

# Caos e Interações em Pontos Quânticos

Eduardo R. Mucciolo\*

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica  
C.P. 38071, 22452-9070, Rio de Janeiro, RJ, Brasil*

26 de Julho, 2000

## 1 Introdução

Nestas notas de aula procurarei discorrer brevemente a respeito de alguns aspectos da física básica de uma classe de sistemas denominados pontos quânticos [1]. Tenho em mente aqueles sistemas nos quais elétrons residentes em um plano ou interface são confinados lateralmente e de forma controlável, seja através de eletrodos metálicos ou por outro artifício equivalente. Estes sistemas têm uma série de características que os tornam relevantes para o estudo de transporte coerente e outras propriedades eletrônicas a baixas temperaturas. Em particular, eles têm sido um ótimo laboratório para estudos de caos, interações elétron-elétron e suas interrelações. Do ponto de vista aplicado, cogita-se também a possibilidade deles virem a integrar componentes e circuitos eletrônicos em computadores convencionais. São também vistos como peças fundamentais nos chamados computadores quânticos, apesar destes parecerem algo ainda distante no futuro.

O desenvolvimento destas notas segue a seguinte lógica. Vamos tentar primeiramente inserir os pontos quânticos numa classe maior de sistemas denominados mesoscópicos. Veremos que estes se caracterizam pela manutenção da coerência de fase do movimento eletrônico por toda a amostra. Analisando escalas de comprimento e tempo características desse movimento, veremos que há espaço para regimes para a ocorrência de caos hamiltoniano e suas manifestações quânticas, dependendo do tipo de potencial de confinamento utilizado ou do grau de desordem da amostra. A partir daí, analisaremos alguns resultados experimentais obtidos em pontos quânticos no chamado regime de bloqueio coulombiano. As flutuações estatísticas dos picos de condutância serão interpretadas à luz do chamado modelo ortodoxo, o qual só leva em conta interações em termos da carga total. Desvios de comportamento serão relacionados então à existência de correlações eletrônicas.

## 2 Sistemas mesoscópicos: caos e universalidade

Um pedaço de metal à temperatura ambiente conduz eletricidade muito bem. Sabemos que essa propriedade está relacionado à disponibilidade de estados eletrônicos vazios no nível de Fermi. Mas só isso não basta. A facilidade com que elétrons se movem se deve também ao fato dos estados vazios serem do tipo de Bloch, estendidos. Esses estados são fruto da periodicidade da rede cristalina e da natureza ondulatória dos elétrons. Note que o problema clássico análogo, a injeção de uma partícula numa potencial periódico, não leva necessariamente ao mesmo resultado: a probabilidade da partícula ser ejetada do lado oposto tende a zero.

---

\*mucciolo@fis.puc-rio.br

O segredo da boa condutância dos metais está associada à coerência de fase mantida pelo elétron. Ao aumentarmos a temperatura, porém, podemos ir aos poucos destruindo essa coerência, essencialmente devido ao aparecimento de processos irreversíveis do tipo espalhamentos inelásticos (elétron-fônon, por exemplo). Assim, se a curtas distâncias o elétron mantém um comportamento ondulatório ao enxergar a estrutura cristalina periódica, o mesmo não ocorre a grandes distâncias. Essa é a principal razão pela qual não se observa efeitos de interferência em propriedades de transporte de amostras “macroscópicas” à temperatura ambiente.

Por outro lado, se passarmos a olhar para amostras menores e a temperaturas mais baixas, eventualmente podemos chegar a uma situação em que o elétron consegue manter um razoável padrão de coerência ao transitar de um lado a outro da amostra. Sistemas em que isso acontece são chamados de mesoscópicos [2,3,4]. Note que esse termo tem sido intensamente usado na literatura e, na maioria das vezes, de forma enganosa. Muitas vezes o simples fato de um sistema ser “pequeno” leva as pessoas a chamá-lo de mesoscópico. É preferível usar tal terminologia somente para situações em que se

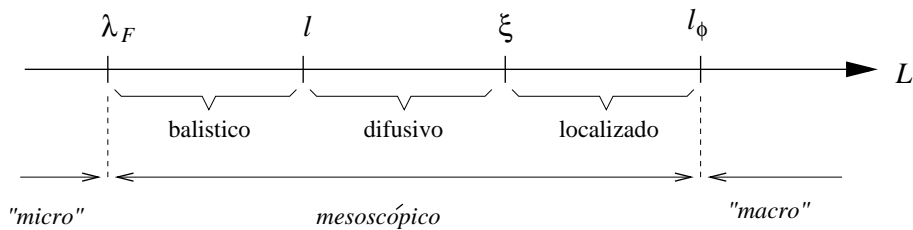
$$L < l_\phi, \quad (1)$$

onde  $L$  é um comprimento linear típico do sistema e  $l_\phi = l_\phi(T)$  é a distância média que um elétron deve percorrer para que sua fase se degrade de  $2\pi$ . Em geral,  $l_\phi(T) \sim T^{-p}$ , sendo que o parâmetro  $p$  depende do tipo de mecanismo inelástico e da faixa de temperatura. Fônons, acoplamento com o banho eletromagnético formado pelo gás de elétrons, interação com radiação externa e impurezas magnéticas são as principais fontes de decoerência que um elétron encontra em sistemas de estado sólido. Note que a decoerência vem essencialmente da irreversibilidade desses processos de interação.

Outra idéia errônea freqüente é pensar que desordem, imperfeições na rede cristalina e impurezas comuns são fontes de incoerência eletrônica. Desde que esses graus de liberdade sejam lentos em relação ao movimento do elétron, eles só causarão espalhamentos elásticos e portanto afetarão a dinâmica eletrônica de forma inteiramente reversível. O papel da desordem é equivalente ao dos ions dispostos periódicamente: ela cria um potencial de fundo. A diferença está em que enquanto a rede cristalina preserva momento de Bloch,  $\vec{k}$ , em módulo, direção e sentido (a menos de um vetor de rede recíproco), a desordem relaxa a direção de  $\vec{k}$  depois de percorrida uma distância  $l$  (chamado de livre caminho médio). O movimento eletrônico continua sendo coerente, mas deixa de ser balístico e passa a ser difusivo.

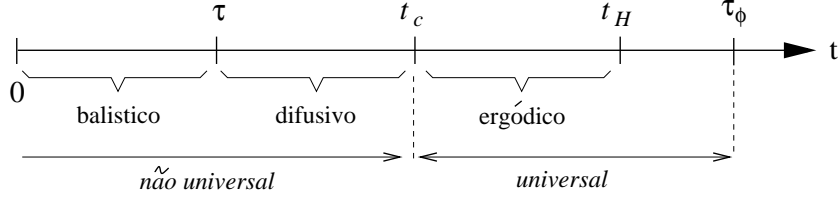
Se a desordem porém for muito forte, pode ocorrer o fenômeno quântico de localização. As ondas multiplamente espalhadas pelas impurezas podem interferir de modo a formar um pacote exponencialmente localizado em algum ponto da amostra. Chama-se de comprimento de localização  $\xi$  ao tamanho linear desse pacote.

Em geral, podemos então caracterizar os diferentes regimes numa amostra mesoscópica da seguinte maneira:



onde  $\lambda_F$  é o comprimento de onda do elétron. Vale reforçar que, dependendo da temperatura e das condições da amostra,  $l_\phi$  pode estar em qualquer posição em relação às outras escalas.

Vamos supor então que uma certa amostra mesoscópica é preparada de forma que  $\xi \gg L$ . Podemos também analisar a dinâmica eletrônica nesse sistema do ponto-de-vista das escalas de tempo. Ao prepararmos um pacote bastante fino e inicialmente localizado num ponto central e em seguida acompanhar a sua evolução temporal, poderemos distinguir quatro regimes, como mostrado na figura abaixo.



Inicialmente o pacote se expande balisticamente, ou seja, sua largura  $\delta r$  aumenta linearmente com o tempo. Quanto  $t > \tau$ , começa a haver espalhamento pelas impurezas e o pacote se alarga de maneira difusiva ( $\delta r = \sqrt{Dt}$ , onde  $D$  é a constante de difusão). Existe porém uma instante de tempo chamado de tempo de Thouless,  $\tau_c = \sqrt{D/L^2}$ , quando o pacote atinge as fronteiras do sistema. A partir desse momento, o pacote encontra-se espalhado por toda a amostra. Classicamente, toda a porção do espaço de fase permitida foi visitada e o sistema encontra-se no limite ergódico. Prosseguindo a evolução do pacote, chega-se até o tempo de Heisenberg,  $t_H = \hbar/\Delta$ , a partir do qual é possível resolver níveis discretos de energia ( $\Delta$  denota o espaçamento médio dos níveis).

Vamos passar agora a nossa análise para intervalos de energia lançando mão do princípio de incerteza de Heisenberg  $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ . Quando a dinâmica do sistema é do tipo caótica no limite clássico<sup>1</sup>, há uma notável diferença de comportamento estatístico entre os intervalos  $\Delta E > E_c$  (tempos curtos) e  $\Delta E < E_c$  (tempos longos), onde  $E_c = \hbar/\tau_c$  é chamada de energia de Thouless. Enquanto que para conjuntos de autoestados dentro de uma faixa de largura  $\Delta E > E_c$  as flutuações espectrais (níveis de energia e funções de onda) dependem fortemente das peculiaridades do sistema, o mesmo não ocorre para  $\Delta E < E_c$ . É durante o regime ergódico que as flutuações manifestam um elevado grau de universalidade, sendo iguais, a menos de fatores de escala, para os mais diferentes tipos de sistemas [5]. Não existe uma prova matemática para tal afirmação, mas as evidências experimentais e numéricas a seu favor são fortíssimas. Passando de núcleos atômicos ao átomo de hidrogênio num campo magnético intenso, até estrutura de bandas do Si e sistemas de muitos corpos, muitos sistemas manifestam uma estatística espectral universal.

A teoria que descreve as distribuições e funções de correlação universais é denominada Teoria das Matrizes Aleatórias (TMA) [6]. Ela foi criada por Wigner e posteriormente elaborada por outros autores na busca de uma descrição estatística para o grande número de ressonâncias observadas em certos tipos de reações nucleares. Fazendo uma descrição bastante sucintamente de sua versão mais simples [7], podemos dizer que ela supõe a existência de uma distribuição gaussiana de probabilidade

$$P(\hat{H}) \propto \exp\left(-\frac{N}{2\lambda^2} \text{Tr} \hat{H}^2\right), \quad (2)$$

onde  $\hat{H}$  representa a matriz hamiltoniana do sistema de ordem  $N$  (ou seja, o operador hamiltoniano descrito numa certa base truncada de tamanho  $N$ ) e  $\lambda$  é um parâmetro. Dependendo das simetrias existentes, há três possibilidades para  $\hat{H}$ : real simétrica (quando há simetrias de reversão temporal e rotação); quaternária (quando há simetria de reversão temporal, mas não

<sup>1</sup>Vamos tomar como sistema caótico aquele no qual duas trajetórias com condições iniciais infinitesimalmente próximas podem se afastar exponencialmente num intervalo de tempo finito.

de rotação); hermitiana (quando não há simetria de reversão temporal). Cada uma dessas possibilidades é caracterizada por um tipo de ensemble: ortogonal, simplético e unitário, respectivamente.

Há três características fundamentais nas flutuações espectrais obtidas pela TMA. Primeiro, níveis se repelem entre si: a probabilidade de se encontrar dois níveis vizinhos num pequeno intervalo  $s$  é proporcional a  $s^\beta$ , onde  $\beta = 1, 2, 4$  para os ensembles ortogonal, unitário e simplético, respectivamente. Segundo, a variância do número de níveis de energia contidos num intervalo de largura  $E$  vai com  $\ln(E/\Delta)$ , indicando uma certa rigidez espectral (em contraste, níveis descorrelacionados fornecem um crescimento linear). Finalmente, quando  $N \rightarrow \infty$ , as amplitudes de autofunções calculadas em um ponto fixo do espaço são distribuídas gaussianamente. Essas três previsões quantitativas estão formam o cerne do comportamento universal de várias propriedades quânticas de sistemas classicamente caóticos e têm um papel importante no entendimento das propriedades de transporte em pontos quânticos, como discutiremos a seguir. Note que o único elemento não universal na TMA é o parâmetro  $\lambda$ , que deve ser ajustado em função da densidade de estados do sistema com o qual se quer fazer a comparação.

### 3 Pontos quânticos no regime coulombiano

Para atingir o limite mesoscópico em sistemas eletrônicos é preciso fazê-los pequenos. Os primeiros experimentos onde se observou efeitos de interferência em transporte remontam o final da década de 70 e início dos 80 e utilizavam metais na forma de anéis, fitas e cilindros depositados em substratos isolantes. A densidade de elétrons de condução é alta em metais e  $\lambda_F$  é bastante pequeno ( $\sim 1\text{Å}$ ). O mesmo ocorre com  $l$ , pois metais tendem a apresentar muitos defeitos cristalinos e impurezas. Portanto, sistemas metálicos são em geral bastante desordenados e é difícil variar *in situ* tanto a densidade de elétrons quanto o seu confinamento.

A situação melhora com o uso da tecnologia do MOSFET de Si [1]. Nesses sistemas forma-se uma gás eletrônico bidimensional (GEB) na interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  e a densidade pode ser controlada através de um eletrodo metálico disposto atrás da camada de óxido. Se por um lado o confinamento transversal se dá pelo rebaixamento das bandas de valência e condução do Si, o confinamento lateral pode ser feito por uma modulação do potencial aplicado no eletrodo. Contudo, dado que o óxido e o seu semiconductor têm estruturas cristalinas diferentes, há uma grau bastante grande de desordem na interface. Si-MOSFET em geral não fornecem livres caminhos médios maiores do que  $1\mu\text{m}$ .

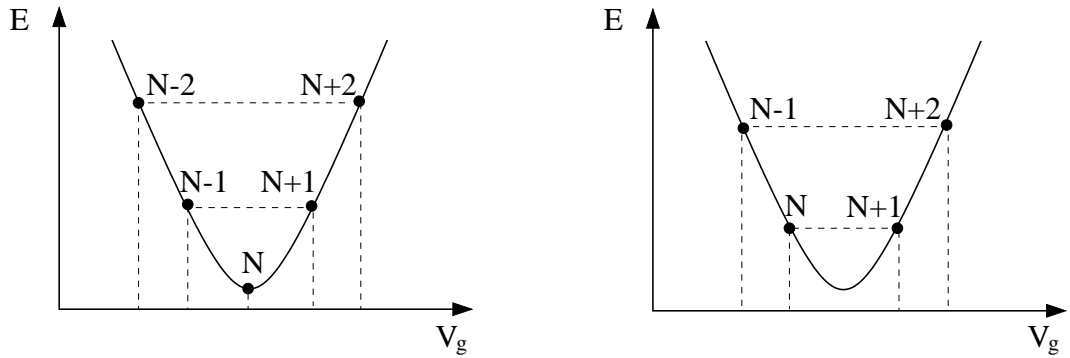
A tecnologia que parece ter vencido todos os problemas é a das heteroestruturas de GaAs [1]. A interface  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  captura elétrons fornecidos por doadores distantes, formando um GEB. Como GaAs e AlAs têm estruturas cristalinas semelhantes e parâmetros de rede próximos, o grau de desordem é muito inferior ao do Si-MOSFET. Chega-se ao recorde de  $l = 160\mu\text{m}$ ! A densidade eletrônica é controlada pelo número de impurezas doadores. O confinamento lateral dos elétrons também se dá através da aplicação de tensão reversa (repulsiva) em eletrodos metálicos posicionados acima do GEB. A tecnologia litográfica atual permite a desenho de eletrodos com resolução em torno de  $50\text{nm}$ . Com isso, abriu-se a possibilidade de se definir o tipo de potencial de confinamento – caótico ou regular – e estudar as manifestações quânticas dessa diferença em propriedades de transporte [8]. Para heteroestruturas, estima-se que o comprimento de coerência sobe para valores acima de  $10\mu\text{m}$  quando a temperatura cai abaixo de  $1\text{K}$ . Há portanto bastante espaço para se criar dispositivos coerentes. Independentemente, vale salientar que a tecnologia em GaAs/AlAs teve e continua tendo muitas aplicações na fabricação de dispositivos eletrônicos e ópticos além dos pontos quânticos aqui descritos.

Vamos agora nos concentrar num fenômeno que não é único a pontos quânticos de GaAs,

mas que encontra sua mais clara realização experimental nesses dispositivos [1]. Considere um ponto quântico (PQ) onde o contato direto entre a ilha de elétrons no seu interior e o restante do GEB é impedido por fortes barreiras de potencial eletrostático (provenientes da tensão reversa aplicada aos eletrodos). Neste caso, os potenciais químicos dentro e fora do PQ estarão abaixo do topo das barreiras de potencial. O transporte eletrônico através do PQ só poderá ocorrer via tunelamento. Ainda assim, há um impecilho adicional devido à energia coulombiana. Para introduzir mais um elétron no sistema, é necessário “pagar” um quantidade de energia  $U_c = e^2/C$ , onde  $C$  é a capacitância do PQ. Quanto menor for o PQ, menor será a capacitância e tanto maior será  $U_c$ . Essa energia de carregamento pode ser muito maior do que  $\Delta$ . Para temperaturas  $T > U_c/k_B$ , a entropia faz com que o número de elétrons no PQ,  $N = Q/e$ , varie de acordo com as flutuações térmicas ( $Q$  denota a carga total do PQ). Contudo, a baixas temperaturas,  $N$  passa a ser extremamente bem definido. Esquecendo momentaneamente a natureza quântica do problema, vamos escrever a energia eletrostática total (clássica) do sistema:

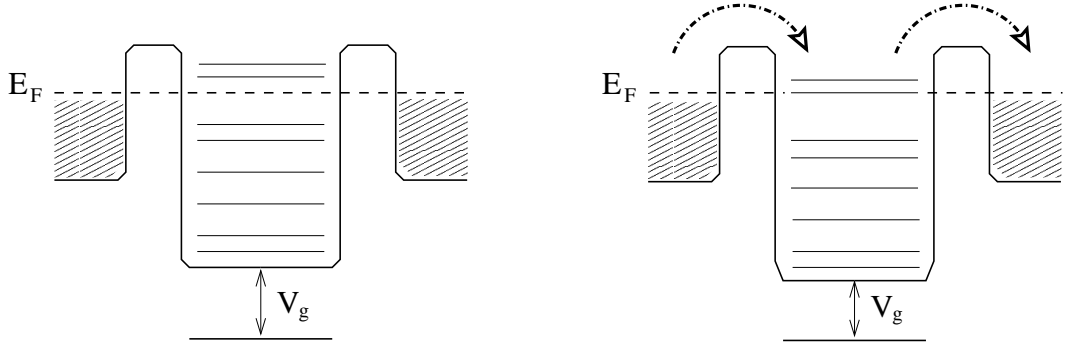
$$E(N, V_g) = \frac{e^2}{2C}N(N-1) - eNV_g, \quad (3)$$

onde  $V_g$  representa a tensão aplicada a um eletrodo (ou a um conjunto deles). Como o sistema busca a configuração de energia total mínima, há duas situações extremas possíveis, dependendo da tensão aplicada (ver figura abaixo).



Quando o mínimo de energia ocorre para um valor único de  $N$ , a barreira coulombiana impede a troca de elétrons entre o PQ e o GEB externo. Porém, quando o mínimo de energia é degenerado, o número de elétrons no PQ deixa de ser fixo e pode flutuar. Nessas condições, o transporte de carga através do PQ é classicamente permitido.

Incorporando agora as barreiras de potencial e a discretização dos estados de energia dentro do PQ à nossa descrição, vamos negligenciar momentaneamente a energia coulombiana. Agora a situação pode ser graficamente representada como na figura abaixo.



O tensão  $V_g$  atua como potencial de fundo, puxando ou empurrando os níveis de energia dentro do PQ. Toda vez que ela atinge um valor tal que o potencial químico dentro do PQ se iguala ao potencial químico no GEB (ou seja, a energia de Fermi  $E_F$  é igual a uma dada autoenergia do PQ), ocorre transporte através do PQ via tunelamento ressonante.

As duas descrições podem ser incorporadas numa única e que passou a ser conhecida como modelo ortodoxo do bloqueio coulombiano [9]. A hamiltoniana global do sistema é escrita na forma

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_n \varepsilon_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + \frac{e^2}{2C} \hat{N} (\hat{N} - 1) - eV_g \hat{N} + \sum_k \left( \varepsilon_k^R \hat{a}_{R,k}^\dagger \hat{a}_{R,k} + \varepsilon_k^L \hat{a}_{L,k}^\dagger \hat{a}_{L,k} \right) \\ & + \sum_{n,k} \left( \gamma_{n,k}^R \hat{a}_{R,k}^\dagger \hat{c}_n + \gamma_{n,k}^L \hat{a}_{L,k}^\dagger \hat{c}_n + \text{c.c.} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

onde  $\hat{N} = \sum_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n$  é o operador número do PQ e  $R$  e  $L$  denotam contatos à direita e à esquerda, respectivamente. Os níveis de energia do PQ,  $\{\varepsilon_n\}$ , e os acoplamentos  $\{\gamma_{n,k}^{R,L}\}$  dependem fortemente da natureza do potencial de confinamento do PQ. Se supusermos que o potencial de fundo não altera o formato do PQ, a condição de máxima probabilidade de transmissão de elétrons pode ser escrita como

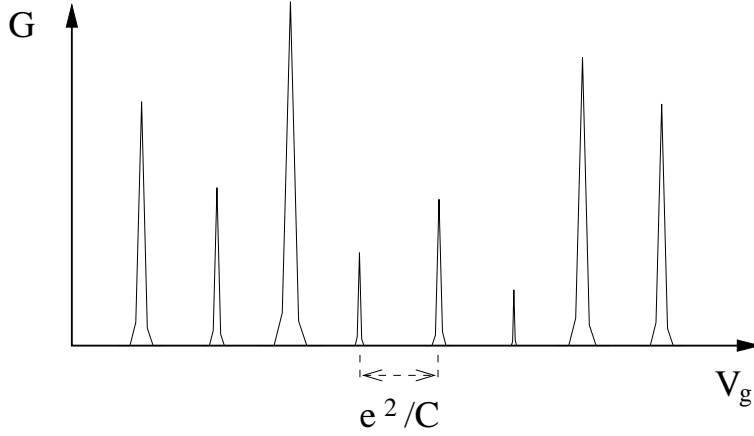
$$E(N) - E(N - 1) = \varepsilon_N + \frac{e^2}{C}(N - 1) - eV_g = E_F, \quad (5)$$

onde  $E(N)$  denota a energia do estado fundamental do PQ com  $N$  elétrons. Note que o lado esquerdo dessa equação representa nada mais do que o potencial químico de um PQ contendo  $N - 1$  elétrons em seu interior. Outro ponto importante é que a cada nova ressonância, o número de elétrons confinados aumenta de uma unidade.

No regime mesoscópico, a probabilidade de transmissão através do PQ está associada à sua condutância linear pela fórmula de Landauer-Büttiker [9],

$$G = \frac{e^2}{h} \text{tr} (\hat{t}^\dagger \hat{t}), \quad (6)$$

onde  $\hat{t}$  representa a matrix de transmissão que conecta os canais propagantes do contato esquerdo aos do contato direito. No caso de haver somente um canal propagante em cada contato (ditos então pontuais), a condutância passa a ser proporcional à probabilidade de transmissão, a qual, por sua vez, depende de  $V_g$ . Assim, conforme se varia a tensão nos eletrodos, observa-se uma seqüência de picos na condutância. No caso de um PQ com um número muito grande de elétrons ( $N \sim 100 - 1000$ ), a situação é esquematicamente mostrada na figura abaixo.



Na maior parte dos arranjos experimentais,  $e^2/C \gg \Delta$ . A energia de carga domina o espaçamento entre picos e portanto eles são aproximadamente equidistantes. Além disso, quando  $k_B T \ll e^2/C$ , a largura dos picos é dominada pelo arredondamento da superfície de Fermi nos contatos e depende exclusivamente da temperatura. Contudo, as alturas dos picos apresentam grandes flutuações. Como entender isso? Em primeiro lugar, não é difícil mostrar a partir da Eq. (6) que a altura de um pico de condutância no regime em questão ( $\Delta \ll k_B T$ ) pode ser escrita na forma

$$G_{\max}(N) = \frac{e^2}{h} \frac{1}{4k_B T} \frac{\Gamma_N^L \Gamma_N^R}{\Gamma_N^L + \Gamma_N^R}, \quad (7)$$

onde  $\Gamma_n^{R,L} = |\gamma_{n,k_F}^{R,L}|^2$ . Segundo, cabe notar que os acoplamentos nada mais são do que projeções das autofunções do PQ,  $\{\phi_n\}$ , sobre os estados propagantes dos contatos,  $\{\chi_k^{R,L}\}$ :

$$\gamma_{n,k}^{R,L} \sim \int_{R,L} d^2r [\chi_k(\mathbf{r})^{R,L}]^* \phi_n(\mathbf{r}), \quad (8)$$

onde a integral é feita sobre as fronteiras entre os contatos e o PQ. Assim, as chamadas larguras de linha,  $\Gamma_N^R$  e  $\Gamma_N^L$ , são proporcionais à intensidade da  $N$ -ésima autofunção nas regiões próximas aos contatos direito e esquerdo, respectivamente<sup>2</sup>. Como as autofunções têm distribuições espaciais que variam fortemente de um autoestado para outro, as larguras de linha podem mudar radicalmente a cada novo pico de condutância, levando a oscilações aperiódicas nas alturas de pico.

As flutuações dos picos de condutância fornecem informação importante a respeito da dinâmica de partícula única no PQ. Nós vimos que quando essa dinâmica é caótica no limite clássico, as flutuações espectrais do sistema (autovalores e autofunções) obedecem a distribuições universais. No caso das funções de onda, nós vimos que a TMA fornece uma predição bastante simples para a distribuição de larguras de linha [6],

$$P(\Gamma) \sim \Gamma^{\beta/2-1} e^{-a_\beta \Gamma / \langle \Gamma \rangle}, \quad (9)$$

onde  $a_\beta$  é uma constante numérica e  $\langle \Gamma \rangle$  é a média de  $\Gamma$ . (Note que distribuição é gaussiana para nos acoplamentos  $\gamma$ .) Essa distribuição, do tipo  $\chi^2$ , é chamada de Porter-Thomas. A partir dela é possível determinar facilmente a distribuição de alturas de picos para as diversas classes de simetria ( $\beta = 1, 2, 4$ ) [10]. Há poucos anos atrás dois grupos experimentais [11], ao

<sup>2</sup>Em geral as barreiras de potencial são muito altas, de modo que  $\Gamma_n^{R,L} \ll \Delta$

investigarem transporte em ensembles de pontos quânticos caóticos, obtiveram independentemente resultados compatíveis com as predição teóricas baseadas em TMA. Note que no caso da dinâmica ser do tipo regular, não há universalidade e portanto a distribuição de altura de picos só pode ser determinada teoricamente a partir do conhecimento detalhado do potencial de confinamento no PQ.

Posteriormente, com a melhoria da qualidade dos dados experimentais, notou-se que a distribuição de alturas, mesmo para sistemas caóticos, depende criticamente da temperatura (quando  $k_B T \sim \Delta$ ) e do posicionamento dos contatos (que podem atenuar ou não a influência de modos estacionários do tipo “bouncing ball” dentro do PQ) [12,13]. Curiosamente, em alguns casos simples de dinâmica regular, cálculos teóricos fornecem distribuições de alturas de picos bastante próximas ao caso universal [13]. Portanto, fica claro que é necessário buscar outros indicadores que tenham uma dependência mais marcante da dinâmica eletrônica.

## 4 Espaçamento de picos – efeitos de correlação eletrônica

Além da estatística de altura de picos, existe um outro observável, um tanto mais sutil, que pode ser usado para o estudo da dinâmica eletrônica no PQ. A partir da Eq. (5) podemos determinar a distância entre dois picos de condutância sucessivos em unidades de tensão:

$$\delta V_g = V_g^{(N)} - V_g^{(N-1)} = \frac{e}{C} + \frac{1}{e} (\varepsilon_N - \varepsilon_{N-1}). \quad (10)$$

Se as flutuações na capacitância forem muito pequenas e o termo constante puder ser subtraído sistematicamente, as flutuações em  $\delta V_g$  serão dominadas pela estatística dos espaçamentos de níveis vizinhos,  $s = \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}$ . No caso de pontos quânticos caóticos, como vimos anteriormente, a TMA tem uma predição muito forte para a distribuição desses espaçamentos [6]: ela pode ser bastante bem aproximada pela expressão

$$P(s) \sim s^\beta e^{-c_\beta s^2/\Delta^2}, \quad (11)$$

onde  $c_\beta$  é mais uma constante numérica. Essa distribuição foi introduzida na forma de conjectura por Wigner e tem como principal característica, além da forte assimetria, a supressão de pequenos espaçamentos:  $P(s \rightarrow 0) \rightarrow 0$  (ou seja, níveis de energia se evitam). Para sistemas regulares, a predição é oposta:

$$P(s) \sim e^{-s/\Delta}, \quad (12)$$

de onde se vê que os níveis de energia tendem a se aglomerar (estatística de Poisson).

Como os resultados experimentais para a distribuição de alturas conferiam com a predição baseada em TMA, esperava-se que a Eq. (11) descrevesse bastante bem as flutuações de  $\delta V_g$ . A grande surpresa foi que isso não aconteceu [14]. Tanto no regime difusivo quanto no balístico, pontos quânticos com dinâmica supostamente caótico forneciam distribuições de espaçamento de picos simétricas e muito próximadamente gaussianas. Outro fator curioso é que a escala dessas flutuações variava entre  $\Delta/e$  e  $e/C$ , dependendo do arranjo experimental. Ou seja, no caso mais extremo em que  $\delta V_g \sim e/C$ , ficava clara a limitação do modelo ortodoxo de bloqueio coulombiano para descrever o efeito das interações elétron-elétron.

Apesar disso, para os casos em que  $\delta V_g \sim \Delta/e$ , há uma contribuição às flutuações no espaçamento de picos que pode facilmente ser incorporada ao modelo ortodoxo [15]. Note que a Eq. (5) foi escrita supondo que o efeito da variação da tensão do eletrodo sobre o potencial de confinamento fosse muito pequena. Nos arranjos experimentais sem “back gate”, isso certamente não é razoável. Nesses casos, pode haver uma alteração substancial do formato do PQ ao se adicionar elétrons. Se parametrizarmos o formato do PQ através de uma certa



variável  $X$  (que deve estar univocamente relacionada a  $V_g$ ), podemos generalizar a Eq. (10) para

$$\delta V_g = \frac{e}{C} + \frac{1}{e} [\varepsilon_N(X + \delta X) - \varepsilon_{N-1}(X)]. \quad (13)$$

Ou seja, as condições de contorno usadas na determinação dos autoestados dentro do PQ variam continuamente com  $V_g$ . A cada novo pico há uma nova seqüência de níveis de energia. Se as deformações forem muito fortes, os níveis de energia  $\varepsilon_N(X + \delta X)$  e  $\varepsilon_{N-1}(X)$ , apesar de adjacentes, serão fracamente correlacionados e a distribuição de espaçamentos tenderá a uma gaussiana.

A deformação é a causa dominante das flutuações gaussianas de espaçamentos de picos no caso de PQ fracamente correlacionados. Ou seja, quando a razão entre a energia típica de interação de dois corpos e a energia cinética média for pequena,

$$r_s = \frac{e^2/\epsilon d}{E_F/2} = \frac{e^2 \sqrt{n}/\epsilon}{h^2 n/4m^*} < 1, \quad (14)$$

onde  $d = \sqrt{n}$  é a distância típica entre dois elétrons,  $n$  é a densidade do GEB,  $\epsilon$  é a constante dielétrica e  $m^*$  é a massa efetiva no GaAs. No casos em que  $r_s > 1$ , a contribuição mais importante às flutuações vem dos efeitos de correlação elétron-elétron. Lembre-se que o modelo ortodoxo negligencia flutuações na capacitância e assume a validade do teorema de Koopmans<sup>3</sup>. Ocorre que essas aproximações são reconhecidamente boas em sistemas muito grandes e onde as funções de onda sejam ou regulares ou muito próximas a ondas planas. Tudo indica que em sistema confinados e caóticos como os pontos quânticos essas aproximações deixem de ser válidas mesmo para valores bastante modestos do parâmetro  $r_s$ .

Várias simulações numéricas e alguns cálculos analíticos [16] foram realizados tentando esclarecer a situação do ponto-de-vista teórico. Os métodos numéricos utilizados vão desde diagonalizações exatas de pequenos sistemas [17], passando por cálculos auto-consistentes do tipo Hartree-Fock [18], até o funcional de densidade [19]. De um modo geral, podemos dizer que há ainda aspectos pouco claros, principalmente porque nenhum dos métodos citados, pelo fato de trabalharem com  $N < 100$  ou por assumirem valores de  $r_s$  modestos, conseguiu cercar completamente o problema. Nenhum deles tão pouco conseguiu explicar quantitativamente os resultados experimentais.

## 5 Polarização de spin

Até o momento nós evitamos falar sobre o grau de liberdade de spin dos elétrons e até mesmo na fórmula de Landauer-Büttiker, Eq. (6), não foi introduzido o fator 2 usual. No modelo ortodoxo do bloqueio coulombiano, os autoestados do PQ têm degenerescência de spin. Ou seja, embora cada pico de condutância corresponda à entrada de um único elétron, dois picos de condutância consecutivos poderiam corresponder a uma mesma autofunção  $\phi_n$ , sendo diferenciados somente pela orientação do spin. Esse picos portanto deveriam ter alturas iguais.

Uma rápida inspeção dos dados experimentais mostra que raramente picos se organizam na forma de pares. Uma análise mais detalhada pode ser feita medindo-se a evolução da alturas dos picos em função da intensidade de um (fraco) campo magnético perpendicular ao PQ. Sendo o campo pouco intenso, ele não causa quebra da degenerescência de spin dentro da escala  $\Delta$  (muito menos efeitos do tipo quantização de Hall). Campos fracos servem basicamente para alterar o padrão de interferência presente na autofunção. Assim, quando os picos têm aproximadamente a mesma composição espectral, eles respondem de forma semelhante a essa

<sup>3</sup>Numa forma simples, o teorema de Koopmans diz que  $E(N) - E(N-1) = \varepsilon_N$ , onde  $\varepsilon_N$  é obtido autoconsistentemente via método de Hartree-Fock

perturbação [12,20]. Experimentos deste tipo foram realizados e, mesmo perante esse teste mais abrangente, observou-se pouca correlação de pares.

Vale aqui lembrar que para átomos de tamanho médio ou intermediário, a parte residual da interação elétron-elétron leva a um preenchimento preferencialmente polarizado das camadas de energia (regra de Hund). No caso dos pontos quânticos, algo parecido ocorre, mas não há regra sistemática porque o potencial de confinamento não é regular. O que ocorre na verdade é que a dinâmica caótica aumenta o efeito de polarização de spin causado pela parte de troca da interação elétron-elétron. O espectro de partícula única, mesmo numa aproximação de campo médio, tem uma forte tendência à quebra da degenerescência de spin [21,22].

## 6 Outros problemas afins

Os pontos quânticos fornecem um extraordinário laboratório para a física básica da matéria condensada. O grande número de parâmetros que podem ser sintonizados (tamanho, temperatura, formato, densidade eletrônica, campo magnético, etc.), possibilita o estudo de fenômenos antes considerados díspares, como dinâmica caótica, efeitos de correlação e coerência de fase. Há ainda muitos outros aspectos que não foram abordados nestas notas. Três deles merecem citação pela sua importância atual: efeito Kondo, bombeamento quântico e emaranhamento de estados. O leitor é convidado a visitar o arquivo de preprints de Los Alamos ([xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/](http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/)) para buscar as referências mais atualizadas sobre esses temas.

## 7 Agradecimentos

Eu não poderia deixar de reconhecer que aprendi o assunto aqui abordado a partir de colaborações com colegas no Brasil e exterior. Gostaria de agradecer particularmente a Caio Lewenkopf por inúmeras e frutíferas discussões. Sou também grato a Rodrigo Capaz pela leitura atenta do manuscrito. O trabalho de pesquisa relacionado a estas notas foi financiado em parte pelas agências CNPq e FAPERJ e pelo PRONEX.

## 8 Bibliografia

- [1] M. A. Kastner, Rev. Mod. Phys. **64**, 849 (1992).
- [2] *Quantum Mesoscopic Physics*, eds. E. Akkermans *et al.*, Les Houches Lecture Notes Series, seção LXI (Elsevier, 1996).
- [3] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge, 1997).
- [4] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford, 1997).
- [5] O. Bohigas, M. J. Giannoni e C. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [6] M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic Press, 1991), 2<sup>a</sup> edição.
- [7] Uma revisão recente e acessível encontra-se em T. Guhr, A. Müller-Groeling, H. A. Weidenmüller, Phys. Rep. **229**, 189 (1998).
- [8] L. P. Kouwenhoven *et al.*, in *Mesoscopic Electron Transport*, eds. L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven e G. Schön, Nato ASI Series E **345** (Kluvers, 1997).
- [9] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991).
- [10] R. A. Jalabert, A. D. Stone e Y. Alhassid, Phys. Rev. Lett. **68**, 3466 (1992).
- [11] A. M. Chang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1695 (1996); J. A. Folk *et al.*, *ibid.*, **76**, 1699 (1996).
- [12] S. R. Patel *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5900 (1998).

- [13] G. Hackenbroich, W. D. Heiss e H. A. Weidenmüller, Phys. Rev. Lett. **79**, 127 (1997); E. Narimanov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4029 (1999); R. O. Vallejos, C. H. Lewenkopf e E. R. Mucciolo, Phys. Rev. B **60**, 13682 (1999).
- [14] U. Sivan *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1123 (1996); F. Simmel, T. Heinzel e D. A. Wharam, Europhys. Lett. **38**, 123 (1997); S. R. Patel *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4522 (1998).
- [15] R. O. Vallejos, C. H. Lewenkopf e E. R. Mucciolo, Phys. Rev. Lett. **81**, 677 (1998).
- [16] Y. M. Blanter, A. D. Mirlin e B. Muzykantskii, Phys. Rev. Lett. **78**, 24449 (1997); R. Berkovits e B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **55**, 5297 (1997); S. Levit e D. Orgad, Phys. Rev. B **60**, 5549 (1999).
- [17] R. Berkovits, Phys. Rev. Lett. **81**, 2128 (1998).
- [18] P. N. Walker, G. Montambaux e Y. Gefen, Phys. Rev. Lett. **82**, 5329 (1999); A. Cohen, K. Richter e R. Berkovits, Phys. Rev. B **60**, 2536 (1999).
- [19] M. Stopa, Physica B **251**, 228 (1998).
- [20] S. Luescher *et al.*, preprint (cond-mat/0002226).
- [21] P. W. Brouwer, Y. Oreg e B. Halperin, Phys. Rev. B **60** R13977 (1999).
- [22] Ph. Jacquod e A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. **84**, 3938 (2000).