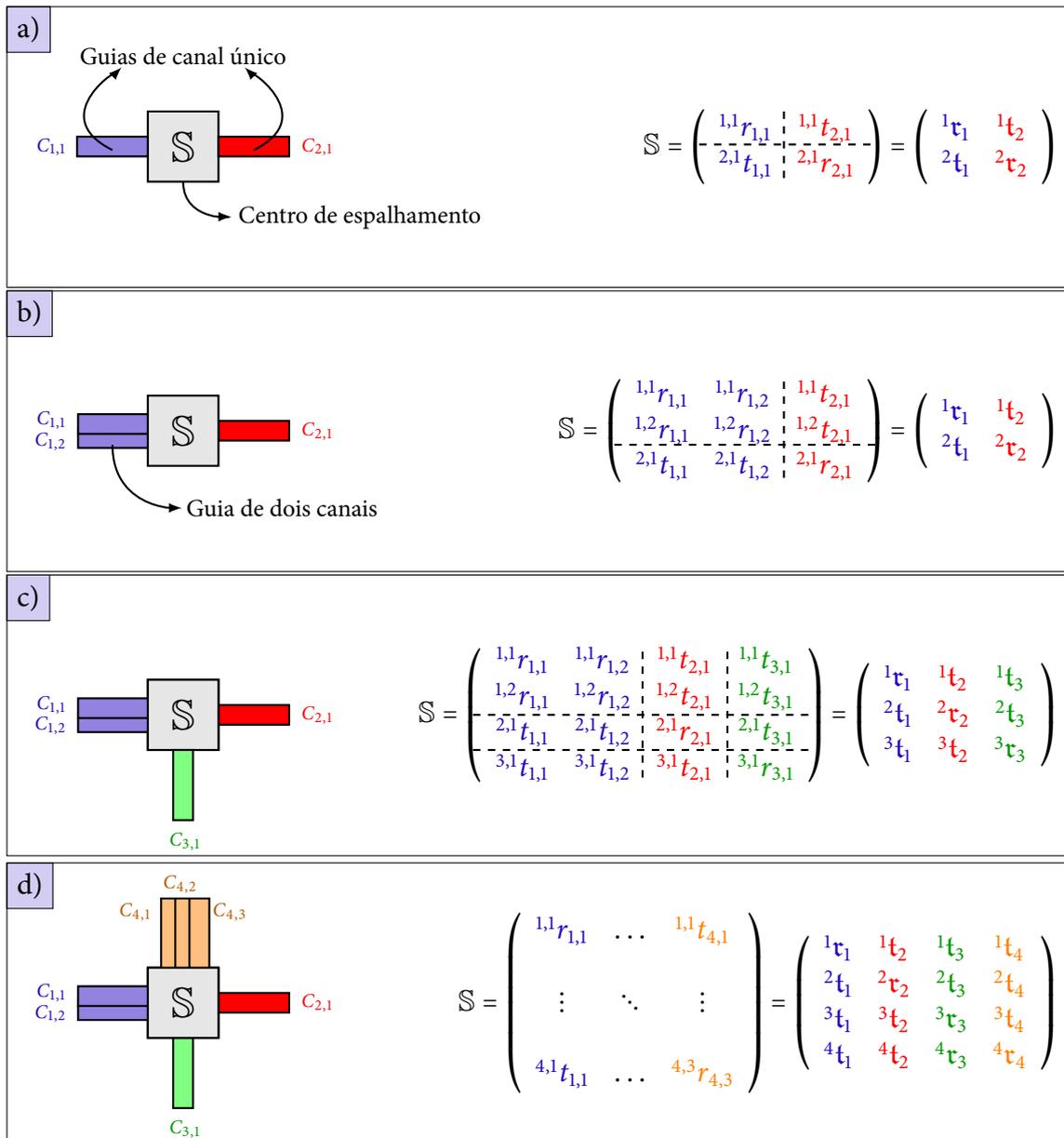
em que  $\mathbb{S}$  é definido como a matriz de espalhamento de um ponto quântico de dois guias, cada um contendo apenas um canal aberto. Se adicionarmos mais um canal a um dos guias ([Figura 11.b](#)), o conjunto de equações de distribuição de amplitudes se torna

$$\begin{aligned} b_{1,1} &= {}^{1,1}r_{1,1} \times a_{1,1} + {}^{1,1}r_{1,2} \times a_{1,2} + {}^{1,1}t_{2,1} \times a_{2,1} \\ b_{1,2} &= {}^{1,2}r_{1,2} \times a_{1,2} + {}^{1,2}r_{1,1} \times a_{1,1} + {}^{1,2}t_{2,1} \times a_{2,1} \\ b_{2,1} &= {}^{2,1}t_{1,1} \times a_{1,1} + {}^{2,1}t_{1,2} \times a_{1,2} + {}^{2,1}r_{2,1} \times a_{2,1}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Além de adicionar mais canais a um dos guias, é possível adicionar mais guias ao ponto quântico. A [Figura 11.c](#) mostra um esquema como este, em que foi adicionado um terceiro guia de um único canal ao exemplo anterior, e também sua matriz de espalhamento. A [Figura 11.d](#) apresenta uma adição de um guia de três canais ao ponto quântico representado pela [Figura 11.c](#).

É intuitivo que o número de equações e de termos em cada uma delas é igual ao número total de canais  $N = \sum_i N_i$  de todo o sistema, em que o somatório é feito em todos os guias  $i$  de

Figura 11 – Esquema de modelos de pontos quânticos para diversos números de canais abertos para a condução de elétrons e a forma de suas respectivas matrizes de espalhamento. Cada canal está representado por  $C_{g,c}$ , em que os subscritos  $g$  e  $c$  representam o guia e o canal, respectivamente. As cores distintas representam os diferentes guias e as linhas tracejadas delimitam os blocos de reflexão dos guias e de transmissão entre dois guias distintos. Os pontos quânticos apresentados são os seguintes: a) com dois guias de canal único; b) o mesmo que  $a$  adicionando-se um segundo canal ao primeiro guia; c) o mesmo que  $b$  adicionando-se um terceiro guia de canal único e d) o mesmo que  $c$  adicionando-se um quarto guia de três canais.



Fonte: Próprio autor.

canais  $N_i$ . Dessa forma, a matriz de espalhamento será uma matriz quadrada de ordem  $N \times N$ . As equações para as amplitudes de saída, de uma forma geral, podem ser reescritas de forma mais compacta como somatório duplo das contribuições de cada canal em cada guia por

$$b_{\alpha,i} = \sum_{\beta} \sum_l^{\alpha,i} [\mathbb{S}]_{\beta,l} a_{\beta,l}, \quad (3.4)$$

sendo  $^{\alpha,i}[\mathbb{S}]_{\beta,l} \equiv ^{\alpha,i}r_{\beta,l}$  ou  $^{\alpha,i}[\mathbb{S}]_{\beta,l} \equiv ^{\alpha,i}t_{\beta,l}$  se  $\alpha = \beta$  ou  $\alpha \neq \beta$ , respectivamente. E  $\mathbb{S}$  pode ser representada também mais compactamente por uma matriz de blocos, conforme mostra a [Figura 11](#) em cada um dos casos analisados acima. A matriz  $\mathbb{S}$  compacta generalizada tem a forma

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} {}^1\mathbf{t}_1 & {}^1\mathbf{t}_2 & \dots & {}^1\mathbf{t}_N \\ {}^2\mathbf{t}_1 & {}^2\mathbf{t}_2 & \dots & {}^2\mathbf{t}_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ {}^N\mathbf{t}_1 & {}^N\mathbf{t}_2 & \dots & {}^N\mathbf{t}_N \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Assim, cada bloco representa o conjunto de coeficientes de transmissão de um guia para outro ou de reflexão em determinado guia. Os blocos  ${}^{g_2}\mathbf{t}_{g_1}$  ( $g_1$  é o guia de entrada e  $g_2$  o de saída) e  ${}^g\mathbf{r}_g$  são de ordens  $N_{g_1} \times N_{g_2}$  e  $N_g \times N_g$ , respectivamente.

Uma das principais propriedades da matriz de espalhamento é sua unitariedade

$$\mathbb{S}^\dagger \mathbb{S} = \mathbf{1}. \quad (3.6)$$

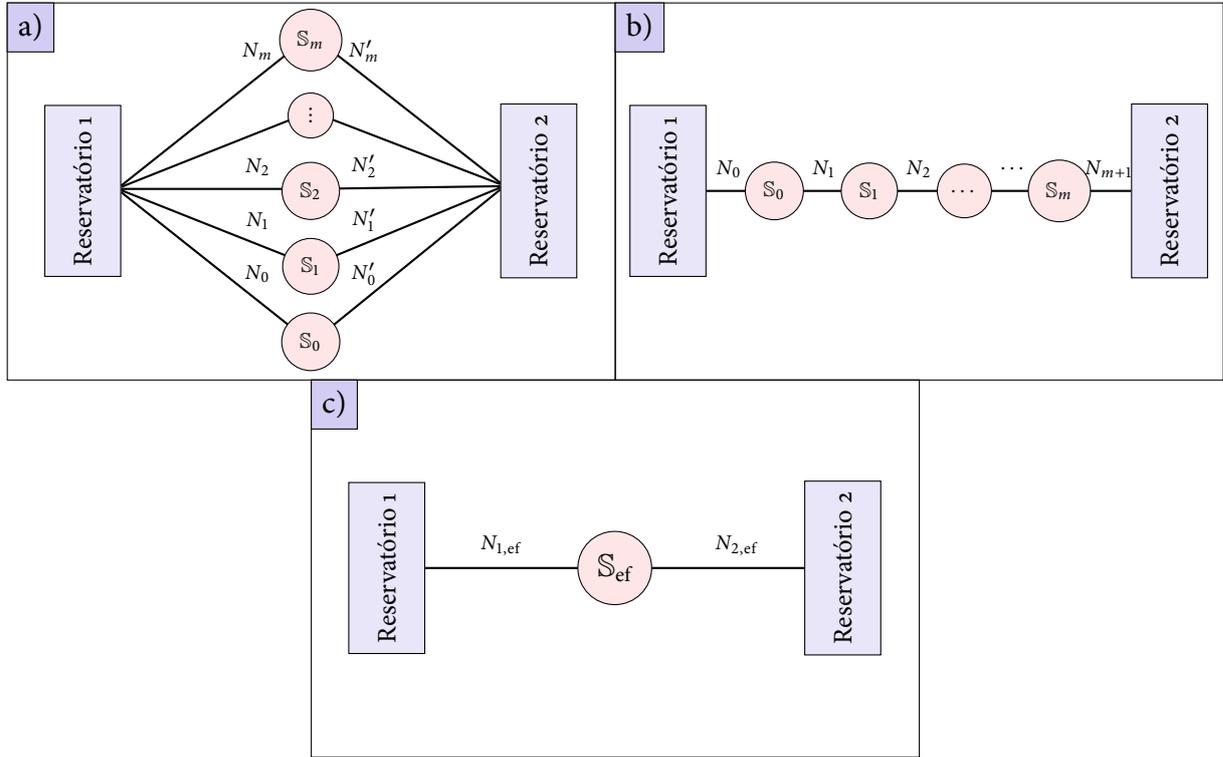
A demonstração disso se encontra no [Apêndice A](#). Essa propriedade é consequência da conservação de cargas e simultaneamente implica nela, isto é, se  $\mathbb{S}$  é unitária então há conservação de cargas e vice-versa.

### 3.3 Associação de centros de espalhamento

Quando um sistema é formado por dois ou mais centros de espalhamento, é possível representá-lo por uma única matriz de espalhamento. Assim como em dispositivos macroscópicos, os centros de espalhamento podem formar um arranjo em série ou paralelo. Entretanto, a associação de matrizes de espalhamento de cada centro espalhador não se assemelha com o cálculo da resistência ou capacitância equivalentes<sup>1</sup> Um esquema de um arranjo de centros de espalhamento em paralelo é mostrado na [Figura 12.a](#). O arranjo em série é mostrado na [Figura 12.b](#). Ao se combinar os centros, em qualquer um dos casos, um único centro de espalhamento efetivo conectado a dois guias é formado e seu esquema está na [Figura 12.c](#).

<sup>1</sup> A resistência e a capacitância equivalentes de uma rede em série são dadas por  $R = \sum_i R_i$  e  $C = (\sum_i C_i^{-1})^{-1}$ , respectivamente, enquanto para uma rede em paralelo são dadas por  $R = (\sum_i R_i^{-1})^{-1}$  e  $C = \sum_i C_i$ , respectivamente.

Figura 12 – Esquema de rede de centros de espalhamento a) em paralelo e b) em série ( $N_i$  e  $N'_i$  representam o número de canais nos respectivos guias conectados nos centros de espalhamento). c) A combinação resultará em apenas uma matriz de espalhamento  $S_{ef}$  conectada a guias com  $N_{1,ef}$  e  $N_{2,ef}$  canais.  $N_{1,ef} = \sum_i N_i$  e  $N_{2,ef} = \sum_i N'_i$  na associação de rede em paralelo, enquanto  $N_{1,ef} = N_0$  e  $N_{2,ef} = N_{m+1}$  na associação de rede em série.



Fonte: Baseados na Ref. 28.

### 3.3.1 Associação de centros de espalhamento em paralelo

Considerando que cada centro de espalhamento  $i$  é representado pela matriz de espalhamento

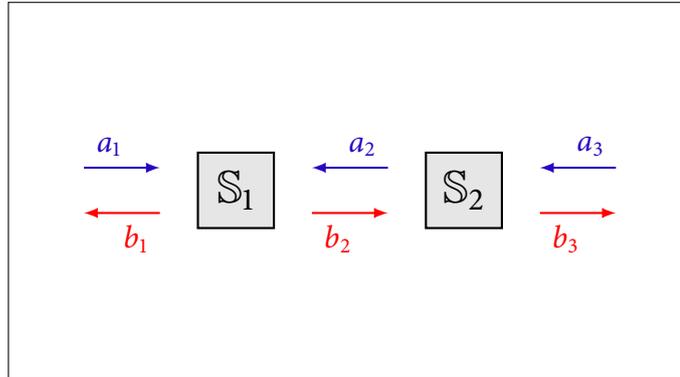
$$S_i = \begin{pmatrix} \tau_i & t'_i \\ t_i & \tau'_i \end{pmatrix},$$

então a combinação de dois centros  $i$  e  $j$  conectados em paralelo é representada por uma matriz de espalhamento efetiva  $S_{ef}$  dada por [28]

$$S_i \otimes S_j = \begin{pmatrix} \tau_i & 0 & t'_i & 0 \\ 0 & \tau_j & 0 & t'_j \\ t_i & 0 & \tau'_i & 0 \\ 0 & t_j & 0 & \tau'_j \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

e os blocos nulos existem porque considera-se que não há nenhuma interação entre guias de diferentes centros de espalhamento. Pode-se notar que novamente a matriz de espalhamento

Figura 13 – Ilustração de dois centros de espalhamentos conectados em série. Uma das amplitudes de saída de um centro é a amplitude de entrada do outro e vice versa.



Fonte: Baseado na Ref. 29.

pode ser reescrita de uma forma mais compacta,

$$\mathbb{S}_{ef} = \begin{pmatrix} \tau & \tau' \\ t & t' \end{pmatrix},$$

sendo cada bloco dado por

$$u = \begin{pmatrix} u_i & 0 \\ 0 & u_j \end{pmatrix}, \quad \text{com } u = \tau, \tau', t, t'.$$

Para se associar  $L$  centros, deve-se:

- Associar o primeiro e o segundo centro;
- Usar a matriz resultante para associar com o terceiro centro;
- Repetir o processo até o  $L$ -ésimo centro.

### 3.3.2 Associação de centros de espalhamento em série

A Figura 13 ilustra dois centros de espalhamento que estão conectados em série, e suas ondas de entrada e saída. Entre os dois centros, a amplitude de saída de um centro é a amplitude de entrada do outro e vice-versa. Vamos nos basear na referência 29 para determinar a matriz efetiva de uma rede de centros de espalhamento em série.

Em uma conexão em série de centros de espalhamento, as amplitudes das ondas de saída e de entrada estão relacionadas por

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \mathbb{S}_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (3.8a)$$

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \mathbb{S}_2 \begin{pmatrix} b_2 \\ a_3 \end{pmatrix}. \quad (3.8b)$$

A combinação das duas matrizes resultará em uma matriz  $\mathbb{S}_{ef}$  que fornece a relação

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_3 \end{pmatrix} = \mathbb{S}_{ef} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix}.$$

Desenvolvendo a [Equação 3.8](#), são obtidos os seguintes sistemas de equações:

$$\begin{aligned} b_1 &= r_1 a_1 + t'_1 a_2 & a_2 &= r_2 b_2 + t'_2 a_3 \\ b_2 &= t_1 a_1 + r'_1 a_2 & b_3 &= t_2 b_2 + r'_2 a_3, \end{aligned}$$

que podem ser reescritas como

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 & 0 \\ 0 & r'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t'_1 & 0 \\ 0 & t_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (3.9a)$$

$$\begin{pmatrix} b_2 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1 & 0 \\ 0 & t'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r'_1 & 0 \\ 0 & r_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (3.9b)$$

Com essas duas equações, é possível eliminar  $[a_2, b_2]$  e encontrar  $[b_1, b_3]$  em função de  $[a_1, a_3]$  que fornecerá a matriz de espalhamento efetiva. Então

$$\mathbb{S}_{ef} = \begin{pmatrix} r_1 & 0 \\ 0 & r'_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t'_1 & 0 \\ 0 & t_2 \end{pmatrix} \frac{1}{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} r'_1 & 0 \\ 0 & r_2 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} t_1 & 0 \\ 0 & t'_2 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

que resulta em [\[3, 29\]](#)

$$\mathbb{S}_{ef} = \mathbb{S}_1 \bullet \mathbb{S}_2 = \begin{pmatrix} r_1 + t'_1 r_2 t_1 / (1 - r'_1 r_2) & t'_1 t'_2 / (1 - r'_1 r_2) \\ t_2 t_1 / (1 - r'_1 r_2) & r'_2 + t_2 r'_1 t'_2 / (1 - r'_1 r_2) \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Esta é uma equação para se combinar dois centros de espalhamento dois a dois e, por associação iterativa, é possível combinar  $L$  centros de espalhamentos. Se o sistema contiver  $n$  centros de espalhamento, o processo deve ser repetido até não haver centros restantes. Com cálculos mais minuciosos, a seguinte equação para a combinação de centros de espalhamento três a três foi desenvolvida [\[30\]](#) no caso especial em que os centros das extremidades correspondiam à barreiras de tunelamento (guias não ideais):

$$\mathbb{S}_{ef} = \mathcal{T} + \mathcal{T}' [(1 - \mathbb{S}_2 \mathcal{R}')^{-1}] \mathbb{S}_2 \mathcal{T}, \quad (3.12)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &\equiv \begin{pmatrix} r_1 & 0 \\ 0 & r'_3 \end{pmatrix}, & \mathcal{T} &\equiv \begin{pmatrix} t_1 & 0 \\ 0 & t'_3 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{T}' &\equiv \begin{pmatrix} t'_1 & 0 \\ 0 & t_3 \end{pmatrix}, & \mathcal{R}' &\equiv \begin{pmatrix} r'_1 & 0 \\ 0 & r_3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Essa equação foi generalizada para três centros de espalhamento quaisquer. Esse tipo de combinação se mostra no ponto de vista computacional mais eficiente do que a combinação dois a dois quando o número de canais de cada guia é  $N \leq 5$  [\[28\]](#).

## 3.4 Sumário

Neste capítulo vimos como a teoria de matrizes de espalhamento se desenvolveu e como ela é construída. Mostramos também que a matriz de espalhamento fornece todas as informações necessárias para descrever o transporte de elétrons por meio de probabilidades de transmissão e reflexão, obtidas pela distribuição de amplitudes de onda entre os canais e guias de um ponto quântico. Em seguida, demonstrou-se as equações para uma matriz de espalhamento efetiva resultante da associação de vários centros de espalhamento, tanto quando elas são conectadas em série quanto em paralelo.

O próximo capítulo abordará a teoria de matrizes aleatórias, que nos ajudará a descrever o transporte de elétrons em pontos quânticos caóticos, mostrando as diferentes simetrias das matrizes de espalhamento representando os ensembles de Wigner-Dyson.

## 4 | Teoria de matrizes aleatórias

A Teoria de matrizes aleatórias (TMA) tem sido amplamente utilizada nos últimos anos[31] para a descrição de sistemas que possuem propriedades universais. Propriedades universais são as que não dependem de características particulares de cada sistema em um mesmo ensemble[32]. O ponto quântico possui propriedades universais, pois dois pontos quânticos quaisquer não são idênticos e ainda assim podem compartilhar algumas características. Exemplos dessas características universais são as simetrias de reversão temporal e invariância sob rotação de spin (ver [seção 4.2](#)). Essas simetrias dos pontos quânticos determinam a forma das matrizes de espalhamento que os descrevem.

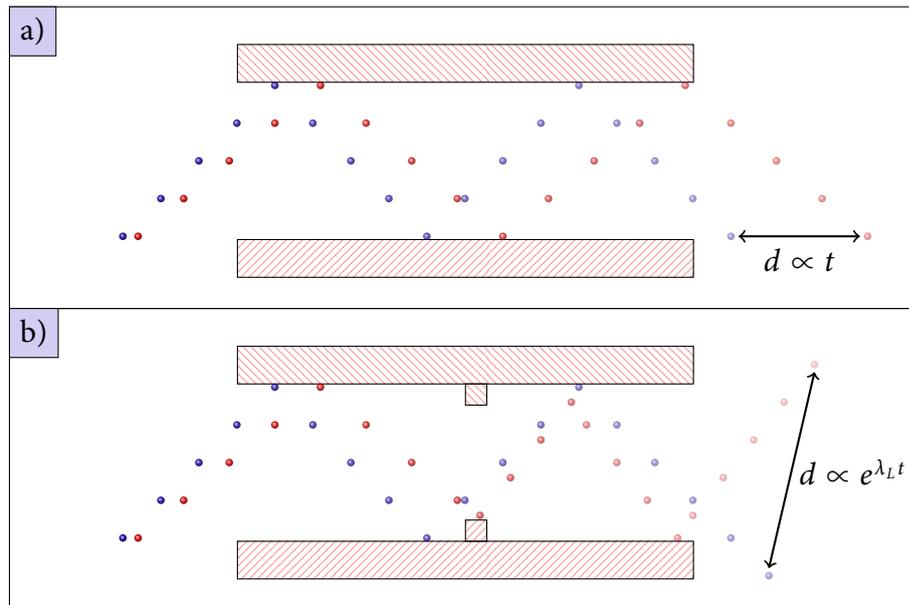
Embora no interior da cavidade o elétron possua dinâmica balística, ele interage com as paredes do ponto quântico que, a nível microscópico, possui uma geometria bastante irregular. Dessa forma, o elétron sofre um conjunto de espalhamentos irreprodutíveis e incontrolláveis, das quais sua dinâmica é bastante sensível. Por este motivo, o ponto quântico é considerado um sistema quântico caótico<sup>1</sup>. A [Figura 14](#) ilustra dois sistemas, um com dinâmica clássica regular e o outro com dinâmica caótica. Na realidade, o caos em mecânica quântica pode ser definido através da distribuição dos espaçamentos de níveis[33]. A modelagem do ponto caótico pode ser feita utilizando-se a TMA[34].

### 4.1 Histórico

O uso de matrizes aleatórias se deu no fim da década de 1920[35] na matemática. A teoria de matrizes aleatórias se desenvolveu e teve seu uso ampliado algumas décadas mais tarde, após sua aplicação em física de colisões pelo físico matemático Eugene Wigner[36, 37, 38]. Os seus trabalhos resultaram no prêmio Nobel de 1963[39]. Na década de 1960, a teoria foi solidificada quando Dyson classificou em um conjunto de publicações[40, 41, 42, 43, 44] as matrizes aleatórias dentro de três categorias de acordo com suas simetrias. Na década de 1980, a TMA foi aplicada ao caos quântico do bilhar de Sinai[45]. A partir de então, a TMA tem

<sup>1</sup> Há muitas formas de definir o caos quântico, mas uma definição bem aceita é de que um sistema quântico é caótico quando seu análogo clássico é caótico.

Figura 14 – Ilustração de a) um sistema regular, sem caos, e b) um sistema caótico. Duas partículas (esferas em azul e vermelho) se movem no sentido da esquerda para a direita sofrendo reflexões nas paredes tracejadas. Após a adição de falhas, o número de graus de liberdade aumenta e a dinâmica se torna muito sensível às condições iniciais. A distância entre as partículas deixa de ter uma relação linear com o tempo, aumentando exponencialmente a uma taxa  $\lambda_L$  conhecido como expoente de Lyapunov.



Fonte: Próprio autor.

seu uso é aplicado em diversas áreas, incluindo pesquisas em condutividade de metais desordenados, gravidade quântica, cromodinâmica quântica e teoria das cordas[46].

Dyson classificou matrizes aleatórias quanto as simetrias que existem no sistema e quanto ao formalismo empregado. O ensemble que utilizado no formalismo das matrizes de espalhamento é o ensemble circular. A seguir há uma breve revisão sobre este ensemble considerando as simetrias de reversão temporal e invariância sob rotação de spin.

## 4.2 Simetria de reversão temporal

Reversão temporal, na física clássica, pode ser definido através do seguinte conjunto de transformações:

$$\vec{v} \rightarrow -\vec{v}, \quad \vec{p} \rightarrow -\vec{p}, \quad \vec{J} \rightarrow -\vec{J} \quad \text{e} \quad \vec{A} \rightarrow -\vec{A}, \quad (4.1)$$

em que  $\vec{v}$ ,  $\vec{p}$ ,  $\vec{J}$  e  $\vec{A}$  representam a velocidade, o momento linear, o momento angular e o vetor potencial eletromagnético. As coordenadas de posição e energias permanecem inalteradas[47]. Em mecânica quântica é similar, porém o formalismo de operadores é adotado conforme mostraremos abaixo baseando-se na Ref. 46.

Definindo o operador de reversão temporal

$$\hat{T} \equiv \hat{K}\hat{C},$$

em que  $\hat{K}$  é um operador unitário<sup>2</sup> e  $\hat{C}$  toma o conjugado do que lhe sucede, então a função de onda sob reversão temporal é dada por

$$\Psi^R = \hat{T}\Psi = \hat{K}\Psi^*. \quad (4.2)$$

A seguinte condição é necessária para que haja simetria de reversão temporal (SRT):

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle = \langle \Phi^R | \hat{A}^R | \Psi^R \rangle, \quad (4.3)$$

sendo  $\hat{A}^R$  o operador sob transformação de reversão temporal. Através da [Equação 4.2](#) e da [Equação 4.3](#) demonstra-se que

$$\hat{A}^R = \hat{K}\hat{A}^T\hat{K}^{-1}, \quad (4.4)$$

$\hat{A}^T$  sendo a transposta do operador  $\hat{A}$  na forma matricial e  $\hat{K}^{-1}$  é o inverso da matriz que representa  $\hat{K}$ . Um sistema físico é invariante sob reversão temporal se a transformação de reversão temporal não altera sua hamiltoniana, ou seja,

$$\hat{H}^R = \hat{H}.$$

Um operador invariante sob a transformação  $\hat{T}$  é chamado autodual.

Qualquer sistema deve ser invariante sob uma aplicação dupla de transformação de reversão temporal, fornecendo

$$\hat{T}^2 = \hat{K}\hat{C}(\hat{K}\hat{C}) = \hat{K}\hat{K}^* = \alpha\hat{I}, \quad |\alpha| = 1, \quad (4.5)$$

sendo  $\hat{I}$  o operador identidade. Como  $\hat{K}$  é unitário, então

$$\begin{aligned} \hat{K}\hat{K}^* &= \alpha\hat{K}^T\hat{K}^* \implies \hat{K} = \alpha\hat{K}^T \\ \hat{K} &= \alpha(\alpha\hat{K}^T)^T = \alpha^2\hat{K} \implies \alpha = \pm 1. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Dessa forma, a matriz  $\hat{K}$  pode ser simétrica

$$\hat{K}\hat{K}^* = \hat{I} \quad (4.7)$$

(aplicado a bósons) ou antissimétrica (aplicado a férmions)

$$\hat{K}\hat{K}^* = -\hat{I}. \quad (4.8)$$

<sup>2</sup> Um operador  $\hat{K}$  é dito unitário se  $\hat{K}^\dagger = \hat{K}^{-1} \implies \hat{K}^\dagger\hat{K} = \mathbb{I}$ . Aplicando-se a transposta nos dois lados dessa expressão, obtém-se  $\hat{K}^T\hat{K}^* = \mathbb{I}$  (consequência da unitariedade de  $\hat{K}$ ).

### 4.3 Ensemble circular e núcleo de Poisson

Dyson introduziu[40] o chamado ensemble circular que é o conjunto de matrizes  $\mathbb{S}$  uniformemente distribuídas sobre um grupo unitário  $\mathcal{U}$ , ou seja,

$$\mathcal{P}(\mathbb{S}) = \text{constante}, \quad (4.9)$$

que resulta também em uma média nula,  $\langle \mathbb{S} \rangle = \tilde{\mathbb{S}} = \mathbf{o}$ . Uma matriz unitária qualquer pode ser construída[34] através da parametrização

$$\mathbb{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{\mathbf{I} - \tau} & \sqrt{\tau} \\ \sqrt{\tau} & \sqrt{\mathbf{I} - \tau} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_3 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{v}_4 \end{bmatrix}, \quad (4.10)$$

sendo  $\tau$  uma matriz diagonal  $N \times N$  contendo os autovalores  $\tau_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) de  $\mathbb{S}$  e  $\mathbf{v}_j$  ( $j = 1, 2, 3, 4$ ) são matrizes unitárias arbitrárias de ordem  $N \times N$ . Se há simetria de reversão temporal, necessariamente  $\mathbf{v}_3 = \mathbf{v}_1^T$  e  $\mathbf{v}_4 = \mathbf{v}_2^T$ . Se há simetria de reversão temporal e não há invariância sob rotação de spin, as matrizes  $\mathbf{v}_j$  se tornam quatérnions auto-duais de ordem  $2N \times 2N$  e  $\mathbf{v}_3 = \bar{\mathbf{v}}_1$  e  $\mathbf{v}_4 = \bar{\mathbf{v}}_2$ .

Mello, Pereyra e Seligman generalizaram o ensemble circular[48] de forma que  $\tilde{\mathbb{S}} \neq \mathbf{o}$ , isto é, a distribuição  $\mathcal{P}(\mathbb{S})$  não é mais uniforme. Neste caso, a nova distribuição é dada pelo núcleo de Poisson[49]

$$\mathcal{P}(\mathbb{S}) \propto |\det(\mathbf{I} - \tilde{\mathbb{S}}^+ \mathbb{S})|^{-\beta(2N-1+2/\beta)}, \quad (4.11)$$

em que  $\beta$  é o índice de simetria, também chamado índice de Dyson, que assume os valores  $\beta = 1$  quando há SRT e IRS,  $\beta = 2$  quando há quebra da SRT e  $\beta = 4$  quando há SRT sem IRS. A Equação 4.9 é um caso particular da Equação 4.11 e é obtida através dela quando  $\tilde{\mathbb{S}} = \mathbf{0}$ . O ensemble circular é utilizado quando o sistema é formado por guias ideais. A situação de junções de tunelamento é estudada através do núcleo de Poisson por ser mais geral[50].

Existem três classes de matrizes pertencentes ao ensemble circular, chamadas classes de universalidade, cada uma correspondendo à uma determinada simetria  $\beta$ . Cada classe determina também a simetria e o número de graus de liberdade de cada matriz  $U_\beta$  pertencente a ela. As classes são: ortogonal ( $\beta = 1$ ), unitária ( $\beta = 2$ ) e simplética ( $\beta = 4$ ).

A Equação 4.10 gera uma matriz unitária com autovalores determinados. Entretanto, muitas vezes se deseja gerar matrizes aleatórias com distribuição uniforme (Equação 4.9) para que se determine a distribuição de autovalores.

- a) **Ensemble circular unitário (ECU,  $\beta = 2$ )** - A única imposição que há para as matrizes é a unitariedade,

$$\mathbb{U}_2 \mathbb{U}_2^\dagger = \mathbb{I} \implies \mathbb{U}_2^\dagger = \mathbb{U}_2^{-1}. \quad (4.12)$$

Como visto na [seção 3.2](#), a pertinência da matriz de espalhamento  $\mathbb{S}$  a este ensemble implica em conservação de cargas em um ponto quântico e é utilizada quando não há SRT. Essa quebra de simetria pode ser gerada, por exemplo, aplicando-se um campo magnético. Isso acontece porque, quando o elétron se desloca no sentido oposto (ver [Equação 4.1](#)), a matriz de espalhamento que descreve a distribuição de amplitudes não é mais a mesma<sup>3</sup>

- b) **Ensemble circular ortogonal (ECO,  $\beta = 1$ )** - Quando há simetrias de reversão temporal e de invariância sob rotação de spin, a matriz deve ser unitária e simétrica (ver [Equação 4.7](#)). As matrizes pertencentes a esta classe são, além de unitárias, simétricas. Uma matriz simétrica unitária pode ser construída através de uma matriz pertencente ao ECU ao se fazer

$$\mathbb{U}_1 = \mathbb{U}_2^T \mathbb{U}_2. \quad (4.13)$$

Sendo o campo magnético ausente,  $\Psi^*(-t)$  é também uma solução da equação de Schrödinger. Isso determina a SRT do sistema. No formalismo de matrizes de espalhamento, isso equivale à seguinte transformação invariante da [Equação 3.2](#)

$$\mathcal{A}^* = \mathbb{S}_{\text{rev}} \mathcal{B}^* \implies \mathbb{S}_{\text{rev}} = \mathbb{S}. \quad (4.14)$$

Para que a condição de unitariedade da matriz de espalhamento seja mantida,  $\mathbb{S}^T = \mathbb{S}$ . Então, quando há invariância sob reversão temporal, a matriz de espalhamento é pertencente a esta classe<sup>4</sup>.

- c) **Ensemble circular simplético (ECS),  $\beta = 4$**  - As matrizes desta classe são também obtidas através de uma matriz pertencente ao ECU

$$\mathbb{U}_4 = \mathbb{U}_2^R \mathbb{U}_2, \quad (4.15)$$

em que  $\mathbb{U}_2^R$  é uma matriz autodual dada pela [Equação 4.4](#) e<sup>5</sup>

$$\hat{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}_{2N \times 2N} = \mathbf{e}_2 \mathbf{I}_{N \times N}, \quad (4.16)$$

em que  $\mathbf{e}_2$  é a segunda unidade quaterniônica. Neste caso,  $\mathbb{U}_4$  é uma matriz de quatérnions reais. O motivo pelo qual a matriz de espalhamento deve pertencer a esta classe quando não há IRS (quando há presença de interações spin-órbita), sendo, portanto, a [Equação 4.8](#) válida, é a degeneração de Kramer.

<sup>3</sup> Na física clássica, a componente  $B_{\perp}$  do campo magnético perpendicular à velocidade  $\vec{v}$  do elétron exerce uma força sobre o mesmo. O sentido dessa força, por sua vez, depende do sentido da velocidade. Portanto, ao se fazer a transformação  $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$ , o elétron percorreria uma trajetória diferente.

<sup>4</sup> Somente quando há também invariância sob rotação de spin. Há uma classe especial para o caso em que há simetria sob rotação de spin chamada classe simplética.

<sup>5</sup> Aqui se usa uma notação diferenciada, considerando  $\hat{\mathbf{e}}_2$  uma quantidade escalar e multiplicando-a pela matriz identidade, não sendo uma multiplicação usual de matrizes.

Tabela 1 – Classes de Wigner-Dyson para o ensemble circular

Classe	$\beta$	SRT	IRS
Unitária	2	Não	Sim ou não (indiferente)
Ortogonal	1	Sim	Sim
Simplética	4	Sim	Não

Fonte: Construída com base na Ref. 15.

A [Tabela 1](#) mostra, de forma simplificada, as classes de Wigner-Dyson de acordo com a existência de simetrias de reversão temporal e de rotação de spin.

## 4.4 Sumário

Neste capítulo foi feita uma abordagem acerca da teoria de matrizes aleatórias, apresentando suas aplicações, como se desenvolveu e como pode ser aplicada a pontos quânticos caóticos. Vimos também as simetrias de reversão temporal e invariância sob rotação de spin e as classes das matrizes utilizadas em cada caso.

No próximo capítulo apresentaremos um efeito quântico muito importante para aplicações em tecnologias inovadoras: o emaranhamento.

## 5 | Emaranhamento

Reservaremos este capítulo para uma das propriedades quânticas mais interessantes: o emaranhamento quântico. O emaranhamento é descrito somente no formalismo quântico e não existe nenhuma característica análoga nas teorias clássicas. Na [seção 5.1](#) há um resumo contendo os primeiros trabalhos sobre emaranhamento até o momento de sua consolidação.

### 5.1 Histórico

Em 1935, Einstein e colaboradores publicaram[51] um questionamento sobre a descrição da realidade física pela mecânica quântica, chamado Paradoxo EPR. A seguinte definição<sup>1</sup> foi introduzida:

Se, sem perturbar de alguma forma o sistema, pudermos prever com certeza (isto é, com probabilidade igual à unidade) o valor de uma quantidade física, então há um elemento da realidade física que corresponde a esta quantidade física.

Segundo o princípio de incerteza de Heisenberg, se duas quantidades físicas são representadas por operadores que não comutam entre si, então seus valores não podem ser simultaneamente conhecidos de forma precisa. Einstein *et al.* utilizaram esse princípio para mostrar que (1) a descrição da realidade dada pela função de onda na mecânica quântica não é completa ou (2) essas duas quantidades não podem ter realidade simultaneamente. Através de um experimento imaginário, se (1) é falso então (2) também é, restando apenas a alternativa (1) verdadeira e (2) falsa, ou seja, a descrição pela função de onda estava incompleta.

No mesmo ano, Schrödinger publicou[52] um artigo em resposta ao paradoxo EPR, empregando o uso da palavra emaranhamento. Neste artigo, Schrödinger mostrou que se duas partículas interagirem, mesmo após elas se separarem não é possível descrevê-las individualmente. Neste caso, uma função de onda representará o sistema como todo. Para quebrar o emaranhamento do sistema é necessário realizar uma medição em uma das partículas<sup>2</sup>. Mas Schrödinger ainda

<sup>1</sup> Traduzida do referente artigo pelo autor deste trabalho.

<sup>2</sup> O experimento só precisa ser feito em uma das partículas e a quantidade física respectiva da segunda partícula pode ser inferida. Até mesmo Schrödinger se impressionou com esta característica quântica, chamando-a de sinistra.

estava insatisfeito já que esse efeito parecia violar o limite de velocidade, dado pela teoria da relatividade, na transmissão de informação de uma partícula para outra[53].

Para explicar a existência de uma correlação não-local entre dois subsistemas, muitos acreditavam na existência de parâmetros ou variáveis ocultas criadas no momento de interação ou criação dos subsistemas. Essas variáveis ocultas eram uma espécie de DNA e determinariam o comportamento dos subsistemas, mantendo a realidade física definida por Einstein *et al.* Desta forma, qualquer subsistema deveria possuir propriedades bem definidas antes da medição mesmo que fossem desconhecidas pelo homem, assim como as variáveis ocultas. Realmente isso explicaria como as partículas pudessem ser correlacionadas.

Na década de 1960, John Bell demonstrou[54] que uma teoria baseada nesta afirmação deveria obedecer uma desigualdade probabilística, conhecida como desigualdade de Bell. Uma vez que a mecânica quântica viola essa desigualdade, então ela não pode ser uma teoria local e realista, como afirmado por Einstein. Após a desigualdade de Bell ser generalizada[55], ela foi comprovada experimentalmente[56] pela primeira vez em 1982 através de medidas de polarização em pares de fótons emaranhados. As pesquisas foram aperfeiçoadas para comprovar a existência de correlações quânticas não-locais (ou seja, independente da distância entre os sistemas). Como exemplo, temos um experimento realizado em 2008, que relatou o emaranhamento em uma distância de aproximadamente 18 km[57].

## 5.2 Emaranhamento de *qubits*

Como vimos na seção 5.1, o emaranhamento é uma propriedade descrita apenas com o uso de mecânica quântica. Por definição, um par de sistemas não está emaranhado quando é possível representar cada sistema por uma função de onda separadamente. Dessa forma, o par emaranhado só pode ser representado por uma única função de onda não fatorável. O sistema emaranhado mais simples é o par de *qubits*<sup>3</sup> ou *bit* quântico[58]. O *qubit* é um sistema quântico de dois níveis e foi introduzido pela primeira vez em 1983[59] mas o termo só foi criado em 1995[60]. O par de partículas de spin semi-inteiro (dois elétrons, por exemplo) formam o par de *qubits* mais conhecido e seu estado é dado por

$$|\Psi\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle, \quad (5.1)$$

em que  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  formam a base de um *qubit* e representam estados com spins em direções opostas. Se  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$  e  $b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ , o estado é chamado singleto. Não existe uma forma de representar esse estado como um produto de estados de cada partícula (por isso o estado é dito emaranhado).

Vamos agora ver a consequência disso. Temos:

<sup>3</sup> Não se deve confundir *bit* e *qubit*. A origem da palavra *qubit* é inglesa, abreviação da expressão *quantum bit*. O *bit* é um valor binário, ou seja, só pode ter dois valores (0 ou 1, por exemplo). O *qubit* é uma superposição de dois estados, e cada estado pode ser representado por um bit.

- A probabilidade de se obter o valor  $\frac{1}{2}\hbar$  ao realizar medida de spin na primeira partícula ou  $-\frac{1}{2}\hbar$  ao realizar na segunda partícula é  $|a|^2$ ;
- A probabilidade de se obter o valor  $-\frac{1}{2}\hbar$  ao realizar medida de spin na primeira partícula ou  $+\frac{1}{2}\hbar$  ao realizar na segunda partícula é  $|b|^2$ .

Entretanto, uma vez que uma medida foi feita, obtendo-se o spin de uma das partículas, é possível inferir o spin da outra com total certeza. Vamos analisar este fato com um exemplo imaginário.

Consideremos, por exemplo, um conjunto com mil pares de elétrons. Os elétrons de cada par se interagiram em algum momento de forma que o par é representado pela função de onda dada na [Equação 5.1](#). Para cada par, uma medida de spin é realizada no primeiro elétron e, logo em seguida, outra medida é feita no segundo. Separemos o conjunto contendo os pares cujas medidas no primeiro elétron forneceram spin com valor  $\frac{1}{2}\hbar$  e suponhamos que isso tenha ocorrido em 70% dos casos. O resultado das medidas nos segundos elétrons fornecerão, em 100% dos casos, o valor  $-\frac{1}{2}\hbar$ .

Se a ordem de medida for invertida, realizando a primeiramente no segundo elétron, o mesmo efeito acontece. Dessa vez, determina-se com total certeza o valor do spin do primeiro elétron após se conhecer o spin do segundo. Portanto, há uma correlação entre os spins dos elétrons. Poderíamos pensar que, no momento da primeira medida de spin (no primeiro elétron), alguma informação pudesse ser transportada para o segundo elétron definindo assim o spin que ele deveria ter. Entretanto, esse resultado é independente da distância dos dois elétrons e a correlação é não-local. Isso ocorre porque o sistema é descrito como um todo por uma única função de onda. Quando a medida é realizada, a função de onda colapsa para um estado sem superposição contendo as informações sobre os spins das duas partículas simultaneamente.

### 5.3 Grau de emaranhamento

Embora já tenhamos determinado quando um sistema é ou não emaranhado, é possível ainda que dois sistemas emaranhados possuam graus diferentes de emaranhamento. No exemplo de *qubit* dado na [seção 5.2](#), ao se fazer  $b = 0$ , obtemos estado  $|\Psi\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ , que é separável e, portanto, não emaranhado. Dessa forma, o emaranhamento depende dos valores de  $a$  e  $b$ . O que ocorre então se esses valores variarem de forma contínua entre 0 e 1, respeitando-se a condição  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ? A resposta é que o emaranhamento entre as duas partículas aumenta ou diminui. De fato, o emaranhamento é máximo para o estado singleto e diminui a medida que um dos valores,  $a$  ou  $b$  se aproxima de 0, até se tornar um estado não emaranhado neste limite[58].

Algumas quantidades foram propostas para mensurar o grau de emaranhamento de um sistema, e agora veremos algumas delas.

### 5.3.1 Estados mistos e puros

Para introduzir os quantificadores de emaranhamento é importante apresentar as definições de estados puros e mistos. **Estados puros** são aqueles que podem ser representados por um vetor

$$|\Phi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle. \quad (5.2)$$

Assim, há uma probabilidade  $|c_i|^2$  de se encontrar o sistema no subestado  $\phi_i$  e o conjunto dos  $\phi_i$ 's formam uma base ortogonal. **Estados mistos** formam um ensemble com vários estados dados por  $|\Phi_i\rangle$  que ocorrem com probabilidade  $p_i$ . Neste caso, o estado não pode ser escrito simplesmente como na [Equação 5.2](#) e os estados  $|\Phi_i\rangle$  não precisam ser ortogonais. O operador densidade é apropriado para representar tanto estados puros quanto mistos e pode ser escrito como[61]

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N p_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i|. \quad (5.3)$$

A definição de emaranhamento para estados mistos difere um pouco do que vimos para estados puros. Dizemos que um sistema formado por  $m$  estados e constituído por  $n$  subsistemas representados por  $\rho_j$  é separável e, conseqüentemente, não-emaranhado, quando é possível representar seu operador densidade por

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i (\hat{\rho}_1^i \otimes \hat{\rho}_2^i \otimes \cdots \otimes \hat{\rho}_n^i). \quad (5.4)$$

### 5.3.2 Entropia de von Neumann

Vamos agora apresentar a entropia de von Neumann ou entropia de emaranhamento. Seja um sistema contendo duas partes  $A$  e  $B$  ( $A$  e  $B$  podem ser partículas ou subsistemas, por exemplo). Um estado puro desse sistema pode ser escrito por

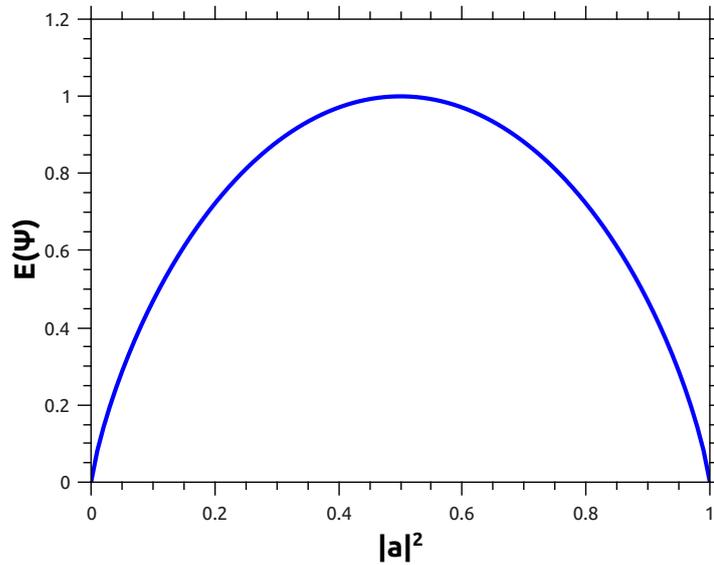
$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\phi_i^A\rangle \otimes |\phi_i^B\rangle, \quad (5.5)$$

em que  $\{|\phi_1^A\rangle, \dots, |\phi_n^A\rangle\}$  e  $\{|\phi_1^B\rangle, \dots, |\phi_n^B\rangle\}$  formam seleções de bases ortonormais de cada sistema, respectivamente e  $c_i$  são coeficientes positivos que devem satisfazer  $\sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1$ . A entropia de von Neumann é definida por[62]

$$E(\Psi) \equiv -\text{Tr}_A(\rho \log_2 \rho) = -\text{Tr}_B(\rho \log_2 \rho) = -\sum_{i=1}^n |c_i|^2 \log_2 |c_i|^2, \quad (5.6)$$

em que  $\rho_A$  e  $\rho_B$  são os operadores densidade dos subsistemas  $A$  e  $B$  e os traços são tomados parcialmente sobre o subsistema  $A$  ou  $B$ . O valor mínimo de  $E(\Psi)$  é 0 e corresponde um estado fatorável e seu valor máximo é  $\log_2 n$  quando o estado está maximamente emaranhado (nesta situação, o estado possui  $n$  termos de iguais probabilidades, ie.,  $c_i$ 's iguais)[63].

Figura 15 – Gráfico da entropia de von Neumann em função do módulo de uma das amplitudes do par de *qubits*.



Fonte: Próprio autor.

Como exemplo, tomemos o estado do par de *qubits* dado por Equação 5.1. A Equação 5.6 juntamente com a condição  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  fornece

$$E(\Psi) = -|a|^2 \log_2 |a|^2 - (1 - |a|^2) \log_2 (1 - |a|^2),$$

cujo gráfico se encontra na Figura 15. Os casos  $a = 0 \Rightarrow b = 1$  e  $a = 1 \Rightarrow b = 0$  retornam um estado separável, confirmado pelo valor nulo da entropia de von Neumann. O emaranhamento é máximo quando  $|a|^2 = \frac{1}{2}$  e a entropia de von Neumann é igual a 1. Um exemplo dessa situação é  $a = -b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , resultando no estado  $|e_4\rangle$ , em que

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (5.7)$$

$$|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} i (|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (5.8)$$

$$|e_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} i (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (5.9)$$

$$|e_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (5.10)$$

são conhecidos como estados de Bell[63].

### 5.3.3 Emaranhamento de formação

A entropia de von Neumann funciona muito bem para quantificar emaranhamento de estados puros. Para estados mistos, entretanto, a entropia de emaranhamento pode ser positiva

para cada subsistema mesmo que não haja emaranhamento. Neste caso, continuando com o exemplo de Alice e Bob mostrado na Ref. 62, vamos mostrar o quantificador que resolve este problema.

Supondo que Alice e Bob querem criar  $n$  cópias de um estado misto  $\hat{\rho}$ . Eles possuem à disposição muitos estados singletos, Alice tomando a parte  $A$ , e Bob tomando a parte  $B$ . Quantos singletos eles precisam usar para criar cada cópia do estado  $\hat{\rho}$ ? De acordo com a [Equação 5.3](#), para cada  $i = 1, 2, \dots, N$  eles criam  $np_i$  cópias do estado puro  $|\Phi\rangle_i$  e, para isso, usam  $np_iE(\Phi_i)$  estados singletos. Após terminar, eles terão criado um total de  $n$  estados puros que fazem parte de um ensemble. Então, suponhamos que todos os meios que possam indicá-los qual índice  $i$  está associado com cada par. Desta forma, cada par pode pertencer a um estado  $(\Phi_i)$  com probabilidade  $p_i$ , ou seja, os pares estão em um estado misto  $\hat{\rho}$ . No final, eles usaram a seguinte quantidade de estados singletos

$$m = n \sum_{i=1}^N p_i E(\Phi_i). \quad (5.11)$$

Mas  $n$  depende da decomposição de  $\hat{\rho}$ . Dessa forma, para a definição de emaranhamento de formação, a decomposição de  $\hat{\rho}$  é escolhida de forma que minimize a entropia, ou seja,

$$E_f(\hat{\rho}) = \min \sum_{i=1}^N p_i E(\Phi_i), \quad (5.12)$$

sendo, portanto, uma extensão da entropia de von Neumann para  $N > 1$ .

## 5.4 Concorrência

Em 1997, Wootters definiu[58] a função concorrência por

$$C = |\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle|, \quad (5.13)$$

que quantifica o emaranhamento do par de *qubits*, em que a operação *spin-flip*<sup>4</sup> é dada por

$$|\tilde{\Psi}\rangle = (\sigma_y \otimes \sigma_y) |\Psi^*\rangle, \quad (5.14)$$

sendo

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

a segunda matriz de Pauli e  $|\Psi^*\rangle$  o complexo conjugado de  $|\Psi\rangle$  na base  $\{| \uparrow\uparrow \rangle, | \uparrow\downarrow \rangle, | \downarrow\uparrow \rangle, | \downarrow\downarrow \rangle\}$ . A transformação *spin-flip* em um estado emaranhado, resultará no mesmo estado a menos de um sinal negativo, de forma que a [Equação 5.13](#) fornece  $C = 1$  para o estado singlete, por exemplo. A

<sup>4</sup> A operação *spin-flip* aplicado a um estado puro retorna o estado de cada *qubit* ao seu estado ortogonal.

aplicação em um estado separável, como  $|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ , retorna um estado ortogonal resultando em  $\mathcal{C} = 0$ .

Se um estado puro de um sistema binário for escrito na base formada pelos estados de Bell (ver Equação 5.7) por  $|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle$ , alguns passos fornecem

$$\mathcal{C} = \left| \sum_i \alpha_i^2 \right|. \quad (5.16)$$

A concorrência varia continuamente entre 0 (estado separável) e 1 (estado maximamente emaranhado) e é monotonicamente relacionada com o emaranhamento de formação[64] por

$$E_f(\mathcal{C}) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - \mathcal{C}^2}}{2}\right); \quad (5.17)$$

$$h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x). \quad (5.18)$$

Vamos calcular a concorrência do par de *qubits* em dois estados diferentes: no estado singleto e em um estado separável. O estado singleto é dado por  $|\Psi\rangle = |e_1\rangle$ . Então  $\mathcal{C} = |1^2 + 0^2 + 0^2 + 0^2| = 1$ , como era esperado, já que este estado é maximamente emaranhado. Na verdade, qualquer estado de Bell possui este mesmo valor de concorrência. Vamos escrever agora o estado separável  $|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$  na base  $|e_i\rangle$ . Os coeficientes  $\alpha_i$  são obtidos por  $\alpha_i = \langle e_i | \Psi \rangle$ . Assim,  $\Psi = |e_1\rangle - i|e_2\rangle$ . A concorrência é, então,  $\mathcal{C} = |1^2 + (-i)^2 + 0^2 + 0^2| = 0$ .

## 5.5 Emaranhamento em pontos quânticos

O interesse por emaranhamento cresceu bastante nos últimos anos devido a diversas aplicações tecnológicas. Algumas dessas aplicações são informação e computação quântica[65, 66] e criptografia quântica[67, 68]. A pesquisa de emaranhamento aplicado a física do estado sólido também é crescente[69, 70]. O uso de pontos quânticos como emaranhadores de elétrons foi recentemente proposto em 2003 por Beenakker *et al.*[71] e desde então tem sido bastante empregado[72, 73, 74, 75].

No caso especial de um ponto quântico com dois guias de dois canais cada, o estado  $|\Psi\rangle$  pode ser escrito como uma combinação linear de subestados  $|\psi\rangle = |m_{1,1}, m_{1,2}, m_{2,1}, m_{2,2}\rangle$ , em que o par  $(i, j)$  representa o canal  $j$  do guia  $i$  e  $m_{ij}$  só pode compreender dois valores<sup>5</sup>, 0 ou 1, indicando, respectivamente, a ausência ou a existência de um elétron no respectivo canal[73].

Alternativamente, poderíamos representar esses estados com respeito a ocupação de elétrons em cada guia, com uma representação da forma  $|n_1, n_2\rangle$ , onde  $n_i$  é o número de elétrons no guia  $i$ . Sendo assim, o estado de dois elétrons no guia 1 é  $|2, 0\rangle = |1, 1, 0, 0\rangle$ , representando um estado separável de dois guias, pois  $|2, 0\rangle = |1, 1\rangle|0, 0\rangle$ . O mesmo ocorre para o estado de dois

<sup>5</sup> No máximo um elétron pode ocupar cada canal devido ao princípio de exclusão de Pauli.

elétrons no guia 2,  $|0, 2\rangle = |0, 0, 1, 1\rangle = |0, 0\rangle|1, 1\rangle$ . No entanto, para o estado de um elétron em cada guia temos

$$|1, 1\rangle = \alpha_1|1, 0, 1, 0\rangle + \alpha_2|1, 0, 0, 1\rangle + \alpha_3|0, 1, 1, 0\rangle + \alpha_4|0, 1, 0, 1\rangle,$$

o que gera um possível estado emaranhado de dois qubits, visto que podemos mapear os estados de cada um dos guias nos estado de spin 1/2 da seguinte forma:

$$|1, 0\rangle = |\uparrow\rangle \text{ e } |0, 1\rangle = |\downarrow\rangle.$$

Por isso, podemos interpretar que nesse caso cada guia desempenha o papel análogo ao de um orbital atômico, pois é possível representar a ocupação de cada canal como sendo um estado de projeção  $z$  do spin do elétron, o que justifica o emprego da denominação *emaranhamento orbital*.

Podemos considerar uma situação física em que dois elétrons estão no guia 1 antes do espalhamento. Sendo assim, definimos o estado de entrada como  $|\Psi\rangle_{\text{entrada}} = |2, 0\rangle_e$ . O ponto quântico atuará como um misturador de estados, causando um possível emaranhamento orbital, pois o estado após o espalhamento mais geral é  $|\Psi\rangle_{\text{saída}} = \alpha_{2,0}|2, 0\rangle_s + \alpha_{0,2}|0, 2\rangle_s + \alpha_{1,1}|1, 1\rangle_s$ . Nesse caso, Beenakker *et al.* demonstraram[71] que a concorrência do estado  $|1, 1\rangle_s$  é

$$\mathcal{C} = \frac{2\sqrt{(1-\tau_1)\tau_1(1-\tau_2)\tau_2}}{\tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2}, \quad (5.19)$$

em que  $\tau_1$  e  $\tau_2$  são os autovalores de transmissão<sup>6</sup> do ponto quântico. O denominador

$$\mathcal{N} = \tau_1 + \tau_2 - 2\tau_1\tau_2 \quad (5.20)$$

é definido como a norma quadrada  $\mathcal{N} = |\langle 1, 1 | \Psi_{\text{saída}} \rangle|^2$  e representa a probabilidade de ocorrer um estado com possibilidade de emaranhamento. De forma simplificada, o estado  $|1, 1\rangle$  com probabilidade de ocorrer  $\mathcal{N}$  é emaranhado se seu desenvolvimento na base descrita acima possuir mais de um termo. Se o estado é emaranhado, então este emaranhamento é avaliado de acordo com a [Equação 5.19](#).

O fato de  $\tau_1$  e  $\tau_2$  variarem entre 0 e 1 implica em uma restrição que envolve a norma quadrada e a concorrência, dada por[75]

$$\mathcal{N}(1 + \mathcal{C}) < 1. \quad (5.21)$$

A produção de emaranhamento se torna mais eficiente à medida que ambas a concorrência e a norma quadrada aumentam. Por outro lado, situações de alto emaranhamento e baixa probabilidade de ocorrência ou vice-versa não representam uma produção eficiente de emaranhamento. Para melhor avaliar essa eficiência, uma nova quantidade chamada fator de produção de emaranhamento foi definida como

$$\eta \equiv \mathcal{N}\mathcal{C} = 2\sqrt{(1-\tau_1)\tau_1(1-\tau_2)\tau_2}. \quad (5.22)$$

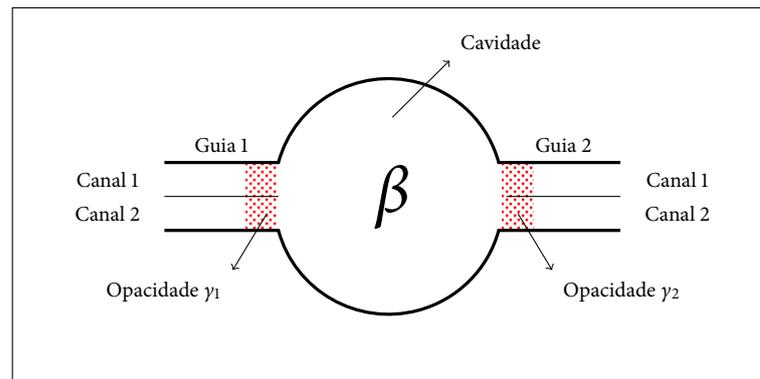
Portanto, a condição  $\eta \rightarrow 0$  representa estados minimamente emaranhados ou que ocorrem raramente, enquanto a eficiência na produção de emaranhamento aumenta com  $\eta$ .

<sup>6</sup> Autovalores da matriz  $t^\dagger t$ , em que  $t$  é o bloco de transmissão da matriz de espalhamento.

## 6 | Simulação computacional

Neste capítulo apresentaremos a metodologia utilizada para realizar simulação computacional em um ponto quântico caótico contendo dois guias de dois canais, conforme ilustrado na [Figura 16](#). O objetivo da simulação é o estudo da produção do emaranhamento orbital abordado na [seção 5.5](#). Todos os três casos de simetria serão considerados. Alguns dos resultados para  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$  são reproduções daqueles obtidos originalmente nas Ref. [73](#) e [75](#).

Figura 16 – Ilustração de um ponto quântico contendo dois guias. Cada guia  $i$  possui dois canais e uma probabilidade de reflexão representada por opacidade  $\gamma_i$ .



Fonte: Baseado na Ref. [73](#).

### 6.1 Metodologia

A primeira etapa consiste em determinar as matrizes de espalhamento do sistema. Neste trabalho, os pontos quânticos foram considerados com guias ideais e não-ideais. Os guias não-ideais possuem uma barreira e a probabilidade de um elétron ser transmitido por ela é representado por  $\Gamma$  e denomina-se a transparência do guia. Encontra-se também na literatura um parâmetro que caracteriza a dificuldade em um elétron ser transmitido pela barreira, chamada opacidade e dada por  $\gamma = \sqrt{1 - \Gamma}$ . Então,  $\gamma^2$  representa a probabilidade de reflexão em determinado canal.

Vamos montar as matrizes de espalhamento  $\mathbb{S}_1$  e  $\mathbb{S}_2$  referentes às barreiras nos guias 1 e 2. Como a transmitância da barreira é invariante à mudança de sentido dos elétrons,  $\mathbb{S}_l$  deve ser simétrica ( $l = 1, 2$ ). Então, os elementos da matriz devem ser dados pelos coeficientes de reflexão em

sua diagonal principal e pelos coeficientes de transmissão em sua diagonal secundária.

$$\mathbb{S}_l = \begin{pmatrix} r_l \mathbf{I}_2 & t_l \mathbf{I}_2 \\ t_l \mathbf{I}_2 & r_l \mathbf{I}_2 \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

sendo  $\mathbf{I}_2$  a matriz identidade de ordem 2. O coeficiente de reflexão é determinado através de:  $|r_l|^2 = \gamma^2 \implies r_l = e^{i\phi} \gamma$ . Já o coeficiente de transmissão é obtido por:  $|t_l|^2 = 1 - |r_l|^2 \implies t_l = e^{i\phi} \sqrt{1 - \gamma^2}$ . Ao substituir os coeficientes na [Equação 6.1](#) e aplicando a condição de unitariedade da matriz de espalhamento, determina-se que  $\theta - \phi = \frac{\pi}{2}$ . Um par que atende a essa condição é  $\phi = \frac{\pi}{2}$  e  $\theta = 0$ . Assim, obtém-se

$$\mathbb{S}_l = \begin{pmatrix} i\gamma \mathbf{I}_2 & \sqrt{1 - \gamma^2} \mathbf{I}_2 \\ \sqrt{1 - \gamma^2} \mathbf{I}_2 & i\gamma \mathbf{I}_2 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

A segunda etapa é gerar uma matriz de espalhamento  $\mathbb{S}_0$  referente à cavidade utilizando o algoritmo detalhado na Ref. [76](#). Essa matriz deve satisfazer as condições de simetria estabelecidas na [seção 4.3](#). Após a construção das matrizes de espalhamento, a [Equação 3.12](#) pode ser utilizada para associar as matrizes em uma única matriz  $\mathbb{S}$  que representa todo o sistema.

Na terceira etapa, os autovalores de transmissão  $\tau_1$  e  $\tau_2$  são computados através do bloco de transmissão da matriz  $\mathbb{S}$ . Com os autovalores, é possível determinar então a concorrência  $\mathcal{C}$  e a norma quadrada  $\mathcal{N}$ . Para a análise estatística, geram-se diversas matrizes  $\mathbb{S}_0$  aleatórias, repetindo-se o cálculo de  $\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{N}$  e  $\eta$ . Qualquer grandeza que dependa dos autovalores de transmissão pode ser estudada em função das opacidades que são pre-estabelecidas.

## 6.2 Resultados

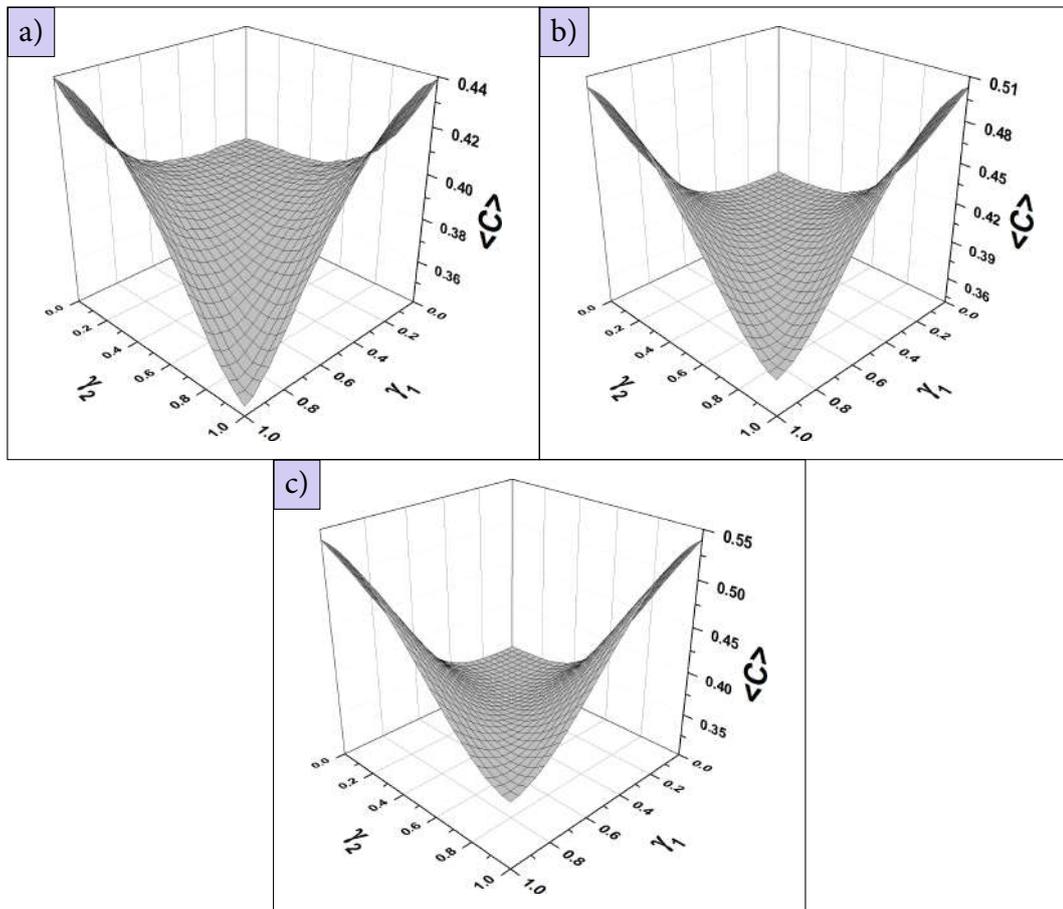
Esta seção é dedicada aos resultados obtidos com a metodologia apresentada na seção anterior. Para isso, ela será decomposta deste modo:

### 6.2.1 Contatos com opacidades arbitrárias

Uma primeira avaliação da produção de emaranhamento no ponto quântico pode ser feito variando-se as opacidades dos dois guias. A simulação foi realizada diversas vezes para cada par  $(\gamma_1, \gamma_2)$ , das quais foi extraída uma média de  $\mathcal{C}$  e  $\mathcal{N}$ . Todas as três simetrias foram verificadas.

A [Figura 17](#) mostra  $\langle \mathcal{C} \rangle$  em função das opacidades para os três valores de  $\beta$ . Pode-se notar que o valor máximo da média da concorrência aumenta de acordo com o valor de  $\beta$ . Além disso, em todas as situações de simetria, o valor máximo de  $\langle \mathcal{C} \rangle$  ocorre quando um dos contatos é ideal enquanto o outro possui opacidade igual a 1. As médias da concorrência para  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$  já foram obtidas anteriormente e são encontradas na Ref. [73](#).

Figura 17 – Gráficos tridimensionais da média da concorrência  $\langle C \rangle$  em função das opacidades  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  nos guias para a)  $\beta = 1$ , b)  $\beta = 2$  e c)  $\beta = 4$ .

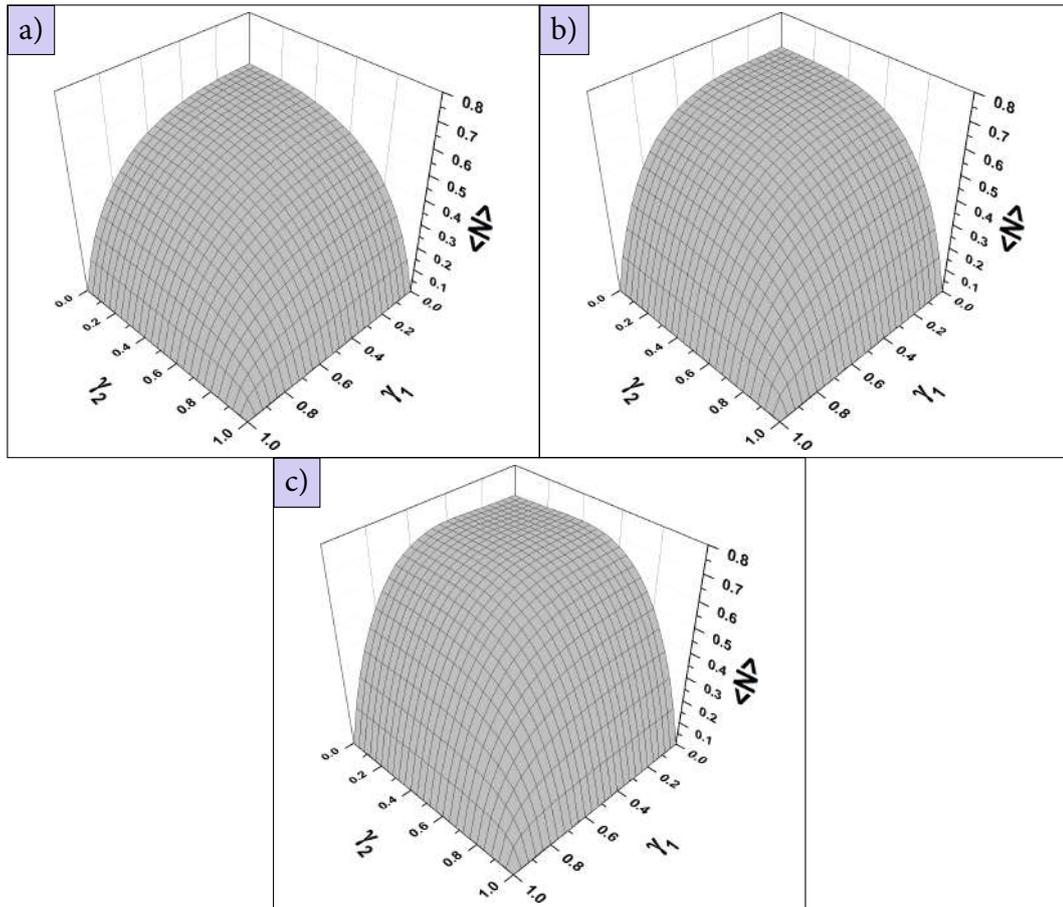


Fonte: Próprio autor.

Agora vamos analisar o comportamento da média da norma quadrada em função das opacidades. A Figura 18 apresenta os gráficos análogos aos anteriores, porém para  $\langle \mathcal{N} \rangle$ . Há um comportamento interessante de  $\langle \mathcal{N} \rangle$ . Diferentemente do que ocorre nas situações  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$ , os máximos de  $\langle \mathcal{N} \rangle$  ocorrem quando um dos contatos é não-ideal para  $\beta = 4$ . Essa propriedade é particularmente importante no ponto de vista experimental, já que produzir contatos ideais é inviável. Além disso, percebemos que  $\langle \mathcal{N} \rangle$  diminui mais suavemente nas proximidades da situação de contatos ideais para  $\beta = 4$  do que para os outros casos de simetria.

Os comportamentos da concorrência e da norma quadrada são diferentes, de forma que seus máximos ocorrem para diferentes pares  $(\gamma_1, \gamma_2)$ . Além disso, embora os máximos valores de  $\mathcal{C}$  representem as situações em que o estado possui o maior grau de emaranhamento, essas situações não representam a melhor eficiência na produção de emaranhamento. Isso se deve ao fato de a probabilidade de um estado mais emaranhado ocorrer é mínima. Obviamente, essa condição não é buscada no ponto de vista experimental. Uma solução para maximizar as duas grandezas simultaneamente é através do fator de produção de emaranhamento.

Figura 18 – Gráficos tridimensionais da média da norma quadrada  $\langle \mathcal{N} \rangle$  em função das opacidades  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  nos guias para a)  $\beta = 1$ , b)  $\beta = 2$  e c)  $\beta = 4$ .



Fonte: Próprio autor.

A Figura 19 apresenta  $\langle \eta \rangle$  em função de  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  para as três situações de simetria. Como esperado,  $\langle \eta \rangle$  é máximo quando os guias são ideais para  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$  e quando um dos guias é não-ideal para  $\beta = 4$ . A combinação de  $\mathcal{C}$  e  $\mathcal{N}$  gerou um máximo bastante nítido no caso simplético. Os máximos de  $\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{N}$  e  $\eta$  estão dispostos na Tabela 2 para facilitar a comparação de valores entre diferentes simetrias<sup>1</sup>.

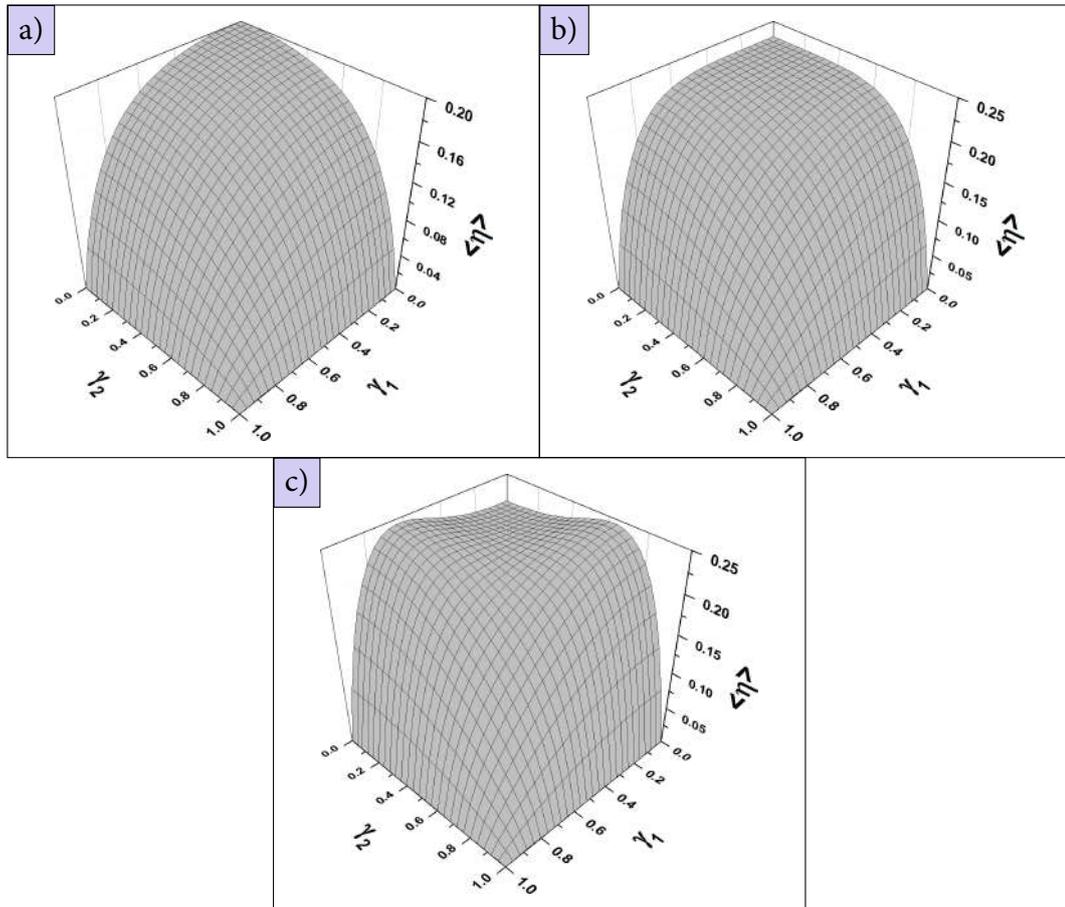
### 6.2.2 Um contato ideal

Nas três simetrias, os máximos ocorreram quando um dos contatos era opaco. Nesta seção apresentaremos mais resultados considerando um dos contatos opacos e, por questão de simplicidade, consideraremos o primeiro contato ideal ( $\gamma_1 = 0$ ) em todas as situações enquanto a opacidade do segundo contato  $\gamma_2$  é livre e chamaremos simplesmente por opacidade.

A Figura 20 mostra a média da concorrência em função da opacidade. Nota-se que  $\langle \mathcal{C} \rangle$  é sempre maior para  $\beta = 2$  do que para  $\beta = 1$ . Já a curva referente ao caso  $\beta = 4$  intercepta as curvas

<sup>1</sup> Os resultados são invariantes ao intercâmbio de  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$ .

Figura 19 – Gráficos tridimensionais do fator de produção de emaranhamento  $\langle \eta \rangle$  em função das opacidades  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  nos guias para a)  $\beta = 1$ , b)  $\beta = 2$  e c)  $\beta = 4$ .



Fonte: Próprio autor.

Tabela 2 – Máximos valores de  $\langle C \rangle$ ,  $\langle \mathcal{N} \rangle$  e  $\langle \eta \rangle$  nas três simetrias com os respectivos valores de  $\gamma_2$  para  $\gamma_1 = 0$ .

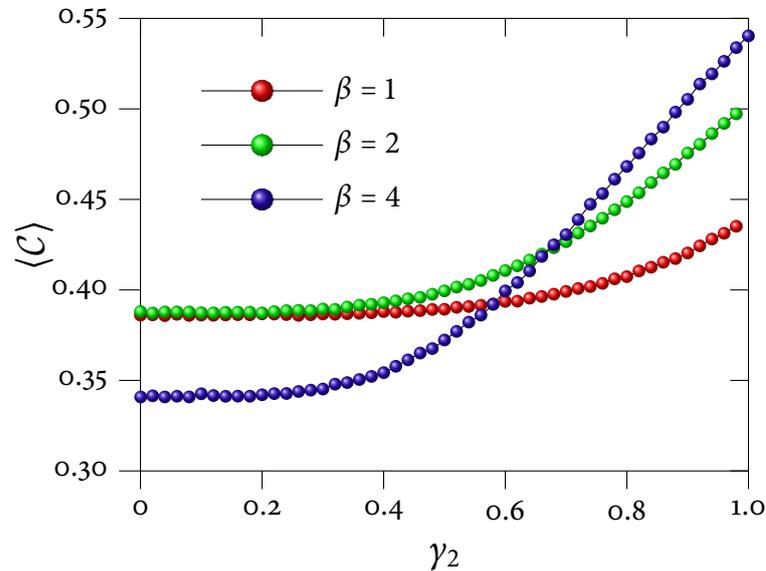
$\beta$	$(\gamma_2, \langle C \rangle)$	$(\gamma_2, \langle \mathcal{N} \rangle)$	$(\gamma_2, \langle \eta \rangle)$
1	(1, 0.44)	(0, 0.60)	(0, 0.20)
2	(1, 0.50)	(0, 0.67)	(0, 0.23)
4	(1, 0.54)	(0.38, 0.70)	(0.62, 0.24)

Fonte: Próprio autor.

para  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$  em pontos distintos  $\gamma \approx 0.58$  e  $\gamma \approx 0.68$ , respectivamente, tornando-se a situação com maior emaranhamento. A Tabela 3 apresenta os pares de coordenadas das interseções entre as curvas.

A média da norma quadrada é mostrada na Figura 21. Diferentemente do comportamento da concorrência, nenhuma curva  $\langle \mathcal{N} \rangle_\beta$  se intercepta. Mas há uma diferença entre as curvas  $\langle \mathcal{N} \rangle_{\beta=1}$

Figura 20 – Média da concorrência  $\langle C \rangle$  em função da opacidade  $\gamma_1$  do guia 1 (o guia 2 tem opacidade fixa  $\gamma_2 = 0$ ). As cores distinguem os gráficos referentes as diferentes simetrias  $\beta = 1, 2, 4$ .



Fonte: Próprio autor.

Tabela 3 – Pares de coordenadas das intersecções entre curvas  $\langle C \rangle$  e  $\langle \eta \rangle$ .

Curvas	$\gamma_2$	Valor
$\langle C \rangle_{\beta=1}$ e $\langle C \rangle_{\beta=4}$	0.58	$\langle C \rangle = 0.39$
$\langle C \rangle_{\beta=2}$ e $\langle C \rangle_{\beta=4}$	0.68	$\langle C \rangle = 0.42$
$\langle \eta \rangle_{\beta=2}$ e $\langle \eta \rangle_{\beta=4}$	0.40	$\langle \eta \rangle = 0.23$

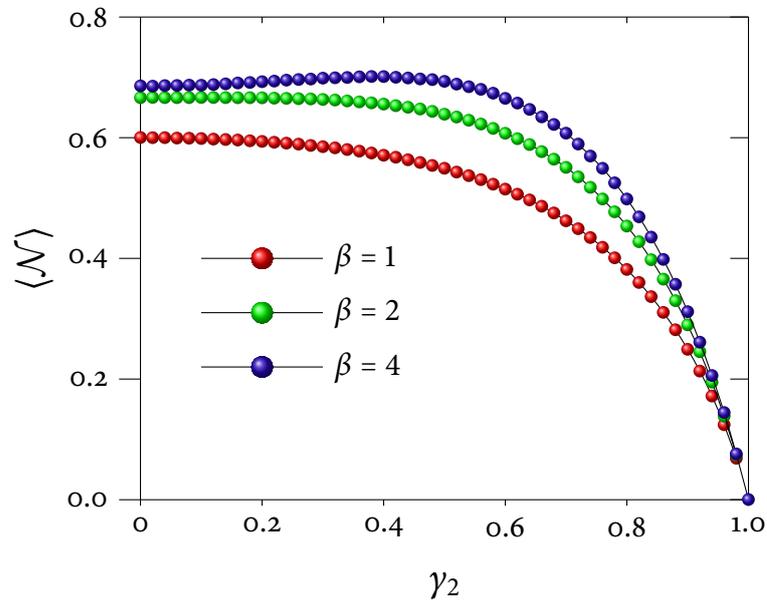
Fonte: Próprio autor.

e  $\langle \mathcal{N} \rangle_{\beta=2}$  e a curva  $\langle \mathcal{N} \rangle_{\beta=4}$ . As duas primeiras atingem o máximo quando o segundo contato é opaco, enquanto que para o caso simplético o máximo de  $\langle \mathcal{N} \rangle$  ocorre em  $\gamma_2 \approx 0.38$ .

A média do fator de emaranhamento está disposta na [Figura 22](#). Mais uma vez há uma diferença entre as simetrias  $\beta = 1, 2$  e a simetria  $\beta = 4$ . As curvas  $\langle \eta \rangle_{\beta=1}$  e  $\langle \eta \rangle_{\beta=2}$  são monotonamente decrescente, enquanto a curva  $\langle \eta \rangle_{\beta=4}$  apresenta um máximo em um valor intermediário de  $\gamma_2$  (ver [Tabela 2](#)). Além disso,  $\langle \eta \rangle_{\beta=4}$  intercepta  $\langle \eta \rangle_{\beta=2}$  em  $\gamma_2 \approx 0.4$  (ver [Tabela 3](#)) tornando-se menor para valores menores de  $\gamma_2$ .

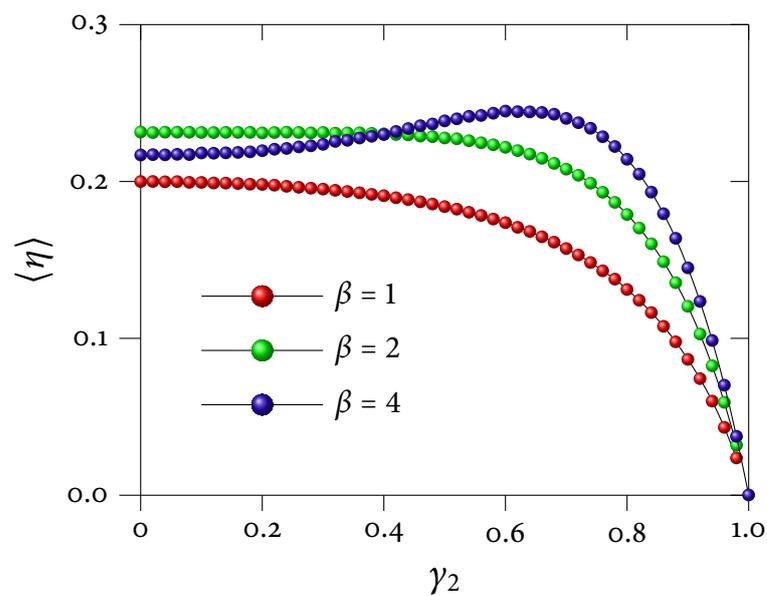
Para melhor analisar a produção de emaranhamento no ponto quântico, foram obtidas as distribuições de probabilidade da concorrência, da norma quadrada e do fator de produção de emaranhamento. Essas distribuições estão dispostas na [Figura 23](#), na [Figura 24](#) e na [Figura 25](#), respectivamente. As distribuições foram geradas selecionando os valores  $\gamma_2 = 0.0$ ,  $\gamma_2 = 0.3$ ,

Figura 21 – Média da norma quadrada  $\langle \mathcal{N} \rangle$  em função da opacidade  $\gamma_1$  do guia 1 (o guia 2 tem opacidade fixa  $\gamma_2 = 0$ ). As cores distinguem os gráficos referentes as diferentes simetrias  $\beta = 1, 2, 4$ .



Fonte: Próprio autor.

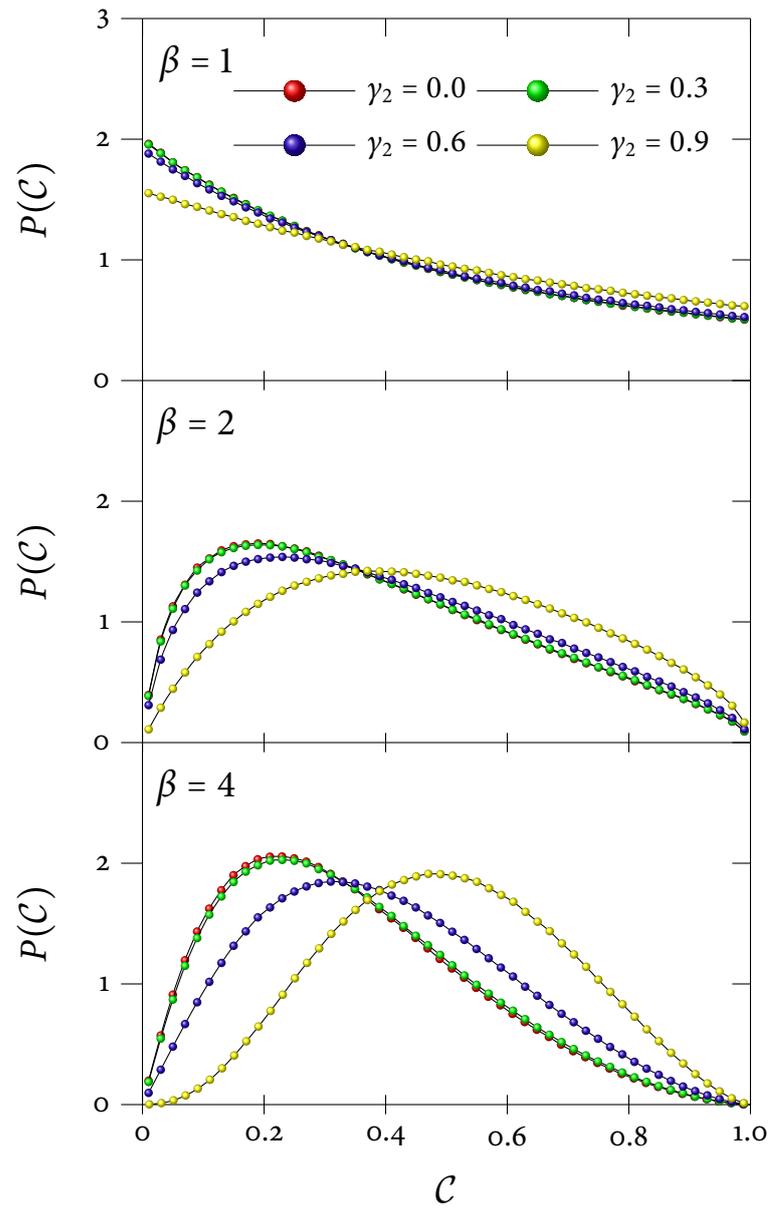
Figura 22 – Média fator de produção de emaranhamento  $\langle \eta \rangle$  em função da opacidade  $\gamma_1$  do guia 1 (o guia 2 tem opacidade fixa  $\gamma_2 = 0$ ). As cores distinguem os gráficos referentes as diferentes simetrias  $\beta = 1, 2, 4$ .



Fonte: Próprio autor.

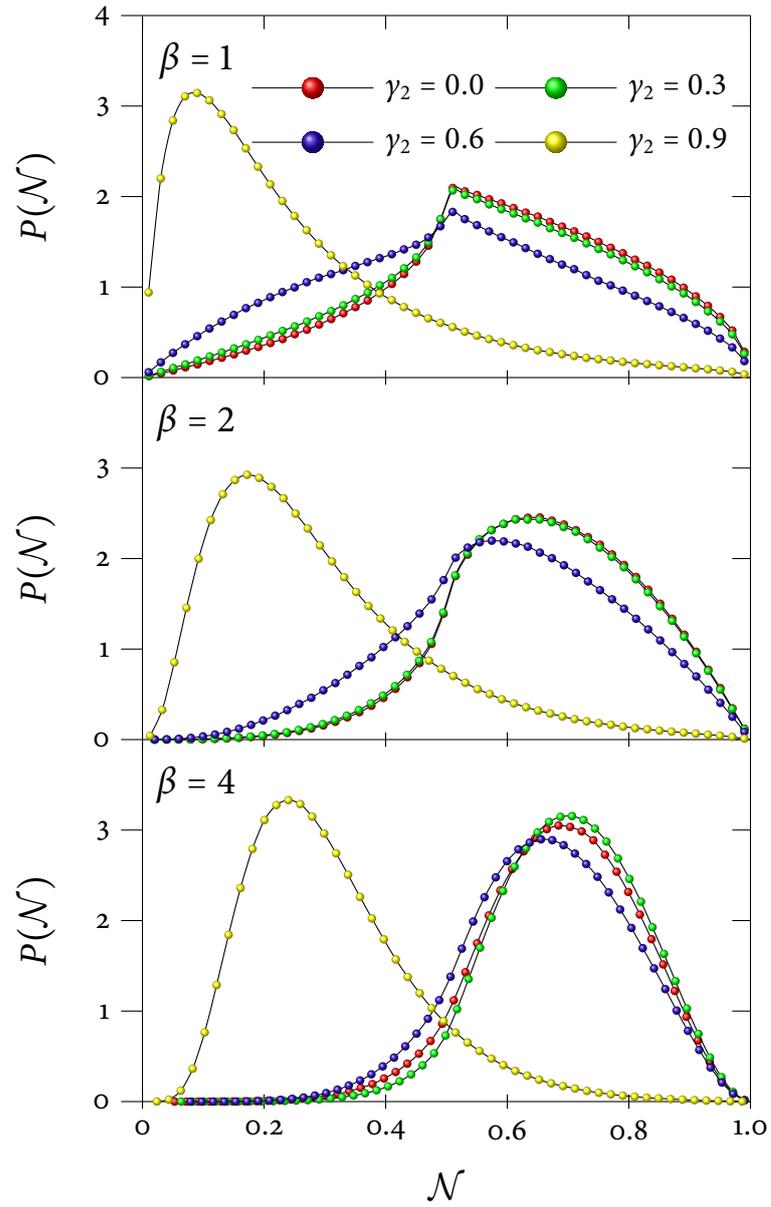
$\gamma_2 = 0.6$  e  $\gamma_2 = 0.9$ . As distribuições  $P(\mathcal{N})$  para guias ideais ( $\gamma_2 = 0$ ) para as simetrias  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$  já existem na literatura e são encontradas na Ref. 75. Percebemos em todas as distribuições uma diminuição da variância a medida que aumenta o valor de  $\beta$ , pois elas se tornam mais estreitas. Pode-se notar também com o aumento de  $\beta$  que as distribuições  $P(\mathcal{C})$  e  $P(\eta)$  se tornam mais sensíveis à mudança de  $\gamma_2$ , pois os gráficos se distanciam um dos outros. Já a distribuição  $P(\mathcal{N})$  assume algumas formas mais irregulares, principalmente para o caso  $\beta = 1$  e opacidades pequenas, com singularidades em  $\mathcal{N} = \frac{1}{2}$ . Esse ponto pode ser previsto[77] analisando-se  $\mathcal{N}$  em função dos autovalores de transmissão. A singularidade pode ocorrer quando  $\frac{\partial \mathcal{N}}{\partial \tau_1} = \frac{\partial \mathcal{N}}{\partial \tau_2} = 0$ . Aplicando-se esta condição à Equação 5.20 obtemos  $\tau_1 = \tau_2 = \frac{1}{2} = \mathcal{N}$ . Entretanto, a medida que os valores de  $\beta$  e  $\gamma_2$  aumentam as distribuições da norma quadrada se tornam mais regulares. Para finalizar as observações, nota-se da Figura 25 que  $\eta$  assume apenas valores entre 0 e  $\frac{1}{2}$ , pois  $\eta$  como função de  $\tau_1$  e  $\tau_2$  (ver Equação 5.22) possui máximo valor quando  $\tau_1 = \tau_2 = \frac{1}{2} = \eta$ .

Figura 23 – Distribuições da concorrência  $\mathcal{C}$  para as simetrias  $\beta = 1, 2, 4$ .



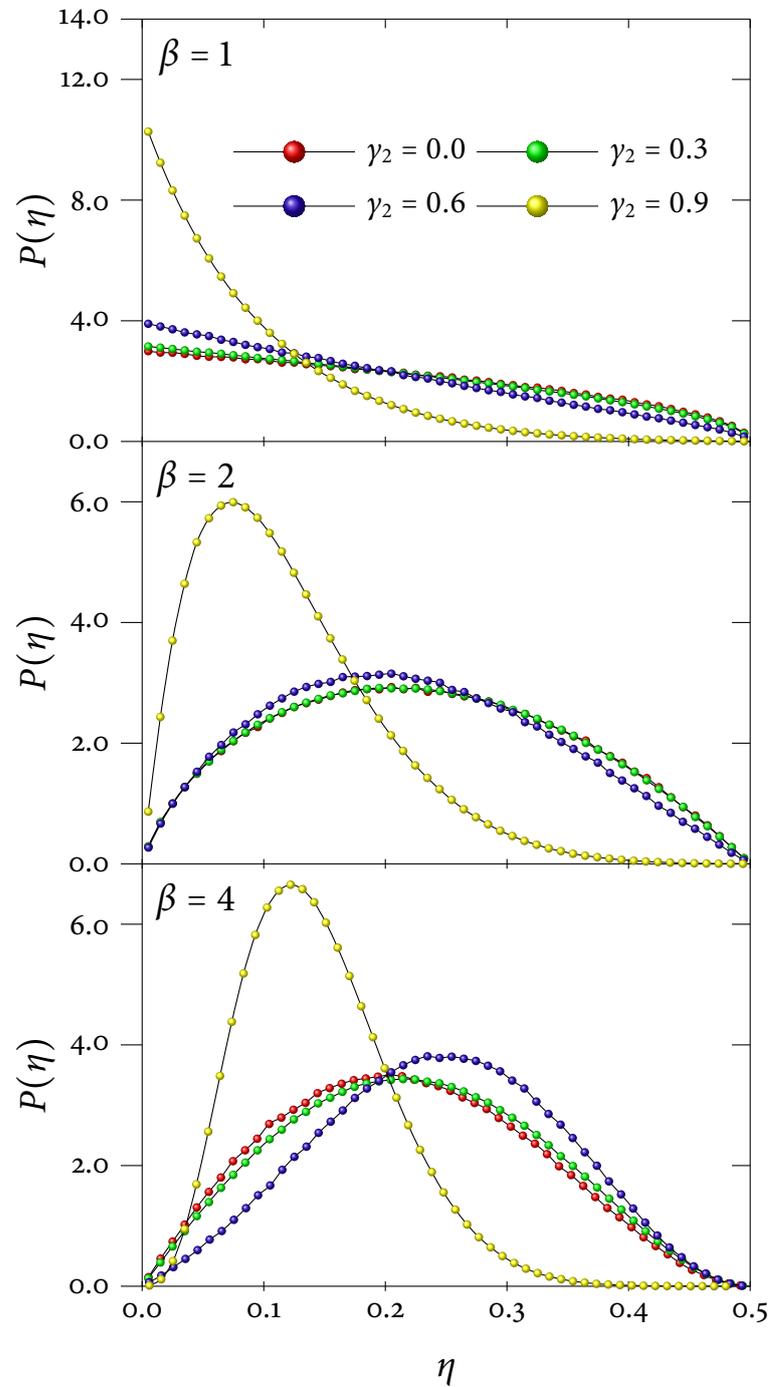
Fonte: Próprio autor.

Figura 24 – Distribuições da norma quadrada  $\mathcal{N}$  para as simetrias  $\beta = 1, 2, 4$ .



Fonte: Próprio autor.

Figura 25 – Distribuições do fator de produção de emaranhamento  $\eta$  para as simetrias  $\beta = 1, 2, 4$ .



Fonte: Próprio autor.

## 7 | Conclusões

Nesta dissertação, revisamos alguns conceitos utilizados na área de física mesoscópica. Enfatizamos o sistema ponto quântico, mostrando como ocorre o transporte de elétrons. Para isso, apresentamos o formalismo de matrizes de espalhamento e sua utilidade para determinar diversas propriedades do ponto quântico através de seus autovalores de transmissão.

A teoria de matrizes aleatórias, que tem sido bastante empregada nas últimas décadas, foi exposta. Uma de suas principais aplicações é justamente para o estudo de sistemas caóticos. O sistema utilizado como base para a produção dessa dissertação, o ponto quântico, é um bom exemplo de sistema caótico devido à complexa geometria da cavidade. Dentro do estudo de matrizes aleatórias, pudemos ver as simetrias das matrizes de espalhamento, compreendendo as simetrias de Wigner-Dyson, e suas relações com as simetrias de reversão temporal e invariância sob rotação de spin.

Para finalizar a revisão bibliográfica, estudamos uma das mais intrigantes propriedades da mecânica quântica, o emaranhamento. Após mostrar um resumo histórico das pesquisas feitas sobre o emaranhamento, percebemos que ela pode ser muito útil e de grande aplicabilidade em tecnologias mais recentes. Vimos também que é possível utilizar o ponto quântico como emaranhador de elétrons, visto que a cavidade desempenha um papel de misturador de amplitudes de onda nos vários canais de espalhamento existentes. Através do estado final representando dois elétrons que interagiram com o interior da cavidade, podemos quantificar o emaranhamento no ponto quântico.

Com todas essas revisões da literatura, foi possível realizar simulações computacionais para determinar algumas propriedades com relação à produção de emaranhamento em um ponto quântico. As simulações foram feitas considerando guias do ponto quântico com opacidades arbitrárias e também as três simetrias de Wigner-Dyson ( $\beta = 1, 2, 4$ ). Aplicando-se a teoria de matrizes aleatórias e gerando-se muitas matrizes de espalhamento, pudemos estudar a estatística das seguintes grandezas relacionadas com a produção de emaranhamento: concorrência  $\mathcal{C}$ , norma quadrada  $\mathcal{N}$  e fator de produção de emaranhamento  $\eta$ , em que  $\eta$  foi definido como a multiplicação de  $\mathcal{C}$  por  $\mathcal{N}$ .

Na literatura já havia resultados semelhantes para os casos  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$ , com cálculo da concorrência com guias não-ideais e da norma quadrada para guias ideais. Todos os nossos resul-

tados reproduzidos estão em pleno acordo com os da literatura. Além disso, nessa dissertação se encontram resultados inéditos, que são o cálculo da norma quadrada para guias não-ideais, todos os resultados para  $\beta = 4$  e, obviamente, resultados sobre o fator de produção de emaranhamento. As principais conclusões acerca da pesquisa são constadas abaixo:

- A concorrência é maximizada sempre quando um dos contatos é ideal, para qualquer simetria;
- A concorrência é máxima quando um contato é ideal e outro é opaco. Entretanto,  $\mathcal{N}$  é nulo nesta situação, pois não é possível ocorrer transporte de carga quando um contato é opaco.
- Na situação descrita na conclusão anterior,  $\eta$  também é nulo quando a concorrência é máxima, confirmando que a produção de emaranhamento nesta situação é inexistente.
- Para  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$ , a produção de emaranhamento é máxima quando os dois contatos são ideais, fornecendo os valores  $\langle \eta \rangle \approx 0.20$  e  $\langle \eta \rangle \approx 0.23$ . Já para  $\beta = 4$ , a otimização da produção de emaranhamento se deu quando um dos guias é ideal e o outro possui opacidade  $\gamma = 0.62$ , resultando em  $\langle \eta \rangle \approx 0.24$ .

Assim, a otimização do emaranhamento é experimentalmente mais viável para a simetria  $\beta = 4$  pois, além do valor de  $\langle \eta \rangle$  ser maior do que para os casos  $\beta = 1$  e  $\beta = 2$ , o seu máximo ocorre quando um dos contatos não é ideal, facilitando sua realização experimental.

Algumas sugestões para trabalhos futuros são as seguintes:

- Explorar outros quantificadores de emaranhamento para o mesmo sistema;
- Estudar com mais detalhes as distribuições de concorrência, norma quadrada e fator de produção de emaranhamento;
- Desenvolver o estudo estatístico através dos cumulantes de distribuições;
- Aumentar o número de canais abertos, achando-se expressão para a quantificação de emaranhamento e explorar sua dependência com o número de canais.

## Referências

- 1 IHN, T. *Electronic quantum transport in mesoscopic semiconductor structures*. New York, EUA: Springer-Verlag New York, 2004. Citado na página 15.
- 2 NAZAROV, Y. V.; BLANTER, Y. M. *Quantum transport: introduction to nanoscience*. New York, EUA: Cambridge University Press, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 15, 23 e 25.
- 3 DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1997. Citado 7 vezes nas páginas 16, 19, 22, 26, 28, 29 e 38.
- 4 HEINZEL, T. *Mesoscopic electronics in solid state nanostructures*. 2nd. ed. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2007. Citado na página 16.
- 5 SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. Electronic localization in disordered systems. *Waves in Random Media*, v. 9, n. 2, p. 255–269, 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0959-7174/9/2/310>>. Citado na página 16.
- 6 LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. V. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 57, p. 287–337, Apr 1985. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.57.287>>. Citado na página 16.
- 7 BASKO, D. *Anderson localization in the presence of interactions or nonlinearities*. Disponível em: <<http://lpmmc.grenoble.cnrs.fr/spip.php?article407&lang=fr#cv>>. Acesso em: 4 abr. 2015. Citado na página 17.
- 8 JÚNIOR, A. F. M. *Propriedades universais de transporte em pontos quânticos com simetria quiral*. 131 f. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2002. Citado na página 18.
- 9 ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, F. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 54, p. 437–672, Apr 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.54.437>>. Citado na página 21.
- 10 KOSTERLITZ, J.; THOULESS, D. Chapter 5 Two-Dimensional Physics. *Progress in Low Temperature Physics*, Elsevier, v. 7, Part B, p. 371–433, 1978. ISSN 0079-6417. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079641708601754>>. Citado na página 21.
- 11 HARMANS, C. J. P. M. *Mesoscopic Physics, an introduction*. Delft, Holanda: [s.n.], 2003. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 26.
- 12 ALMEIDA, F. A. G. de. *Algoritmos numéricos de matrizes aleatórias aplicados a sistemas mesoscópicos*. 129 f. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2010. Citado na página 23.

- 13 OBERHOLZER, S. et al. Shot noise of series quantum point contacts intercalating chaotic cavities. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 66, p. 233304, Dec 2002. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.233304>>. Citado na página 23.
- 14 WEES, B. J. van et al. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 60, p. 848–850, Feb 1988. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.60.848>>. Citado na página 27.
- 15 BEENAKKER, C. W. J. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 731–808, Jul 1997. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.69.731>>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 45.
- 16 JANSSEN, M. *Fluctuations and localization in mesoscopic electron systems*. Farrer Road, Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2001. Citado na página 30.
- 17 MURAYAMA, Y. *Mesoscopic Systems: Fundamentals and applications*. [S.l.]: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2007. Citado na página 30.
- 18 FOLK, J. A. et al. Spin Degeneracy and Conductance Fluctuations in Open Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 86, p. 2102–2105, Mar 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.2102>>. Citado na página 30.
- 19 Potok R. M. et al. Observation of the two-channel Kondo effect. *Nature*, v. 446, n. 7132, p. 167–171, mar 2007. ISSN 0028-0836. 10.1038/nature05556. Disponível em: <[http://www.nature.com/nature/journal/v446/n7132/supinfo/nature05556\\_S1.html](http://www.nature.com/nature/journal/v446/n7132/supinfo/nature05556_S1.html)>. Citado na página 30.
- 20 WHEELER, J. A. On the Mathematical Description of Light Nuclei by the Method of Resonating Group Structure. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 52, p. 1107–1122, Dec 1937. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.1107>>. Citado na página 32.
- 21 BREIT, G. Scattering Matrix of Radioactive States. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 58, p. 1068–1074, Dec 1940. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.58.1068>>. Citado na página 32.
- 22 LANDAUER, R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, v. 21, n. 172, p. 863–867, 1970. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/14786437008238472>>. Citado na página 32.
- 23 ANDERSON, P. W. et al. New method for a scaling theory of localization. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 22, p. 3519–3526, Oct 1980. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.22.3519>>. Citado na página 32.
- 24 SHAPIRO, B. Classical transport within the scattering formalism. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 35, p. 8256–8259, May 1987. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.35.8256>>. Citado na página 32.
- 25 MUTTALIB, K. A.; PICARD, J. L.; STONE, A. D. Random-Matrix Theory and Universal Statistics for Disordered Quantum Conductors. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 59, p. 2475–2478, Nov 1987. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.2475>>. Citado na página 32.

- 26 MELLO, P. A.; STONE, A. D. Maximum-entropy model for quantum-mechanical interference effects in metallic conductors. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 44, p. 3559–3576, Aug 1991. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.3559>>. Citado na página 32.
- 27 MELLO, P. A.; TOMSOVIC, S. Scattering approach to quantum electronic transport. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 46, p. 15963–15981, Dec 1992. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.15963>>. Citado na página 32.
- 28 ALMEIDA, F.; MACÊDO, A. Association of scattering matrices in quantum networks. *Journal of Computational Physics*, v. 243, n. 0, p. 1–13, 2013. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199911300171X>>. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 38.
- 29 MELLO, P. A.; KUMAR, N. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*. New York: Oxford University Press, 2004. ISBN 9780198525820. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 38.
- 30 BROUWER, P. W. Generalized circular ensemble of scattering matrices for a chaotic cavity with nonideal leads. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 51, p. 16878–16884, Jun 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.16878>>. Citado na página 38.
- 31 GUHR, T.; MÜLLER-GROELING, A.; WEIDENMÜLLER, H. A. Random-matrix theories in quantum physics: common concepts. *Physics Reports*, v. 299, n. 4–6, p. 189 – 425, 1998. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157397000884>>. Citado na página 40.
- 32 SENER, M. K. *Universality in Random Matrix Models of Quantum Chromodynamics*. 131 f. Tese (Doctor of Philosophy) — State University of New York at Stony Brook, New York, 1999. Citado na página 40.
- 33 HAAKE, F. *Quantum signatures of chaos / Fritz Haake ; with a foreword by H. Haken*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin ; New York, 1991. xv, 242 p. : p. ISBN 0387531440 3540531440. Citado na página 40.
- 34 BARANGER, H. U.; MELLO, P. A. Mesoscopic transport through chaotic cavities: A random S -matrix theory approach. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 73, p. 142–145, Jul 1994. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.142>>. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 43.
- 35 WISHART, J. The Generalised Product Moment Distribution in Samples from a Normal Multivariate Population. *Biometrika*, Biometrika Trust, v. 20A, n. 1/2, p. pp. 32–52, 1928. ISSN 00063444. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2331939>>. Citado na página 40.
- 36 WIGNER, E. P. On a Class of Analytic Functions from the Quantum Theory of Collisions. *Annals of Mathematics*, Annals of Mathematics, v. 53, n. 1, p. pp. 36–67, 1951. ISSN 0003486X. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1969342>>. Citado na página 40.
- 37 WIGNER, E. P. On the statistical distribution of the widths and spacings of nuclear resonance levels. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 47, p. 790–798, 10 1951. ISSN 1469-8064. Disponível em: <[http://journals.cambridge.org/article\\_S0305004100027237](http://journals.cambridge.org/article_S0305004100027237)>. Citado na página 40.

- 38 WIGNER, E. P. Characteristic Vectors of Bordered Matrices With Infinite Dimensions. *Annals of Mathematics*, Annals of Mathematics, v. 62, n. 3, p. pp. 548–564, 1955. ISSN 0003486X. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1970079>>. Citado na página 40.
- 39 NOBEL MEDIA AB 2014 - NOBELPRIZE.ORG. *Eugene Wigner - Facts*. Disponível em: <[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1963/wigner-facts.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1963/wigner-facts.html)>. Acesso em: 20 abr. 2015. Citado na página 40.
- 40 DYSON, F. J. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 1, p. 140–156, 1962. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/3/1/10.1063/1.1703773>>. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 43.
- 41 DYSON, F. J. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. II. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 1, p. 157–165, 1962. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/3/1/10.1063/1.1703774>>. Citado na página 40.
- 42 DYSON, F. J. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. III. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 1, p. 166–175, 1962. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/3/1/10.1063/1.1703775>>. Citado na página 40.
- 43 DYSON, F. J.; MEHTA, M. L. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. IV. *Journal of Mathematical Physics*, v. 4, n. 5, p. 701–712, 1963. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/4/5/10.1063/1.1704008>>. Citado na página 40.
- 44 MEHTA, M. L.; DYSON, F. J. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. V. *Journal of Mathematical Physics*, v. 4, n. 5, p. 713–719, 1963. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/4/5/10.1063/1.1704009>>. Citado na página 40.
- 45 BOHIGAS, O.; GIANNONI, M. J.; SCHMIT, C. Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 52, p. 1–4, Jan 1984. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.1>>. Citado na página 40.
- 46 MEHTA, M. L. *Random Matrices*. 3rd. ed. Amsterdam: Elsevier/Academic Press, 2004. xviii+688 p. (Pure and Applied Mathematics (Amsterdam), v. 142). ISBN 0-12-088409-7. Citado na página 41.
- 47 COESTER, F. The Symmetry of the S Matrix. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 89, p. 619–620, Feb 1953. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.89.619>>. Citado na página 41.
- 48 MELLO, P.; PEREYRA, P.; KUMAR, N. Macroscopic approach to multichannel disordered conductors. *Annals of Physics*, v. 181, n. 2, p. 290–317, 1988. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491688901698>>. Citado na página 43.
- 49 BARANGER, H. U.; MELLO, P. A. Short paths and information theory in quantum chaotic scattering: transport through quantum dots. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 33, n. 6, p. 465, 1996. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0295-5075/33/i=6/a=465>>. Citado na página 43.
- 50 FILHO, G. C. D. *Estatística de contagem de carga e teoria quântica de circuitos em sistemas híbridos metal normal-supercondutor e em cadeia de pontos quânticos*. 173 f. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2010. Citado na página 43.

- 51 EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 47, p. 777–780, May 1935. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.47.777>>. Citado na página 46.
- 52 SCHRÖDINGER, E. Discussion of probability relations between separated systems. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 31, p. 555–563, 10 1935. ISSN 1469-8064. Disponível em: <[http://journals.cambridge.org/article\\_S0305004100013554](http://journals.cambridge.org/article_S0305004100013554)>. Citado na página 46.
- 53 BOKULICH, A.; JAEGER, G. (Ed.). *Philosophy of Quantum Information and Entanglement*. Cambridge University Press, 2010. Cambridge Books Online. ISBN 9780511676550. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511676550>>. Citado na página 47.
- 54 BELL, J. S. On the einstein podolsky rose paradox. *Physics*, v. 1, p. 195–200, 11 1964. Citado na página 47.
- 55 CLAUSER, J. F. et al. Proposed experiment to test local hidden-variable theories. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 23, p. 880–884, Oct 1969. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.23.880>>. Citado na página 47.
- 56 ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental realization of einstein-podolsky-rosen-bohm *Gedankenexperiment* : A new violation of bell's inequalities. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 49, p. 91–94, Jul 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.91>>. Citado na página 47.
- 57 SALART, D. et al. Spacelike separation in a bell test assuming gravitationally induced collapses. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 100, p. 220404, Jun 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.220404>>. Citado na página 47.
- 58 HILL, S.; WOOTTERS, W. K. Entanglement of a pair of quantum bits. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 78, p. 5022–5025, Jun 1997. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.5022>>. Citado 3 vezes nas páginas 47, 48 e 51.
- 59 WIESNER, S. Conjugate coding. *SIGACT News*, ACM, New York, NY, USA, v. 15, n. 1, p. 78–88, jan. 1983. ISSN 0163-5700. Disponível em: <<http://doi.acm.org/10.1145/1008908.1008920>>. Citado na página 47.
- 60 SCHUMACHER, B. Quantum coding. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 51, p. 2738–2747, Apr 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.51.2738>>. Citado na página 47.
- 61 SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*. 1. ed. [S.l.]: Addison Wesley, 1993. Hardcover. ISBN 0201539292. Citado na página 49.
- 62 WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation and concurrence. *Quantum Info. Comput.*, Rinton Press, Incorporated, Paramus, NJ, v. 1, n. 1, p. 27–44, jan. 2001. ISSN 1533-7146. Disponível em: <<http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2011326.2011329>>. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 51.
- 63 BENNETT, C. H. et al. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 53, p. 2046–2052, Apr 1996. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.53.2046>>. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 50.

- 64 WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 80, p. 2245–2248, Mar 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.80.2245>>. Citado na página 52.
- 65 Bennett Charles H.; DiVincenzo David P. Quantum information and computation. *Nature*, v. 404, n. 6775, p. 247–255, mar 2000. ISSN 0028-0836. 10.1038/35005001. Citado na página 52.
- 66 STEANE, A. Quantum computing. *Reports on Progress in Physics*, v. 61, n. 2, p. 117, 1998. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0034-4885/61/i=2/a=002>>. Citado na página 52.
- 67 TITTEL, W. et al. Violation of bell inequalities by photons more than 10 km apart. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 81, p. 3563–3566, Oct 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.3563>>. Citado na página 52.
- 68 GISIN, N. et al. Quantum cryptography. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 74, p. 145–195, Mar 2002. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.145>>. Citado na página 52.
- 69 SAMUELSSON, P.; SUKHORUKOV, E. V.; BÜTTIKER, M. Orbital entanglement and violation of bell inequalities in mesoscopic conductors. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 91, p. 157002, Oct 2003. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.157002>>. Citado na página 52.
- 70 BURKARD, G. Spin-entangled electrons in solid-state systems. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 19, n. 23, p. 233202, 2007. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/19/i=23/a=233202>>. Citado na página 52.
- 71 BEENAKKER, C. W. J. et al. Proposal for production and detection of entangled electron-hole pairs in a degenerate electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 91, p. 147901, Oct 2003. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.147901>>. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 53.
- 72 GOPAR, V. A.; FRUSTAGLIA, D. Statistics of orbital entanglement production in quantum-chaotic dots. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 77, p. 153403, Apr 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.153403>>. Citado na página 52.
- 73 ALMEIDA, F. A. G.; SOUZA, A. M. C. Statistics of orbital entanglement production in a chaotic quantum dot with nonideal contacts. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 82, p. 115422, Sep 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.115422>>. Citado 3 vezes nas páginas 52, 54 e 55.
- 74 VILLAMAINA, D.; VIVO, P. Entanglement production in nonideal cavities and optimal opacity. *Phys. Rev. B*, v. 88, p. 041301, 2013. Citado na página 52.
- 75 RODRÍGUEZ-PÉREZ, S.; NOVAES, M. Geometric constraints for orbital entanglement production in normal conductors. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 85, p. 205414, May 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.205414>>. Citado 4 vezes nas páginas 52, 53, 54 e 61.
- 76 ZYCZKOWSKI, K.; KUS, M. Random unitary matrices. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 27, n. 12, p. 4235, 1994. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/27/i=12/a=028>>. Citado na página 55.

77 ALMEIDA, F. A. G.; RODRÍGUEZ-PÉREZ, S.; MACÊDO, A. M. S. Distribution of charge cumulants of a chaotic quantum dot with nonideal contacts. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 80, p. 125320, Sep 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.125320>>. Citado na página 61.

## Apêndices

## A | Unitariedade da matriz $\mathbb{S}$

A matriz de espalhamento satisfaz a relação

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} = \mathbb{S} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

em que

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} {}^1\tau_1 & {}^1\tau_2 \\ {}^2\tau_1 & {}^2\tau_2 \end{pmatrix}$$

é a matriz de espalhamento de um guia de ondas com dois guias. Os vetores  $\mathbf{a}_i$  e  $\mathbf{b}_i$  possuem as amplitudes das ondas de entrada e saída do guia  $i$ , respectivamente.

Pela conservação do fluxo de probabilidade, é necessário que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^\dagger & \mathbf{b}_2^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^\dagger & \mathbf{a}_2^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Aplicando-se a hermitiana na equação (A.1) resulta em

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^\dagger & \mathbf{b}_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^\dagger & \mathbf{a}_2^\dagger \end{pmatrix} \mathbb{S}^\dagger, \quad (\text{A.3})$$

em que foi utilizada a propriedade  $(\mathcal{A}\mathcal{B})^\dagger = \mathcal{B}^\dagger\mathcal{A}^\dagger$ . Das equações (A.1) e (A.3), obém-se:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^\dagger & \mathbf{b}_2^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^\dagger & \mathbf{a}_2^\dagger \end{pmatrix} \mathbb{S}^\dagger \mathbb{S} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix},$$

que, comparando com a equação (A.2), só é possível quando  $\mathbb{S}^\dagger \mathbb{S} = \mathbf{1}$ .

O desenvolvimento acima pode ser generalizado para um sistema com uma quantidade qualquer de guias e canais de forma análoga. Para isso, se  $M$  é o número de guias, basta apenas fazer a substituição

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \rightarrow \mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_M \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} \rightarrow \mathcal{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_M \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$