

# Distribuições de Probabilidade da Condutância em Pontos Quânticos com Contatos não Ideais

(Conductance Probability Distributions of Quantum Dots with non-Ideal Contacts)

André L. Passos e Andre M. C. Souza

*Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe 49100-00 – São Cristóvão, SE, Brasil*

*alpassos@fisica.ufs.br*

*(Recebido em 12 de agosto de 2005; aceito em 26 de agosto de 2005)*

---

Pontos quânticos são nanoestruturas que consistem em cavidades com dinâmica classicamente caótica, ligadas a reservatórios de elétrons por meio de guias de onda semi-infinitas. Podemos classificar os sistemas em classes de universalidade devido à presença ou não de certas simetrias (reversão temporal, rotação de spin), onde as propriedades de muitos sistemas diferentes são descritas por leis universais. Neste trabalho é estudado o efeito da quebra de simetria de reversão temporal sobre a distribuição de probabilidade da condutância em função da transparência da barreira de tunelamento que acopla um ponto quântico a duas guias de onda com um canal de espalhamento. As distribuições foram encontradas numericamente para valores diferentes do parâmetro de quebra de simetria empregando a teoria de matrizes aleatórias.

Palavras-chave: teoria de matrizes aleatórias, pontos quânticos.

Quantum dots are nanostructures consisting of cavities with classically chaotic dynamics, attached to electron reservoirs by semi-infinite wave guides. We can classify the systems in universality classes due to the presence or not of certain symmetries (time-reversal, spin rotation), where the properties of many different systems are described by universal laws. In this work we study the effect of breaking of time-reversal symmetry in the conductance distribution probability as a function of the tunneling barrier transparency attaching the quantum dot to two wave guides with one scattering channel. The distributions were found numerically for different values of the symmetry breaking parameter using the random matrix theory.

Key words: random matrix theory, quantum dots.

---

## 1. INTRODUÇÃO

A partir da última década de 80 tornou-se possível a construção de dispositivos suficientemente pequenos e livres de impurezas de modo que, para baixas temperaturas ( $< 1\text{K}$ ) e baixas densidades eletrônicas, o comprimento de coerência de fase do elétron excede a dimensão do sistema, o que assegura o caráter balístico que é caracterizado pelo espalhamento elástico no contorno da cavidade, dando origem a efeitos não observados em dispositivos macroscópicos. Esses sistemas, conhecidos como pontos quânticos, são construídos formando um gás de elétrons bidimensional na interface de uma heteroestrutura. Através de contatos metálicos aplica-se uma diferença de potencial  $V$  e a condutância é obtida a partir da expressão  $G = \lim_{V \rightarrow 0} (I / V)$ , onde  $I$  é a corrente elétrica. Esses sistemas podem ser descritos pela Teoria de Matrizes Aleatórias, e de acordo com a presença ou não de certas simetrias intrínsecas (simetria de reversão temporal ou rotação de spin) podem ser classificados em classes de universalidades. O comportamento das variáveis de transporte quando o sistema é sujeito a uma quebra de simetria é um assunto que tem atraído muito interesse. Neste trabalho são estudadas as distribuições de probabilidade da condutância em pontos quânticos balísticos em função do parâmetro de quebra de simetria de reversão temporal e da transparência da barreira de contato entre as guias com o ponto. Na seção 2 é feita uma introdução sobre a teoria de matrizes aleatórias. Na seção 3 apresentamos a teoria do transporte em pontos quânticos balísticos. Nossos resultados são apresentados na seção 4 e a conclusão na seção 5.

## 2. TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS

A Teoria de Matrizes Aleatórias foi originalmente proposta em meados do século XX por Wigner motivado pelos resultados experimentais dos espectros de ressonância de nêutrons lentos espalhados por núcleos pesados. Wigner propôs que o comportamento estatístico local de uma seqüência de níveis de energias de um núcleo pesado é idêntico ao de autovalores de uma matriz aleatória. Devido à complexidade do Hamiltoniano do mesmo, Wigner propôs que os detalhes das interações não são relevantes, e que o mesmo pode ser descrito por uma matriz  $H$  cujos elementos são escolhidos aleatoriamente, a qual deve ser hermiteana visto que seus autovalores devem reais [1,2]. Essa é certamente a simplificação mais radical possível. Para sistemas reais a ordem da matriz  $H$  é infinita, logo devemos truncá-la em uma ordem finita  $N$ . Os elementos da matriz não são completamente aleatórios, devendo primeiramente obedecer as restrições das *classes de universalidade* que estão relacionadas com as simetrias do sistema. Para sistemas sem simetria de reversão temporal (campo magnético aplicado) a matriz  $H$  é unitária e seus elementos complexos. Em sistemas com simetria de reversão temporal temos dois casos: se a interação spin-órbita é desprezada, a matriz  $H$  é ortogonal com os seus autovalores reais e simétricos, senão, é simplética e seus elementos quatérnions reais.

Wigner e Dyson estudaram um ensemble de matrizes hermiteanas de ordem  $N \times N$  com distribuição de probabilidade da forma

$$P(H) = c \exp[-\beta V(H)],$$

com  $c$  sendo uma constante de normalização e  $\beta$  o número de graus de liberdade dos elementos da matriz que pode ser 1, 2 ou 4. Se  $V(H) \propto H^2$ , o ensemble é chamado gaussiano, e os elementos de  $H$  são não correlacionados devido a  $\text{Tr} H^2 = \text{Tr} H H^+ = \sum_{ij} |H_{ij}|^2$ . Dada a transformação  $H \rightarrow U H U^{-1}$ , com  $U$  uma matriz ortogonal ( $\beta = 1$ ), unitária ( $\beta = 2$ ) ou simplética ( $\beta = 4$ ),  $P(H)$  é invariante e o ensemble é chamado Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE), Unitário (GUE) ou Simplético (GSE) respectivamente. Isso é devido à probabilidade do traço  $\text{Tr}(U H U^{-1}) = \text{Tr}(H U U^{-1}) = \text{Tr}(H)$ .

Foi proposta por Wigner uma análise da distribuição de espaçamentos, isto é, a diferença entre dois valores de energia consecutivos. Ele notou que a distribuição de probabilidade de espaçamento das energias para sistemas caóticos é pequena para valores de espaçamentos pequenos, o que não acontece em sistemas não caóticos, em que a distribuição é de Poisson, caracterizada pela maior probabilidade para espaçamentos pequenos. Essa é uma propriedade do espectro de sistemas caóticos e é chamada de *repulsão de níveis*, que é a tendência de dois níveis de energia se repelirem. Bohigas, Giannoni e Schmit [3] conjecturaram que essa propriedade se estende para o espectro de qualquer sistema caótico e pode ser explicado a partir da teoria de matrizes aleatórias. A curva chamada de “chute de Wigner” que é a distribuição de probabilidade de espaçamentos dos autovalores de uma matriz aleatória de ordem  $2 \times 2$ , e é dada por

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left[-\frac{\pi}{4} s^2\right]. \quad (1)$$

## 3. TRANSPORTE QUÂNTICO

O ponto quântico é ligado a reservatórios doadores e receptores de elétrons através de guias de onda semi-infinitas. Cada guia é caracterizada por possuir  $M_l$  modos transversais devido à largura finita da guia e à impenetrabilidade das paredes da mesma. Considere um ponto quântico com  $L$  guias. Seja  $\mathbf{a}$  o vetor contendo as amplitudes de onda que entram no ponto, com seus elementos  $\mathbf{a}^{(l)} = (a_1^{(l)}, \dots, a_{M_l}^{(l)})^T$  contendo as amplitudes de onda dos  $M_l$  modos da guia  $l$  ( $l = 1, \dots, L$ ), e  $\mathbf{b}$  o vetor, definido da mesma forma, com as amplitudes de onda que saem do ponto. Da teoria de espalhamento,

$$\mathbf{b} = \mathbf{S} \mathbf{a}, \quad (2)$$

onde  $S$  é chamada de matriz espalhamento, que pode ser escrita na representação de blocos

$$S = \begin{pmatrix} r_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1L} \\ t_{21} & r_{22} & \cdots & t_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{L1} & t_{L2} & \cdots & t_{LL} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

com  $r_{ll}$  uma matriz  $M_l \times M_l$ , contendo as amplitudes dos  $M_l$  canais da guia  $l$  refletidas para a mesma guia;  $t_{lm}$  uma matriz  $M_l \times M_m$  contendo as amplitudes de transmissão dos  $M_m$  canais da guia  $m$  para os  $M_l$  canais da guia  $l$ . Portanto a matriz  $S$  é uma matriz quadrada de ordem  $M = \sum_{l=1}^L M_l$ .

A matriz de espalhamento de um ponto quântico balístico é definida pela fórmula de Mahaux-Weidenmüller[4]

$$S = 1 - 2iW^\dagger (E_F - H - iWW^\dagger)^{-1}W \quad (4)$$

sendo  $E_F$  a energia de Fermi,  $H$  uma matriz aleatória de ordem  $N$  ( $N \rightarrow \infty$ ), e  $W$  uma matriz retangular de ordem  $N \times M$  (que descreve o acoplamento do  $N$  estados do ponto quântico com os  $M$  estados das guias de onda). Para um fluxo unitário temos devemos ter  $SS^\dagger = 1$ , que na ausência de outras simetrias é a única restrição para  $S$ .

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (5)$$

com  $r$  e  $r'$  sendo matrizes de reflexão e  $t$  e  $t'$  matrizes de transferência. A conservação da corrente implica que as matrizes  $tt^\dagger$ ,  $t't'^\dagger$ ,  $1 - rr^\dagger$  e  $1 - r'r'^\dagger$  têm os mesmos autovalores de transmissão  $T_n$ . Na teoria de espalhamento, os autovalores de transmissão podem ser usados para calcular as variáveis de transporte. A condutância  $G$  é definida pela fórmula de Landauer-Büttiker

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(tt^\dagger) = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n, \quad (6)$$

Definimos aqui a condutância adimensional  $g = \sum_n T_n$ , assim, da Eq. (6),  $G = (2e^2/h)g$ . Devido a  $H$  ser aleatória, deve-se esperar a existência de uma distribuição de probabilidade para  $d(g)$  para a condutância que deve estar de acordo com as simetrias do Hamiltoniano  $H$  e são classificadas pela presença ou não das simetrias de reversão temporal e rotação de spin.

#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Seja o hamiltoniano aleatório da forma  $H = H^{(0)} + iH^{(1)}$ , com a distribuição de probabilidade

$$d(H) = C_N \exp \left[ -\frac{N}{4\lambda^2} \text{Tr}(H^2) \right]. \quad (7)$$

A transição do Ensemble Gaussiano Ortogonal para o Unitário é feita ajustando as variâncias

$$\begin{aligned} \langle (H_{ii}^{(0)}) \rangle &= 2(1 + e^{-2\tau})/N \\ \langle (H_{ij}^{(0)}) \rangle &= 2(1 + e^{-2\tau})/(2N), i \neq j \\ \langle (H_{ij}^{(1)}) \rangle &= 2(1 - e^{-2\tau})/(2N), i \neq j \end{aligned} \tag{8}$$

na qual  $\tau$  é chamado de parâmetro de quebra de simetria e produz uma transição gradual de uma classe a outra (para  $\tau = 0$  para o  $H$  é ortogonal e  $\tau \rightarrow \infty$   $H$  é unitária)[4]. Por conveniência defini-se o parâmetro  $alfa = [\tanh(\tau)]^{1/2}$  de forma que o parâmetro que controla a transição permanece no intervalo  $0 \leq alfa \leq 1$  (para  $alfa = 0$  para o GOE e  $alfa = 1$  para o GUE).

Foi calculada a distribuição de probabilidade de condutância  $d(g)$  para valores diferentes da transparência da barreira de tunelamento  $T$  do contato da guia com um ponto quântico com duas guias de onda cada qual com um canal. Na figura 1 é mostrada a distribuição de probabilidade da condutância para transparência da barreira  $T = 1$ .

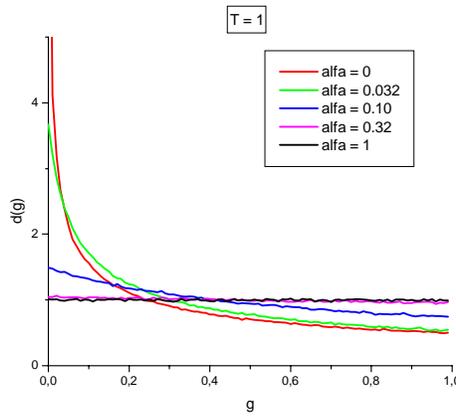


Figura 1: Distribuição de probabilidade de condutância de um ponto quântico com duas guias e um canal cada para o valor da transparência  $T = 1$ .

Na figura 2 são representadas as distribuições de probabilidade da condutância para dois valores diferentes de  $T$ . Observa-se que à medida que  $T$  decresce há um aumento da probabilidade para valores menores de condutância, e conseqüentemente uma diminuição da probabilidade de valores maiores.

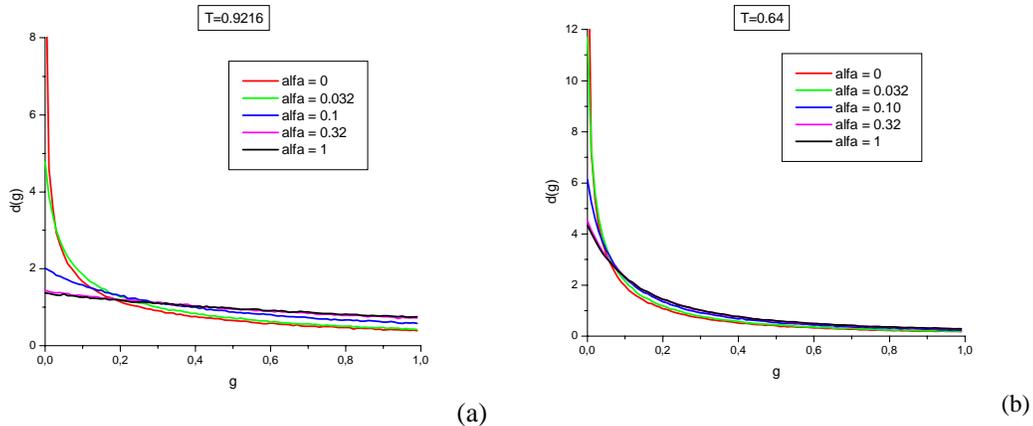


Figura 2: Distribuição de probabilidade de condutância de um ponto quântico com duas guias e um canal cada para o valor da transparência (a)  $T = 0.9216$  e (b)  $T = 0.64$ .

Na figura 3 temos os valores do valor médio  $\langle g \rangle$  e o valor médio quadrático  $\langle g^2 \rangle$  da condutância para valores diferentes da transparência do contato  $T$ . Foi observado que o valor médio da condutância pode ser aproximado por um polinômio do segundo grau e seu valor médio quadrático por um polinômio do terceiro grau, em que seus coeficientes são indicados na tabela da figura 2. Foi observada uma concordância para o valor limite  $\alpha = 1$  que é  $\langle g \rangle = (T/6)(2 + T)$  e  $\langle g^2 \rangle = (T/15)(2 + T + 2T^2)$ .

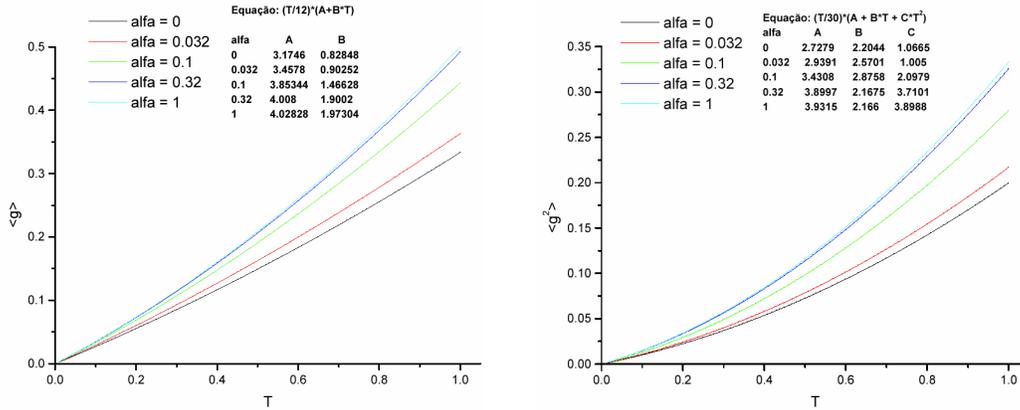


Figura 3: Gráfico do valor médio e do valor médio quadrático da condutância em função da transparência de contato.

## 5. CONCLUSÃO

Através da análise dos resultados numéricos foi verificada a concordância com a teoria nos casos dos valores limites GOE e GUE, respectivamente. Como perspectiva fica o estudo das expressões analíticas para a condutância em função da transparência da barreira de tunelamento dos contatos e do parâmetro de quebra de simetria.

## 6. AGRADECIMENTOS

Agradecemos às agências CAPES e FAP-SE pelo apoio financeiro.

- 
- METHA, M. L. *Random Matrices*, second edition: Academic New York, 1991.
  - STÖCKMANN, H. J. *Quantum Chaos, an Introduction*. Cambridge University Press, 1999.
  - BOHIGAS, O., GIANNONI, M. J., Schmit, C. *Phys. Rev. Lett.* 52: 1, 1984.
  - SOUZA, A. M. C., MACÊDO A. M. S. *Physica A*, 344: 677-684, 2004.
  - BEENAKKER, C. W. J. *Random-Matrix Theory of Quantum Transport*. e-print cond-mat/9612179, 1996.
  - MELLO, P. A., BARANGER, H.U. *Interference Phenomena in Electronic Transport Through Chaotic Cavities: An Information-Theoretic Approach*. e-print cond-mat/9812225, 1998.
  - MELLO, P. A. *Theory of Random Matrices*, Miniworkshop on Nonlinearity: Trieste, 1993.