



**UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL NORTE**

FACULTAD DE CIENCIAS

Departamento de Física

**Transporte electrónico y propiedades  
termoeléctricas en una molécula artificial**

Tesina para optar al grado de Magíster en Ciencias mención  
Física.

**Lic. Guillermo Gómez Silva**

Profesores Guías: Dra. María Loreto Ladrón de Guevara  
Dr. Pedro Orellana

Antofagasta, Chile

2012

# Agradecimientos

Agradezco a mi familia por ser el pilar principal en mi vida, a mis amigos que me han ayudado a lo largo de todos mis estudios, a los profesores y funcionarios del departamento de Física de la UCN por los conocimientos que me han entregado, especialmente a los profesores Pedro y Loreto por haber aceptado trabajar conmigo. Finalmente agradezo el financiamiento durante los años 2011 y 2012 por parte de la beca para estudios de Magíster CONICYT 22110583.

# Resumen

En este trabajo se estudia el transporte termoeléctrico a través de una molécula de triple punto cuántico en un arreglo triangular atravesada por un flujo de campo magnético y conectada a una fuente y un sumidero en común. Se consideran contactos ferromagnéticos y un desdoblamiento de energía debido al efecto Zeeman, lo que hace que el transporte sea dependiente de espín. Controlando el acoplamiento hacia los contactos es posible encontrar un filtro de espín eficiente para un rango pequeño de energía. Además, la coacción de la polarización de los contactos con la fase de Aharonov-Bohm mejora la eficiencia termoeléctrica del sistema, llevando a la figura de mérito de carga y de espín a valores por sobre 10 y 4, respectivamente.

# Abstract

In this work we study the thermoelectric transport through a triple quantum dot molecule in a triangular arrangement in presence of a magnetic flux and attached to a common source and drain. We consider ferromagnetic leads and Zeeman splitting, which produce a spin dependent transport. It is possible to find a efficient spin filter in a narrow range of energy by controlling the dot-lead coupling and the polarization parameter  $p$ . Besides, the coaction of the ferromagnetic leads and the Aharonov-Bohm phase enhance the thermoelectric efficiency of the system, where the charge figure of merit and spin figure of merit reach values greater than 10 and 4, respectively.

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>5</b>
<b>1. Transporte termoeléctrico y propiedades termoeléctricas en sistemas nanoscópicos</b>	<b>7</b>
1.1. Efectos de interferencia . . . . .	8
1.2. Efecto Seebeck y Seebeck de espín . . . . .	9
<b>2. Formalismo</b>	<b>11</b>
2.1. Funciones de Green en el transporte electrónico . . . . .	11
2.2. Formalismo de Landauer-Büttiker . . . . .	13
<b>3. Modelo</b>	<b>16</b>
3.1. Diagonalización del hamiltoniano de la molécula . . . . .	17
3.2. Función de Green del sistema . . . . .	19
<b>4. Resultados</b>	<b>22</b>
4.1. Acoplamientos $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$ iguales . . . . .	22
4.2. Acoplamientos $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$ distintos y simétricos . . . . .	23
4.3. Acoplamientos $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$ distintos y asimétricos . . . . .	25
4.4. Filtro de spin . . . . .	26
4.5. Propiedades termoeléctricas . . . . .	29



# Índice de figuras

1.1.	<i>Esquema de un (a) QD lateral y (b) un QD vertical [14]. . . . .</i>	7
1.2.	<i>Esquema de un anillo de Aharonov-Bohm conectado a dos contactos</i>	9
1.3.	<i>Esquema de una impureza conectada a dos contactos, donde los contactos son llevados a diferentes temperaturas <math>\theta_L</math> y <math>\theta_R</math>. . . . .</i>	9
2.1.	<i>Esquema de una perturbación que produce ondas con amplitudes <math>A^+</math> y <math>A^-</math> que se (a) alejan (función de Green retardada) y (b) acercan (función de Green avanzada) desde y hacia el punto de la perturbación.</i>	12
3.1.	<i>Esquema de una molécula de TQD en arreglo triangular conectada a una fuente y un sumidero en común, (a) vista transversal y (b) vista longitudinal donde se aprecia el flujo magnético que la atraviesa. . . . .</i>	16
4.1.	<i>(a) Transmisión y (b) densidad de estados en función de la energía para <math>\Delta = 0</math>, <math>p = 0</math>, <math>\phi = \pi/4</math> y <math>\varepsilon_0 = 0</math>. . . . .</i>	23
4.2.	<i>Molécula de TQD con acoplamientos distintos y (a) simétricos, (b) asimétricos hacia los contactos. . . . .</i>	24
4.3.	<i>Transmisión y densidad de estados en función de la energía para acoplamientos simétricos, con <math>\phi = \pi/4</math>, <math>p = 0</math> y <math>\Delta = 0</math>. Y para (a) <math>\delta = 0.6</math> y <math>\eta = 0.8</math>; (b) <math>\delta = 1</math> y <math>\eta = 0.8</math>. . . . .</i>	25

4.4.	<i>Transmisión y densidad de estados en función de la energía para acoplamiento asimétrico, con <math>\phi = \pi/4</math>, <math>p = 0</math> y <math>\Delta = 0</math>. Y para (a) <math>\delta = 0.6</math> y <math>\eta = 0.8</math>; (b) <math>\delta = 1</math> y <math>\eta = 0.8</math>.</i>	26
4.5.	<i>Transmisión en función de la energía para <math>\phi = \pi/4</math>, <math>\delta = 0.6</math> y <math>\eta = 0.8</math>. Y para (a) <math>p = 0.6</math> y <math>\Delta = 0.1\bar{\Gamma}</math>; (b) <math>p = 0.2</math> y <math>\Delta = 0.1\bar{\Gamma}</math>; (c) <math>p = 0.2</math> y <math>\Delta = 0.3\bar{\Gamma}</math>. Las líneas continuas negras corresponden a transmisión para espín up y las segmentadas rojas a la transmisión para espín down.</i>	27
4.6.	<i>(a) Transmisión y (b) polarización de espín en función de la energía para <math>\phi = \pi/2</math>, <math>\delta = 0.4</math>, <math>\eta = 0.7</math>, <math>p = 0.2</math> y <math>\Delta = 0.05\bar{\Gamma}</math>. Las líneas continuas negras corresponden a la transmisión y polarización para espín up y las rojas segmentadas a la transmisión y polarización para espín down.</i>	28
4.7.	<i>Polarización de espín down en función de la energía y de la fase de Aharonov-Bohm para <math>\delta = 0.4</math>, <math>\eta = 0.7</math>, <math>p = 0.2</math> y <math>\Delta = 0.1\bar{\Gamma}</math>.</i>	29
4.8.	<i>(a) Transmisión en función de la energía, potencia termoeléctrica (b) para espín up y down, (c) de carga y espín y (d) figura de mérito de carga y espín en función de la energía de Fermi para <math>\phi = \pi/4</math> y <math>p = 0.2</math>. Las líneas negras sólidas y rojas segmentadas corresponden a espín up y espín down, respectivamente, y las líneas azules segmentadas-punteadas y verdes punteadas corresponden a carga y espín, respectivamente.</i>	30
4.9.	<i>Figura de mérito en función de la energía de Fermi para (a) <math>\phi = \pi/2</math> y <math>p = 0.2</math>, (b) <math>\phi = \pi/6</math> y <math>p = 0.2</math>, (c) <math>\phi = \pi/16</math> y <math>p = 0.2</math>, (d) <math>\phi = \pi/6</math> y <math>p = 0.6</math>. Las líneas negras sólidas (rojas segmentadas) corresponden la figura de mérito de carga (espín).</i>	31

4.10. (a) *Potencia termoeléctrica y (b) figura de mérito en función de la energía de Fermi para  $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.99$ . Las líneas negras sólidas (rojas segmentadas) corresponden a la thermopower y figura de mérito de carga (espín). . . . . 32*

# Introducción

El estudio de las propiedades termoeléctricas en nanodispositivos se ha incrementado a medida que las técnicas experimentales han permitido contruirlos. Debido a esto, se ha logrado probar que la eficiencia termoeléctrica de conversión entre energía térmica y eléctrica es mayor en materiales nanoestructurados que en materiales macroscópicos. La eficiencia termoeléctrica es medida por la figura de mérito  $ZT$  y contrastando con los materiales macroscópicos donde difícilmente llega a  $ZT \approx 1$ , en nanodispositivos, como películas delgadas, se ha llegado a medir valores de  $ZT \approx 2.4$  [1]. La figura de mérito es directamente proporcional al cuadrado de la potencia termoeléctrica  $S$  y de la conductancia eléctrica  $\mathcal{G}$  e inversamente proporcional a la conductancia térmica  $\kappa$ . Por otra parte, la observación experimental del efecto Seebeck de espín en el 2008 por Uchida *et al.* [2], ha producido un aumento en el estudio de las propiedades termoeléctricas en sistemas dependientes de espín. El efecto Seebeck de espín es la generación de un voltaje dependiente de espín a partir de una diferencia de temperatura.

Se han estudiado varios sistemas en donde la eficiencia aumenta, debido principalmente a efectos que surgen del confinamiento cuántico, interacción coulombiana, interferencia cuántica de los electrones, entre otros. Uno de los sistemas más estudiados es la molécula doble en paralelo [3–6]. Se han encontrado sistemas que han aumentado en 1 o más órdenes de magnitud la figura de mérito variando los acoplamientos [7] o en presencia de efectos de interferencia [8]. Por otro lado, en presencia de contactos ferromagnéticos, el transporte se hace dependiente de espín,

por lo que se puede generar un termovoltaje dependiente de espín, lo que combinado con interacción espín-órbita tipo Rashba entre los puntos cuánticos [9, 10] o un desdoblamiento de tipo Zeeman bajo la acción de un campo magnético [11], permite aumentar la figura de mérito de espín.

En este trabajo estudiamos el sistema propuesto experimentalmente por Amaha *et al.* [12], que consiste en una molécula de tres puntos cuánticos (TQD) en un arreglo triangular conectada a una fuente y sumidero en común. El sistema ha sido estudiado teóricamente [13], sin embargo, ahora consideraremos contactos ferromagnéticos, el desdoblamiento de Zeeman de los niveles de energía y un flujo de campo magnético atravesando la molécula de TQD. Esto nos permite estudiar tanto el transporte electrónico como las propiedades termoeléctricas dependientes de espín.

El trabajo está ordenado de la siguiente manera. En el Capítulo 1 se dan a conocer algunos conceptos básicos del transporte en sistemas a nanoescala, en el Capítulo 2 se entregan las herramientas para poder calcular las distintas propiedades de transporte, en el Capítulo 3 se presenta el modelo del sistema en estudio, en el Capítulo 4 se entregan los resultados y finalmente en el Capítulo 5 se hace un resumen y se presentan las conclusiones.

# Capítulo 1

## Transporte termoeléctrico y propiedades termoeléctricas en sistemas nanoscópicos

En este capítulo daremos una breve introducción a algunos efectos presentes en el transporte termoeléctrico a través de nanoestructuras. Dentro de estas nanoestructuras encontramos a los nanotubos de carbono, a moléculas reales, más recientemente a las nanocintas de grafeno y, por último, a los puntos cuánticos (QDs, por sus siglas en inglés), que componen al sistema que estudiaremos.

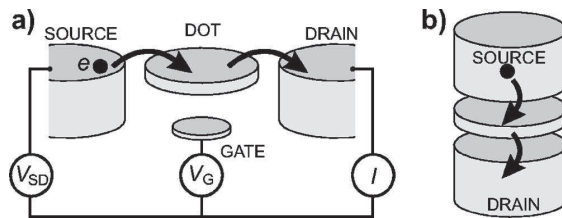


Figura 1.1: Esquema de un (a) QD lateral y (b) un QD vertical [14].

Los QDs son nanoestructuras cuyo tamaño puede ir desde unas decenas de nanómetros ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ) hasta algunos micrómetros ( $1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$ ). Algu-

nos de ellos están hechos de heteroestructuras semiconductoras como el arseniuro de galio (GaAs) y arseniuro de galio y aluminio (AlGaAs) y, dependiendo de su simetría, pueden haber QDs laterales y QDs verticales, como se muestra en la Fig. 1.1. Debido a la baja dimensionalidad de estas estructuras, los electrones dentro de ellas sacan a relucir su naturaleza cuántica mostrando efectos muy interesantes.

## 1.1. Efectos de interferencia

Consideremos un sistema compuesto por una impureza conectada a dos contactos metálicos, la información del sistema está contenida en la función de transmisión del sistema ( $\tau$ ) que nos indica la probabilidad que tiene un electrón con cierta energía de pasar de un contacto a otro. Cuando el electrón tiene más de un camino posible, se producen interferencias asociadas a los diferentes caminos que puede tomar el electrón, lo que da origen a perfiles de la transmisión tipo Fano [15], dados por

$$\tau(\varepsilon) = \frac{(q\Gamma_{res}/2 + \varepsilon - \varepsilon_{res})^2}{(\Gamma_{res}/2)^2 + (\varepsilon - \varepsilon_{res})^2}, \quad (1.1)$$

donde el parámetro  $q$  es finito y  $\Gamma_{res}$  describe el ancho de la resonancia. Cuando  $q = 0$  se genera un perfil Fano simétrico en la transmisión y cuando  $q$  tiende a infinito se genera un perfil Breit-Wigner. Para ciertos valores de la energía, la transmisión alcanza valores máximos ( $\tau = 1$ ), la energía asociada a estos máximos se conoce como energía de resonancia. Similarmente, para ciertos valores de la energía, la transmisión alcanza un valores mínimos ( $\tau = 0$ ), estos valores de la energía se conocen como energías de antirresonancia.

Si consideramos ahora que el electrón puede ir de un contacto a otro pasando por un anillo como se ve en la figura Fig. 1.2, y que hay un campo magnético atravesando este anillo, los electrones que tomen uno u otro camino se ven afectados por una fase que depende del flujo de campo magnético que atraviesa el anillo. Esto se conoce como efecto Aharonov-Bohm [16].

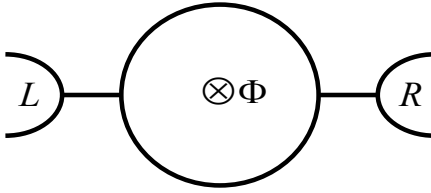


Figura 1.2: Esquema de un anillo de Aharonov-Bohm conectado a dos contactos

## 1.2. Efecto Seebeck y Seebeck de espín

Consideremos el mismo sistema de una impureza conectada a dos contactos metálicos. Macroscópicamente sabemos que los electrones pueden fluir de un contacto al otro como respuesta a una diferencia de potencial entre ellos o debido a un campo eléctrico externo. Sin embargo, si llevamos los contactos a diferentes temperaturas, como se esquematiza en la Fig. 1.3, espontáneamente fluirá una corriente entre los contactos, llevando electrones desde el contacto a mayor temperatura hacia el contacto a menor temperatura. Debido a esta corriente, se acumulan cargas en uno de los contactos y cuando la corriente deje de fluir, habrá una diferencia de potencial entre los contactos conocido como voltaje termoeléctrico, esta respuesta se conoce como efecto Seebeck.

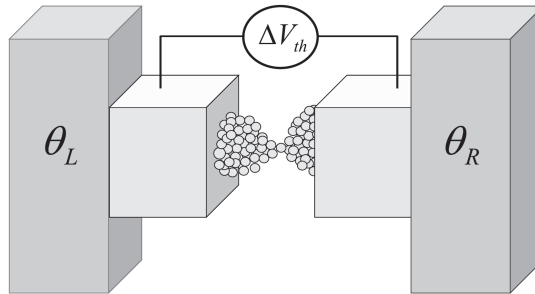


Figura 1.3: Esquema de una impureza conectada a dos contactos, donde los contactos son llevados a diferentes temperaturas  $\theta_L$  y  $\theta_R$ .

Este efecto tiene una gran importancia tecnológica ya que nos sugiere que los

sistemas son capaces de transformar energía térmica en energía eléctrica. El efecto Seebeck se puede medir mediante lo que conocemos como coeficiente Seebeck o potencia termoeléctrica ( $S$ ), que es la constante de proporcionalidad entre el voltaje termoeléctrico ( $\Delta V_{th}$ ) y la diferencia de temperatura de los contactos ( $\Delta T$ ) cuando la corriente ( $I$ ) es igual a cero, en el límite cuando  $\Delta T$  tiende a cero, y podemos expresarla de la siguiente forma [17]

$$S = - \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \left( \frac{\Delta V_{th}}{\Delta T} \right)_{I=0}. \quad (1.2)$$

Asimismo, si los contactos tienen propiedades magnéticas, al llevarlos a diferentes temperaturas fluirá una corriente dependiente de espín entre ellos, por lo que cuando la corriente eléctrica sea cero, se generará un voltaje termoeléctrico dependiente de espín, este fenómeno se conoce como efecto Seebeck de espín y, al igual que el efecto Seebeck, es posible medirlo mediante la potencia termoeléctrica de espín ( $S_s$ ).

La eficiencia termoeléctrica de estos sistemas nanoestructurados viene dada por la figura de mérito, denotada por  $ZT$ , la cual depende de la potencia termoeléctrica, la conductancia eléctrica ( $\mathcal{G}$ ), la conductancia térmica ( $\kappa$ ) y la temperatura ( $T$ ). En los materiales macroscópicos, esta eficiencia no es mayor a uno, sin embargo, en sistemas nanoscópicos se han encontrado eficiencias mayores debido a efectos de confinamiento de electrones, interacción coulombiana, coherencia cuántica, entre otros.

# Capítulo 2

## Formalismo

El estudio de las propiedades electrónicas y termoeléctricas de los sistemas implica el cálculo de cantidades como la función de transmisión del sistema y conexión con cantidades como la conductancia electrónica, conductancia térmica y la potencia termoeléctrica. Para ello emplearemos el formalismo de Landauer-Büttiker, el cual conecta la función de transmisión con las propiedades termoeléctricas. Ahora, para calcular la función de transmisión emplearemos el formalismo de las funciones de Green para el transporte electrónico.

### 2.1. Funciones de Green en el transporte electrónico

Las funciones de Green son funciones que nos entregan la respuesta de un sistema a una perturbación externa, por esto son muy útiles para estudiar problemas de transporte en nanoestructuras. Definimos la función de Green de un sistema de la forma [18, 19]

$$G = \frac{I}{\varepsilon - H + i\eta}, \quad (2.1)$$

donde  $H$  es el hamiltoniano del sistema y  $\eta$  es un parámetro infinitesimal. Se distinguen dos funciones de Green: la función de Green retardada  $G^r$  (la que generalmente se refiere como función de Green  $G$ , Ec. (2.1)) y la función de Green avanzada  $G^a$ . La primera, corresponde a las ondas que se originan en el punto de la perturbación, y la segunda corresponde a las ondas que desaparecen en el punto de la perturbación, como se puede ver en la Fig. 2.1. La función de Green avanzada es la hermítica conjugada de la retardada ( $G^a = [G^r]^\dagger$ ).

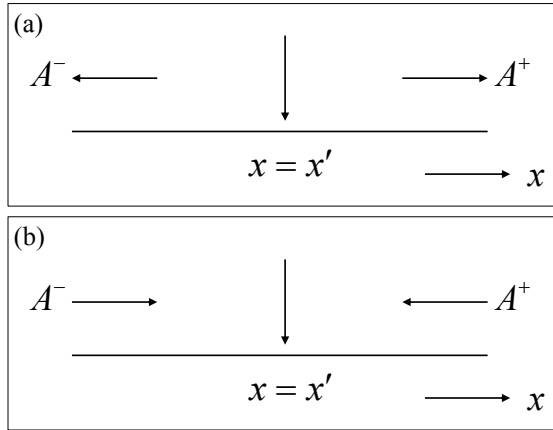


Figura 2.1: Esquema de una perturbación que produce ondas con amplitudes  $A^+$  y  $A^-$  que se (a) alejan (función de Green retardada) y (b) acercan (función de Green avanzada) desde y hacia el punto de la perturbación.

Para calcular las funciones de Green usaremos el método de la ecuación de Dyson, el cual consiste en una ecuación matricial dada por

$$G_\sigma = g_\sigma + g_\sigma H_I G_\sigma, \quad (2.2)$$

donde  $G_\sigma$  es la función de Green del sistema perturbado,  $g$  es la función de Green del sistema sin perturbar y  $H_I$  es el hamiltoniano de interacción del sistema.

Con la función de Green del sistema podemos calcular la densidad total de estados (DOS) del sistema denotada por  $\rho_\sigma$ . Para ello, tomamos traza de la parte

imaginaria de  $G_\sigma$ , de la forma

$$\rho_\sigma = -\frac{1}{\pi} \sum_i \text{Im} [G_\sigma^r]_{ii}. \quad (2.3)$$

Por último, también podemos calcular la función de transmisión del sistema utilizando la relación de Fisher-Lee [20], la que nos entrega toda la información del transporte a través del sistema, y que está dada por

$$\tau_\sigma(\varepsilon) = \text{Tr} \left( \Gamma_\sigma^L G_\sigma^r \Gamma_\sigma^R G_\sigma^a \right), \quad (2.4)$$

donde  $\Gamma_\sigma^L$  y  $\Gamma_\sigma^R$  son los acoplamientos efectivos a hacia la izquierda y derecha respectivamente, a los que está conectado el sistema.

## 2.2. Formalismo de Landauer-Büttiker

Como se describió anteriormente, la función de transmisión nos entrega la probabilidad que tiene un electrón con una cierta energía de pasar de un contacto a otro. El formalismo de Landauer-Büttiker es el que conecta esta cantidad mecanico-cuántica, la transmisión, con una cantidad medible como lo es la conductancia eléctrica. Esta relación se conoce como fórmula de Landauer [21] para la conductancia lineal a temperatura cero y tiene la forma

$$\mathcal{G}_\sigma = \frac{e^2}{h} \tau_\sigma(\varepsilon = \mu), \quad (2.5)$$

donde  $e$  es la carga del electrón,  $h$  la constante de Planck y  $\mu$  la energía de Fermi de los contactos.

Sin embargo, para estudiar las propiedades termoeléctricas, consideramos temperaturas distintas de cero. Aquí, las cantidades termoeléctricas quedan expresadas en función de las integrales de transporte, que dependen de la transmisión y de la energía de Fermi de los contactos y están dadas por [22]

$$K_{n,\sigma} = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu)^n \tau_\sigma(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.6)$$

donde  $f = 1/(1 + \exp[(\varepsilon - \mu)/(k_B T)])$  es la función de distribución de Fermi de los contactos,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\sigma$  es el índice de espín de los electrones. La dependencia en  $\sigma$  permite describir el transporte en sistemas en que se rompe la degeneración de espín, como es el caso cuando existe campo magnético, en presencia de materiales magnéticos o algún otro mecanismo que haga que la función de transmisión dependa del índice de espín.

Ahora podemos definir la conductancia eléctrica para  $T \neq 0$  de la forma

$$\mathcal{G}_\sigma(\mu) = e^2 K_{0,\sigma}, \quad (2.7)$$

también definimos la potencia termoeléctrica

$$S_\sigma(\mu) = -\frac{1}{eT} \frac{K_{1,\sigma}}{K_{0,\sigma}} \quad (2.8)$$

y la conductancia térmica electrónica como

$$\kappa_e(\mu) = \kappa_{e,\uparrow}(\mu) + \kappa_{e,\downarrow}(\mu), \quad (2.9)$$

donde

$$\kappa_{e,\sigma}(\mu) = \frac{1}{T} \left( K_{2,\sigma} - \frac{K_{1,\sigma}^2}{K_{0,\sigma}} \right). \quad (2.10)$$

Adicionalmente podemos definir la conductancia eléctrica de carga  $\mathcal{G}_c$  y conductancia eléctrica de espín  $\mathcal{G}_s$

$$\mathcal{G}_c(\mu) = \mathcal{G}_\uparrow(\mu) + \mathcal{G}_\downarrow(\mu) \quad (2.11)$$

$$\mathcal{G}_s(\mu) = \mathcal{G}_\uparrow(\mu) - \mathcal{G}_\downarrow(\mu). \quad (2.12)$$

Similarmente, podemos definir la potencia termoeléctrica de carga  $S_c$  y la potencia termoeléctrica de espín  $S_s$ , inducidas por termovoltajes de carga y espín, respectivamente,

$$S_c(\mu) = \frac{1}{2} [S_\uparrow(\mu) + S_\downarrow(\mu)] \quad (2.13)$$

$$S_s(\mu) = \frac{1}{2} [S_\uparrow(\mu) - S_\downarrow(\mu)]. \quad (2.14)$$

Por último, es posible definir la figura de mérito de carga  $Z_c T$  y de espín  $Z_s T$  mediante las siguiente relaciones:

$$Z_c T = \frac{S_c^2 \mathcal{G}_c T}{\kappa_e + \kappa_{ph}} \quad (2.15)$$

$$Z_s T = \frac{S_s^2 \mathcal{G}_s T}{\kappa_e + \kappa_{ph}}. \quad (2.16)$$

Estas relaciones dan cuenta de la eficiencia para generar un termovoltaje de carga y de espín a partir de una diferencia de temperatura, respectivamente.  $\kappa_{ph}$  es la contribución de los fonones a la conductancia térmica. En nuestro análisis despreciaremos esta cantidad asumiendo contactos térmicos pobres [23] o por algún mecanismo de confinamiento de fonones [24, 25].

# Capítulo 3

## Modelo

En este trabajo estudiamos las propiedades termoeléctricas de una molécula formada por tres puntos cuánticos (TQD) de un nivel en un arreglo triangular, atravesada por un flujo de campo magnético y conectada a contactos ferromagnéticos, como se muestra en la Fig. 3.1. Este sistema, construido experimentalmente

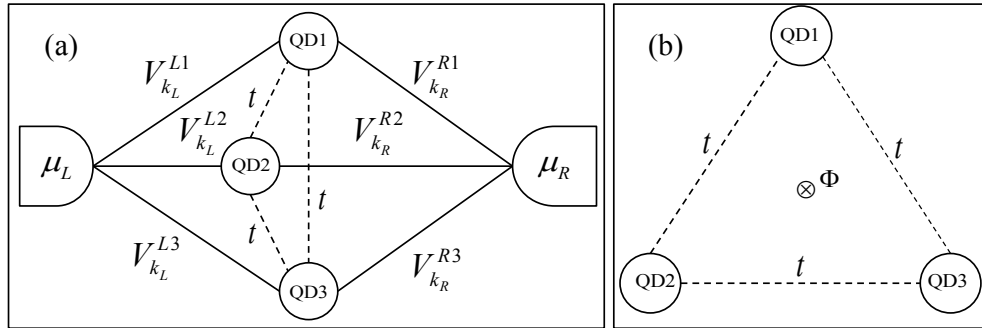


Figura 3.1: Esquema de una molécula de TQD en arreglo triangular conectada a una fuente y un sumidero en común, (a) vista transversal y (b) vista longitudinal donde se aprecia el flujo magnético que la atraviesa.

por Amaha *et al.* [12], está modelado por un hamiltoniano de Anderson no interactuante para 3 impurezas, el cual puede ser escrito como  $H = H_m + H_c + H_I$ ,

donde  $H_m$  es el hamiltoniano de la molécula,

$$H_m = \sum_{i=1,\sigma}^3 \varepsilon_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + \sum_{i<j,\sigma}^3 (t_{ij} d_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + h.c.), \quad (3.1)$$

donde  $\varepsilon_{i,\sigma}$  es la energía de sitio del  $i$ -ésimo QD ( $i = 1, 2, 3$ ),  $d_{i,\sigma}$  ( $d_{i,\sigma}^\dagger$ ) es el operador de aniquilación (creación) de electrones en el  $i$ -ésimo QD,  $t_{ij}$  es el acoplamiento entre QDs dado por  $t_{12} = t_{23} = t_{31} = te^{i\phi}$ , con  $t_{ij} = (t_{ji})^*$ ; y  $\phi$  la fase de Aharonov-Bohm dada por  $\phi = 2\pi\Phi/3\Phi_0$ , donde  $\Phi_0 = h/e$  es el cuanto de flujo.  $H_c$  es el hamiltoniano de los contactos,

$$H_c = \sum_{k_\alpha,\sigma} (\varepsilon_{k_\alpha,\sigma} c_{k_\alpha,\sigma}^\dagger c_{k_\alpha,\sigma} + h.c.), \quad (3.2)$$

donde  $\varepsilon_{k_\alpha,\sigma}$  es la energía de un electrón con número de onda  $k$  y  $c_{k_\alpha,\sigma}$  ( $c_{k_\alpha,\sigma}^\dagger$ ) es el operador que lo aniquila (crea) en el contacto  $\alpha$  ( $\alpha = L, R$ ).  $H_I$  es el hamiltoniano de interacción entre los contactos y la molécula,

$$H_I = \sum_{k_\alpha,i=1,\sigma}^3 (V_{k_\alpha}^{\alpha i} c_{k_\alpha,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + h.c.), \quad (3.3)$$

donde  $V_{k_\alpha}^{i\alpha}$  es el acoplamiento del  $i$ -ésimo QD al contacto  $\alpha$ . Luego, calculamos la función de Green del sistema usando el método de la ecuación de Dyson.

### 3.1. Diagonalización del hamiltoniano de la molécula

Es conveniente diagonalizar el hamiltoniano de la molécula y así conocer las energías de los estados moleculares. Para ello, asumimos las energías de sitio de los QDs iguales  $\varepsilon_{1,\sigma} = \varepsilon_{2,\sigma} = \varepsilon_{3,\sigma} = \varepsilon_{0,\sigma}$  y escribimos  $H_m$  en forma matricial,

$$H_m = \begin{pmatrix} \varepsilon_{0,\sigma} & te^{i\phi} & te^{-i\phi} \\ te^{-i\phi} & \varepsilon_{0,\sigma} & te^{i\phi} \\ te^{i\phi} & te^{-i\phi} & \varepsilon_{0,\sigma} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Es posible encontrar una matriz  $P$ , formada por los autoestados del  $H_m$ , dada por

$$P = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & -(1+i\sqrt{3})/2 & -(1-i\sqrt{3})/2 \\ 1 & -(1-i\sqrt{3})/2 & -(1+i\sqrt{3})/2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

que diagonaliza el hamiltoniano de la forma  $\bar{H}_m = P^{-1}H_mP$ , obteniendo

$$\bar{H}_m = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_{1,\sigma} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\varepsilon}_{2,\sigma} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\varepsilon}_{3,\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

donde  $\bar{\varepsilon}_i$  son las energías de los estados moleculares, dadas por

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{1,\sigma} &= \varepsilon_{0,\sigma} + 2t \cos \phi \\ \bar{\varepsilon}_{2,\sigma} &= \varepsilon_{0,\sigma} - t(\cos \phi - \sqrt{3} \sin \phi) \\ \bar{\varepsilon}_{3,\sigma} &= \varepsilon_{0,\sigma} - t(\cos \phi + \sqrt{3} \sin \phi). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Con la matriz  $P$  podemos transformar los operadores  $d_{i,\sigma}$  ( $d_{i,\sigma}^\dagger$ ) a la base diagonal  $\bar{d}_{i,\sigma}$  ( $\bar{d}_{i,\sigma}^\dagger$ ) de la forma

$$\begin{pmatrix} \bar{d}_{1,\sigma}^\dagger \\ \bar{d}_{2,\sigma}^\dagger \\ \bar{d}_{3,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} = P^{-1} \begin{pmatrix} d_{1,\sigma}^\dagger \\ d_{2,\sigma}^\dagger \\ d_{3,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

y también obtener los acoplamientos  $V_{k_\alpha}^{i\alpha}$  en la base diagonal  $\bar{V}_{k_\alpha}^{i\alpha}$

$$\begin{pmatrix} \bar{V}_{k_\alpha}^{\alpha 1} \\ \bar{V}_{k_\alpha}^{\alpha 2} \\ \bar{V}_{k_\alpha}^{\alpha 3} \end{pmatrix} = P^{-1} \begin{pmatrix} V_{k_\alpha}^{\alpha 1} \\ V_{k_\alpha}^{\alpha 2} \\ V_{k_\alpha}^{\alpha 3} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Finalmente, podemos también reescribir el hamiltoniano del sistema en la base diagonal,

$$\begin{aligned}
\bar{H}_m &= \sum_{i=1,\sigma}^3 \bar{\varepsilon}_{i,\sigma} \bar{d}_{i,\sigma}^\dagger \bar{d}_{i,\sigma} \\
\bar{H}_c &= \sum_{k_\alpha,\sigma} \left( \varepsilon_{k_\alpha,\sigma} c_{k_\alpha,\sigma}^\dagger c_{k_\alpha,\sigma} + h.c. \right) \\
\bar{H}_I &= \sum_{k_\alpha,i=1,\sigma}^3 \left( \bar{V}_{k_\alpha}^{\alpha i} c_{k_\alpha,\sigma}^\dagger \bar{d}_{i,\sigma} + h.c. \right)
\end{aligned} \tag{3.10}$$

### 3.2. Función de Green del sistema

Con el Hamiltoniano del sistema en la base diagonal, calculamos la función de Green del sistema mediante la ecuación de Dyson dada por la Ec. (2.2). Primero calculamos los elementos  $\bar{G}_{11,\sigma}$ ,  $\bar{G}_{21,\sigma}$  y  $\bar{G}_{31,\sigma}$

$$\bar{G}_{11,\sigma} = \bar{g}_{1,\sigma} + \sum_{k_L} \bar{g}_{1,\sigma} \bar{V}_{k_L}^{L1} \bar{G}_{L1,\sigma} + \sum_{k_R} \bar{g}_{1,\sigma} \bar{V}_{k_R}^{R1} \bar{G}_{R1,\sigma} \tag{3.11a}$$

$$\bar{G}_{21,\sigma} = \sum_{k_L} \bar{g}_{2,\sigma} \bar{V}_{k_L}^{L2} \bar{G}_{L1,\sigma} + \sum_{k_R} \bar{g}_{2,\sigma} \bar{V}_{k_R}^{R2} \bar{G}_{R1,\sigma} \tag{3.11b}$$

$$\bar{G}_{31,\sigma} = \sum_{k_L} \bar{g}_{3,\sigma} \bar{V}_{k_L}^{L3} \bar{G}_{L1,\sigma} + \sum_{k_R} \bar{g}_{3,\sigma} \bar{V}_{k_R}^{R3} \bar{G}_{R1,\sigma}, \tag{3.11c}$$

donde  $\bar{g}_{i,\sigma}$  corresponde a la función de Green del sitio  $i$  de la molécula aislada en la base diagonal y tiene la forma

$$\bar{g}_{i,\sigma} = \frac{1}{(\varepsilon - \bar{\varepsilon}_{i,\sigma})}.$$

Ahora, es necesario calcular  $\bar{G}_{L1,\sigma}$  y  $\bar{G}_{R1,\sigma}$

$$\bar{G}_{L1,\sigma} = g_{L,\sigma} \bar{V}_{k_L}^{L1*} \bar{G}_{11,\sigma} + g_{L,\sigma} \bar{V}_{k_L}^{L2*} \bar{G}_{21,\sigma} + g_{L,\sigma} \bar{V}_{k_L}^{L3*} \bar{G}_{31,\sigma} \tag{3.12a}$$

$$\bar{G}_{R1,\sigma} = g_{R,\sigma} \bar{V}_{k_R}^{R1*} \bar{G}_{11,\sigma} + g_{R,\sigma} \bar{V}_{k_R}^{R2*} \bar{G}_{21,\sigma} + g_{R,\sigma} \bar{V}_{k_R}^{R3*} \bar{G}_{31,\sigma}, \tag{3.12b}$$

aquí,  $g_{L,\sigma}$  y  $g_{R,\sigma}$  corresponden a las funciones de Green de los contactos izquierdo y derecho, respectivamente, sin perturbar. Podemos desacoplar las ecuaciones,

introduciendo las Ecs. (3.12) en (3.11), obteniendo

$$\begin{aligned}
\bar{G}_{11,\sigma} &= \bar{g}_{1,\sigma} \left[ 1 + \left( \bar{\Sigma}_{11,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{11,\sigma}^R \right) \bar{G}_{11,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{12,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{12,\sigma}^R \right) \bar{G}_{21,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{13,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{13,\sigma}^R \right) \bar{G}_{31,\sigma} \right] \\
\bar{G}_{21,\sigma} &= \bar{g}_{2,\sigma} \left[ \left( \bar{\Sigma}_{21,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{21,\sigma}^R \right) \bar{G}_{11,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{22,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{22,\sigma}^R \right) \bar{G}_{21,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{23,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{23,\sigma}^R \right) \bar{G}_{31,\sigma} \right] \\
\bar{G}_{31,\sigma} &= \bar{g}_{3,\sigma} \left[ \left( \bar{\Sigma}_{31,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{31,\sigma}^R \right) \bar{G}_{11,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{32,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{32,\sigma}^R \right) \bar{G}_{21,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{33,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{33,\sigma}^R \right) \bar{G}_{31,\sigma} \right]
\end{aligned} \tag{3.13}$$

donde  $\bar{\Sigma}_{ij,\sigma}^\alpha$  se conocen como autoenergías y están definidas por

$$\bar{\Sigma}_{ij,\sigma}^\alpha = \sum_{k_\alpha} \bar{V}_{k_\alpha}^{\alpha i} g_{\alpha,\sigma} \bar{V}_{k_\alpha}^{\alpha j*} .$$

Realizamos el mismo procedimiento para las entradas  $\bar{G}_{12,\sigma}$ ,  $\bar{G}_{22,\sigma}$  y  $\bar{G}_{32,\sigma}$ , y obtenemos

$$\begin{aligned}
\bar{G}_{12,\sigma} &= \bar{g}_{1,\sigma} \left[ \left( \bar{\Sigma}_{11,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{11,\sigma}^R \right) \bar{G}_{12,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{12,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{12,\sigma}^R \right) \bar{G}_{22,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{13,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{13,\sigma}^R \right) \bar{G}_{32,\sigma} \right] \\
\bar{G}_{22,\sigma} &= \bar{g}_{2,\sigma} \left[ 1 + \left( \bar{\Sigma}_{21,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{21,\sigma}^R \right) \bar{G}_{12,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{22,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{22,\sigma}^R \right) \bar{G}_{22,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{23,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{23,\sigma}^R \right) \bar{G}_{32,\sigma} \right] \\
\bar{G}_{32,\sigma} &= \bar{g}_{3,\sigma} \left[ \left( \bar{\Sigma}_{31,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{31,\sigma}^R \right) \bar{G}_{12,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{32,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{32,\sigma}^R \right) \bar{G}_{22,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{33,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{33,\sigma}^R \right) \bar{G}_{32,\sigma} \right]
\end{aligned} \tag{3.14}$$

y luego para obtener  $\bar{G}_{13,\sigma}$ ,  $\bar{G}_{23,\sigma}$  y  $\bar{G}_{33,\sigma}$ ,

$$\begin{aligned}
\bar{G}_{13,\sigma} &= \bar{g}_{1,\sigma} \left[ \left( \bar{\Sigma}_{11,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{11,\sigma}^R \right) \bar{G}_{13,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{12,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{12,\sigma}^R \right) \bar{G}_{23,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{13,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{13,\sigma}^R \right) \bar{G}_{33,\sigma} \right] \\
\bar{G}_{23,\sigma} &= \bar{g}_{2,\sigma} \left[ \left( \bar{\Sigma}_{21,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{21,\sigma}^R \right) \bar{G}_{13,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{22,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{22,\sigma}^R \right) \bar{G}_{23,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{23,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{23,\sigma}^R \right) \bar{G}_{33,\sigma} \right] \\
\bar{G}_{33,\sigma} &= \bar{g}_{3,\sigma} \left[ 1 + \left( \bar{\Sigma}_{31,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{31,\sigma}^R \right) \bar{G}_{13,\sigma} + \left( \bar{\Sigma}_{32,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{32,\sigma}^R \right) \bar{G}_{23,\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \left( \bar{\Sigma}_{33,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{33,\sigma}^R \right) \bar{G}_{33,\sigma} \right]
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Estas nueve ecuaciones se pueden ordenar en un sistema matricial y se pueden escribir como

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - \bar{\varepsilon}_{1,\sigma} + i\bar{\Gamma}_{11,\sigma}/2 & i\bar{\Gamma}_{12,\sigma}/2 & i\bar{\Gamma}_{13,\sigma}/2 \\ i\bar{\Gamma}_{21,\sigma}/2 & \varepsilon - \bar{\varepsilon}_{2,\sigma} + i\bar{\Gamma}_{22,\sigma}/2 & i\bar{\Gamma}_{23,\sigma}/2 \\ i\bar{\Gamma}_{31,\sigma}/2 & i\bar{\Gamma}_{32,\sigma}/2 & \varepsilon - \bar{\varepsilon}_{3,\sigma} + i\bar{\Gamma}_{33,\sigma}/2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bar{G}_{11,\sigma} & \bar{G}_{12,\sigma} & \bar{G}_{31,\sigma} \\ \bar{G}_{21,\sigma} & \bar{G}_{22,\sigma} & \bar{G}_{32,\sigma} \\ \bar{G}_{31,\sigma} & \bar{G}_{32,\sigma} & \bar{G}_{33,\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

donde los términos  $\bar{\Gamma}_{ij,\sigma}$  son los acoplamientos efectivos hacia los contactos en la base diagonalizada y están dados por

$$-\frac{i\bar{\Gamma}_{ij,\sigma}}{2} = \bar{\Sigma}_{ij,\sigma}^L + \bar{\Sigma}_{ij,\sigma}^R.$$

Luego, llamamos  $\mathcal{M}_\sigma$  a la primera matriz de la Ec. (3.16), de manera que podemos volver a escribirla como

$$\mathcal{M}_\sigma \bar{G}_\sigma = I \quad (3.17)$$

y así obtener la función retardada de Green invirtiendo la matriz  $\mathcal{M}_\sigma$

$$\bar{G}_\sigma = \bar{G}_\sigma^r = \mathcal{M}_\sigma^{-1}. \quad (3.18)$$

Con la función retardada de Green podemos obtener la función avanzada de Green,  $\bar{G}_\sigma^a = (\bar{G}_\sigma^r)^\dagger$ , y mediante la relación de Fisher-Lee [20] obtenemos la función de transmisión

$$\tau_\sigma(\varepsilon) = \text{Tr} \left( \bar{\Gamma}_\sigma^L \bar{G}_\sigma^r \bar{\Gamma}_\sigma^R \bar{G}_\sigma^a \right). \quad (3.19)$$

# Capítulo 4

## Resultados

En este capítulo estudiaremos el transporte electrónico y las propiedades termoeléctricas del sistema, para ello consideraremos los acoplamientos entre los puntos cuánticos en unidades de  $\bar{\Gamma}$  ( $t = \bar{\Gamma}$ ). Además, como consideramos contactos ferromagnéticos, el acoplamiento hacia ellos depende de un parámetro de polarización  $p$  y del índice de espín de los electrones  $\sigma$ , es decir, se modifica el acoplamiento efectivo hacia los contactos de la forma

$$\bar{\Gamma}_\sigma \rightarrow \bar{\Gamma}(1 + \sigma p). \quad (4.1)$$

Además, debido a los contactos ferromagnéticos se produce un desdoblamiento tipo Zeeman en las energías de sitio de la molécula de la forma  $\varepsilon_0 \rightarrow \varepsilon_0 + \sigma\Delta$ , donde  $\Delta$  puede modularse mediante un campo magnético.

### 4.1. Acoplamientos $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$ iguales

Primero consideraremos todos los acoplamientos hacia los contactos iguales, tal que  $V_{k_L}^{L1} = V_{k_L}^{L2} = V_{k_L}^{L3} = V_{k_R}^{R1} = V_{k_R}^{R2} = V_{k_R}^{R3} = V$ . De acuerdo con la Ec. (3.9), los acoplamientos en la base molecular quedan  $\bar{V}_{k_L}^{L1} = \bar{V}_{k_L}^{R1} = \sqrt{3}V$  y  $\bar{V}_{k_L}^{L2} = \bar{V}_{k_L}^{L3} =$

$\bar{V}_{k_R}^{R2} = \bar{V}_{k_R}^{R3} = 0$ . Con esto, la función de transmisión toma la forma

$$\tau_\sigma(\varepsilon) = \frac{\bar{\Gamma}^2(1 + \sigma p)^2}{[\varepsilon - (\varepsilon_0 + \sigma\Delta) - 2t \cos \phi]^2 + \bar{\Gamma}^2(1 + \sigma p)^2}. \quad (4.2)$$

Notamos que hay un máximo ( $\tau = 1$ ) en la transmisión en  $\varepsilon = \varepsilon_0 + \sigma\Delta + 2t \cos \phi$ , esto se puede ver en la Fig. 4.1(a) donde la transmisión tiene forma de resonancia Breit-Wigner centrada en la energía antes mencionada conocida como energía de antiligadura. Además, en la Fig. 4.1(b) podemos ver la densidad total de estados  $\rho$  en función de la energía y notamos que usando los mismos parámetros hay dos estados que están desacoplados de los contactos. Estos estados no transmiten y se conocen como “estados ligados en el continuo”, están centrados en las energías  $\varepsilon = \varepsilon_0 + \sigma\Delta - t(\cos \phi \pm \sqrt{3} \sin \phi)$  y han sido estudiados ampliamente en la literatura [26, 27]. Las energías asociadas a estos estados son llamadas energías de ligadura.

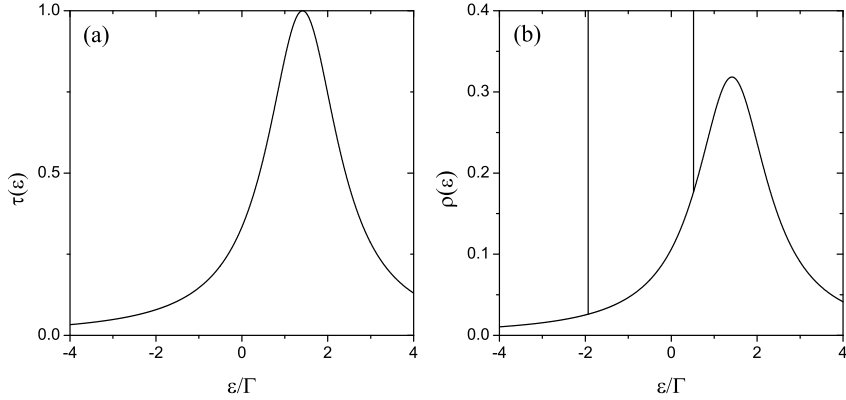


Figura 4.1: (a) Transmisión y (b) densidad de estados en función de la energía para  $\Delta = 0$ ,  $p = 0$ ,  $\phi = \pi/4$  y  $\varepsilon_0 = 0$ .

## 4.2. Acoplamientos $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$ distintos y simétricos

Ahora, consideraremos los acoplamientos hacia los contactos  $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$  distintos pero simétricos, de forma que  $V_{k_L}^{L1} = V_{k_R}^{R1} = V$ ,  $V_{k_L}^{L2} = V_{k_R}^{R2} = \delta V$  y  $V_{k_L}^{L3} = V_{k_R}^{R3} = \eta V$

como se ilustra en la Fig. 4.2(a). De esta forma, los acoplamientos en la base diagonalizada son todos distintos de cero ( $\overline{V}_{k\alpha}^{\alpha i} \neq 0$ ) y son modulados por los parámetros  $\delta$  y  $\eta$ .

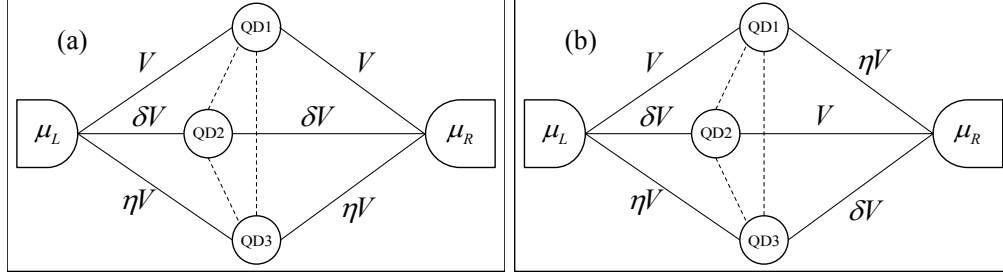


Figura 4.2: Molécula de TQD con acoplamientos distintos y (a) simétricos, (b) asimétricos hacia los contactos.

En la Fig. 4.3(a) se puede ver la transmisión en función de la energía para diferentes valores de  $\delta$  y  $\eta$ . Notamos primero la aparición de dos resonancias Fano centradas en las energías de ligadura descritas anteriormente, donde el ancho de estas resonancias depende directamente de  $\delta$  y  $\eta$ , haciéndose más angosto mientras más cercanos a 1 sean estos parámetros. Así, la densidad de estados también crece para los estados con energía igual a la de las resonancias Fano, como se muestra en la Fig. 4.3(b). Cuando  $\delta = \eta = 1$  el ancho de las resonancias se hace cero y los estados se desacoplan de los contactos volviendo al caso mostrado en la Fig. 4.1 cuando todos los acoplamientos son iguales. En este caso, las energías de antiligadura y la energía de ligadura son  $\varepsilon = -1.93\overline{\Gamma}$ ,  $\varepsilon = 0.51\overline{\Gamma}$  y  $\varepsilon = 1.41\overline{\Gamma}$  respectivamente, sin embargo, estas energías pueden ser moduladas por  $\phi$  con un período de  $2n\pi$ .

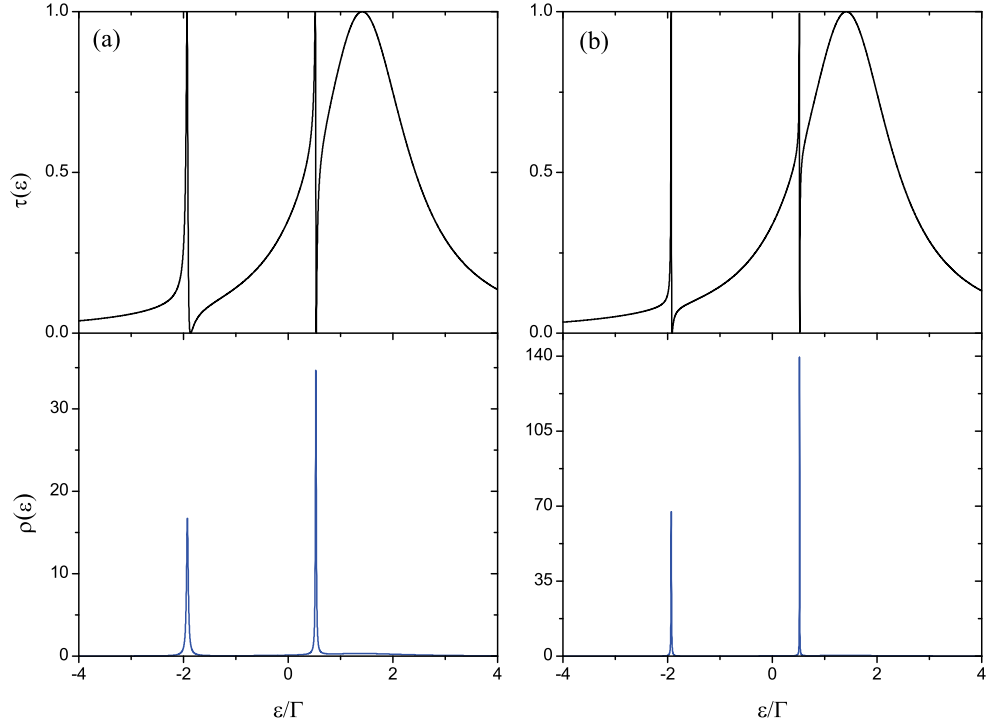


Figura 4.3: *Transmisión y densidad de estados en función de la energía para acoplamientos simétricos, con  $\phi = \pi/4$ ,  $p = 0$  y  $\Delta = 0$ . Y para (a)  $\delta = 0.6$  y  $\eta = 0.8$ ; (b)  $\delta = 1$  y  $\eta = 0.8$ .*

### 4.3. Acoplamientos $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$ distintos y asimétricos

Por otro lado, cuando se consideran los acoplamientos hacia los contactos  $V_{k_\alpha}^{\alpha i}$  distintos y asimétricos, de forma que  $V_{k_L}^{L1} = V_{k_R}^{R2} = V$ ,  $V_{k_L}^{L2} = V_{k_R}^{R3} = \delta V$  y  $V_{k_L}^{L3} = V_{k_R}^{R1} = \eta V$  como se ve en la Fig. 4.2(b), también se aprecian resonancias Fano en la transmisión. Sin embargo, para este caso los perfiles de transmisión son ligeramente distintos ya que, como se muestra en la Fig. 4.4(a), no hay ceros en la transmisión. Esto produce que la densidad de estados para estas energías sea menor debido a la asimetría de los acoplamientos. Al comparar con el caso de acoplamientos simétricos, notamos que que la densidad de estados para las energías

de resonancia y para los mismos parámetros disminuye casi a la mitad. Esto se explica ya que la densidad de estado está ligada directamente con el ancho de la función de transmisión.

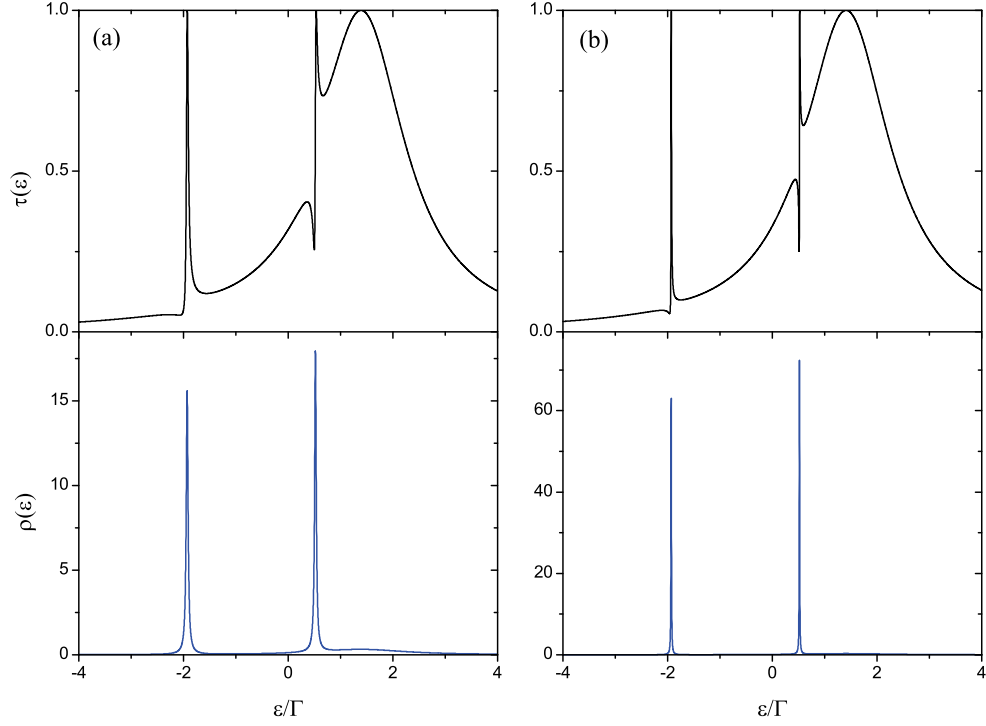


Figura 4.4: *Transmisión y densidad de estados en función de la energía para acoplamientos asimétrico, con  $\phi = \pi/4$ ,  $p = 0$  y  $\Delta = 0$ . Y para (a)  $\delta = 0.6$  y  $\eta = 0.8$ ; (b)  $\delta = 1$  y  $\eta = 0.8$ .*

#### 4.4. Filtro de spin

Ahora consideraremos el efecto de los contactos ferromagnéticos, para ello tomaremos el parámetro de polarización de los contactos  $p$  distinto de cero. Por esto, los niveles de energía de la molécula se desdoblan debido al efecto Zeeman, donde este desdoblamiento está descrito por el parámetro  $\Delta$ . El efecto de los contactos

ferromagnéticos ( $p \neq 0$ ) y el desdoblamiento Zeeman ( $\Delta \neq 0$ ) hacen que la transmisión quede polarizada de espín, es decir, el transporte es diferente para espín *up* y espín *down*. En la Fig. 4.5 podemos ver la transmisión para espín *up* y espín

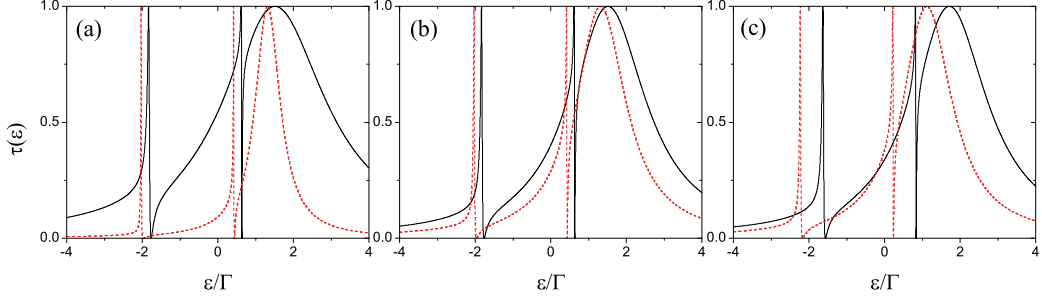


Figura 4.5: *Transmisión en función de la energía para  $\phi = \pi/4$ ,  $\delta = 0.6$  y  $\eta = 0.8$ . Y para (a)  $p = 0.6$  y  $\Delta = 0.1\bar{\Gamma}$ ; (b)  $p = 0.2$  y  $\Delta = 0.1\bar{\Gamma}$ ; (c)  $p = 0.2$  y  $\Delta = 0.3\bar{\Gamma}$ . Las líneas continuas negras corresponden a transmisión para espín *up* y las segmentadas rojas a la transmisión para espín *down*.*

*down* en función de la energía considerando acoplamientos distintos y simétricos (ver Fig. 4.2(b)). Notamos, comparando las Figuras 4.5(a) y 4.5(b), que a medida que el parámetro  $p$  aumenta, el ancho de las resonancias para espín *up* aumenta, mientras que el de las resonancias para espín *down* disminuye, esto se debe a que el ancho de las resonancias depende directamente del acoplamiento efectivo hacia los contactos ( $\bar{\Gamma}$ ) y el parámetro  $p$  lo modifica según la ec. (4.1). Además, comparando las Figuras 4.5(b) y 4.5(c), podemos ver cómo se desplazan las curvas de transmisión para espín *up* hacia la derecha y para espín *down* hacia la izquierda cuando el parámetro de desdoblamiento de Zeeman  $\Delta$  también aumenta, debido a la acción de un campo magnético.

Como las curvas de transmisión son diferentes para espín *up* y espín *down*, podemos definir la polarización de espín para la transmisión dada por

$$P_\sigma = \frac{|\tau_\uparrow - \tau_\downarrow|}{\tau_\uparrow + \tau_\downarrow} \tau_\sigma. \quad (4.3)$$

La Fig. 4.6 muestra la transmisión y la polarización en función de la energía para

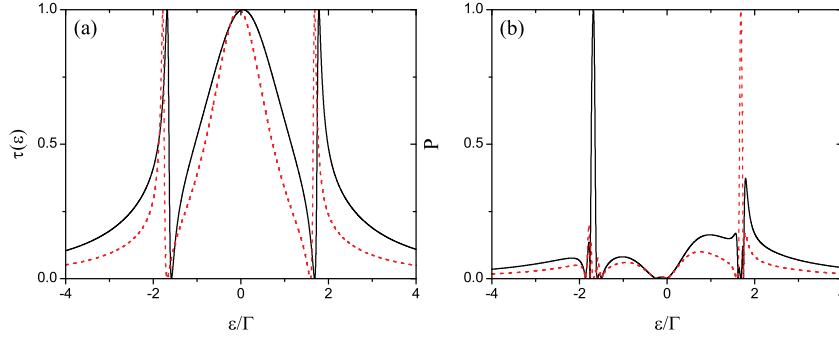


Figura 4.6: (a) *Transmisión y (b) polarización de espín en función de la energía para  $\phi = \pi/2$ ,  $\delta = 0.4$ ,  $\eta = 0.7$ ,  $p = 0.2$  y  $\Delta = 0.05\bar{\Gamma}$ . Las líneas continuas negras corresponden a la transmisión y polarización para espín up y las rojas segmentadas a la transmisión y polarización para espín down.*

acoplamientos distintos y simétricos hacia los contactos. Podemos ver que con los parámetros escogidos en la Fig. 4.6(a), alrededor de  $\varepsilon \approx -1.73\bar{\Gamma}$ , la antirresonancia de espín *down* ( $\tau_{\downarrow} = 0$ ) coincide con el máximo para espín *up* ( $\tau_{\uparrow} = 1$ ), es decir, hay transporte solamente para espín *up*. Esto se traduce en una polarización en la transmisión del 100% para espín *up*. Ocurre lo mismo en torno a  $\varepsilon \approx 1.73\bar{\Gamma}$ , donde la antirresonancia para espín *up* coincide con la resonancia para espín *down*, generando un un filtro de espín de 100% para espín *down*. Sin embargo, el rango de energía donde el filtro de espín llega al 100% es muy pequeño, como se puede ver también en la Fig. 4.6(b). Esto se puede verificar en la Fig. 4.7, en ella vemos la polarización de espín *down* ( $P_{\downarrow}$ ) en función de la energía y de la fase de AB. Notamos que la máxima polarización se alcanza para una fase de AB que va desde  $\phi = \pi/2$  hasta  $\phi = \pi$ , abarcando un pequeño rango de energía que está en torno a  $\varepsilon \approx 1.5\bar{\Gamma}$  donde  $P_{\downarrow}$  alcanza el 100%. Además,  $P$  también depende del parámetro de desdoblamiento de Zeeman  $\Delta$ , por lo que cambiándolo se pueden encontrar rangos de energía diferentes para el filtro de espín. Por esto, se pueden obtener

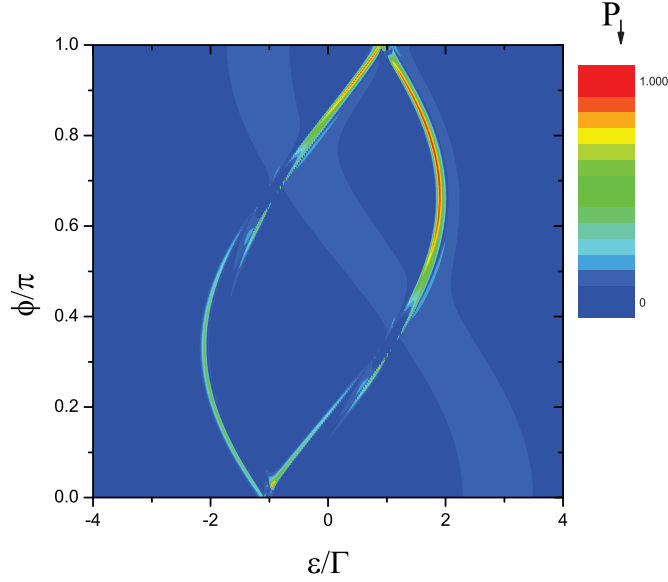


Figura 4.7: Polarización de espín down en función de la energía y de la fase de Aharonov-Bohm para  $\delta = 0.4$ ,  $\eta = 0.7$ ,  $p = 0.2$  y  $\Delta = 0.1\bar{\Gamma}$ .

diferentes configuraciones para  $\phi$ ,  $p$  y  $\Delta$  en donde se alcanzan altas polarizaciones pero siempre para rangos de energía muy pequeños.

## 4.5. Propiedades termoeléctricas

En esta sección, analizaremos las propiedades termoeléctricas del sistema considerando los acoplamientos hacia los contactos distintos y simétricos. Además, consideraremos los parámetros  $\delta = 0.4$ ,  $\eta = 0.7$ ,  $\Delta = 0.05\bar{\Gamma}$  y una temperatura  $k_B T = 0.026\bar{\Gamma}$ , que en sistemas con puntos cuánticos, donde las energías de los acoplamientos son del orden de los meV, corresponde a una temperatura de  $T = 300$  mK. Las Figuras 4.8(a) y 4.8(b) muestran, respectivamente, la transmisión para espín *up* y *down* en función de la energía y la potencia termoeléctrica para espín *up* y *down* en función de la energía de Fermi para  $\phi = \pi/4$  y  $p = 0.2$ . Notamos que  $S_\sigma$  aumenta considerablemente para energías cercanas a las energías

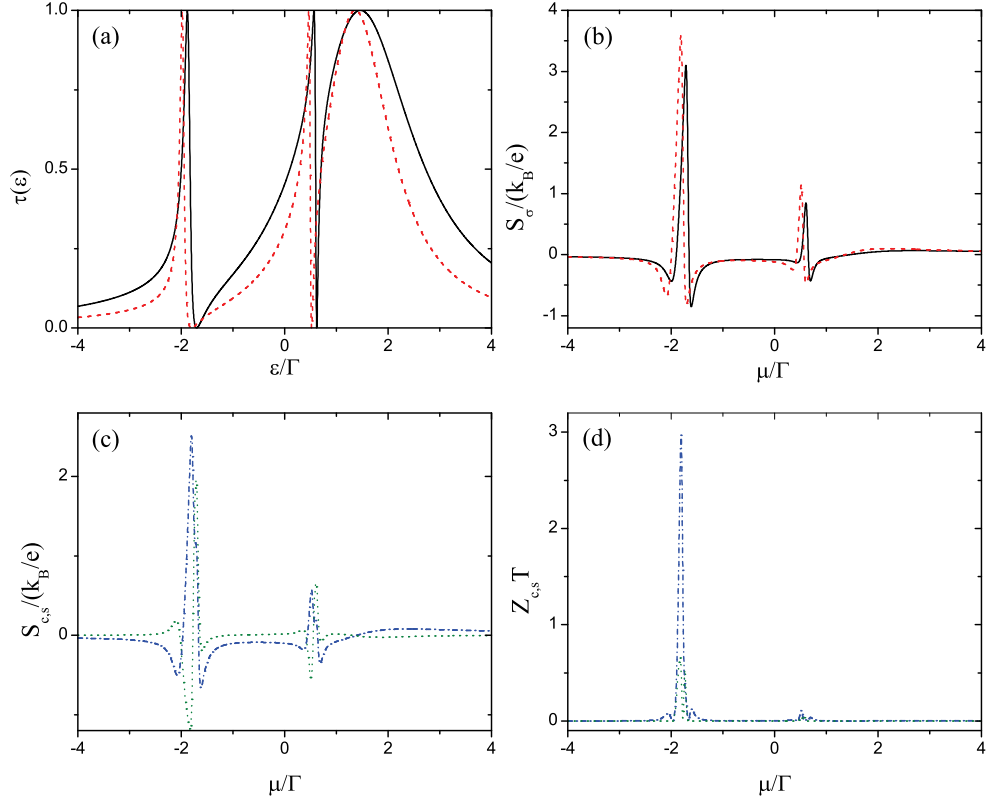


Figura 4.8: (a) Transmisión en función de la energía, potencia termoeléctrica (b) para espín up y down, (c) de carga y espín y (d) figura de mérito de carga y espín en función de la energía de Fermi para  $\phi = \pi/4$  y  $p = 0.2$ . Las líneas negras sólidas y rojas segmentadas corresponden a espín up y espín down, respectivamente, y las líneas azules segmentadas-punteadas y verdes punteadas corresponden a carga y espín, respectivamente.

de las resonancia Fano ( $\varepsilon \approx -1.93\bar{\Gamma}$  y  $\varepsilon \approx 0.51\bar{\Gamma}$ ), mientras que para la energía cercana a la resonancia Breit-Wigner ( $\varepsilon \approx 1.41\bar{\Gamma}$ ) decrece varios órdenes de magnitud. Además, debido al aumento de  $S_\sigma$ , también aumentan la potencia termoeléctrica y figura de mérito de carga y de espín en torno a las mismas energías, como se muestra en las Figuras 4.8(c) y 4.8(d). Por esto, se puede inferir que altos valores para la potencia termoeléctrica, y por consiguiente de la figura de mérito,

están asociads a cambios abruptos en la función de transmisión, como sucede para energías cercanas a las resonancias Fano.

En la Fig. 4.9 se muestran las figuras de mérito de carga y espín en función de la energía de Fermi para distintos valores de  $\phi$  y  $p$  en la zona de una de las resonancias Fano. Vemos que en la Fig. 4.9(a) ( $\phi = \pi/2$  y  $p = 0.2$ ), el máximo valor

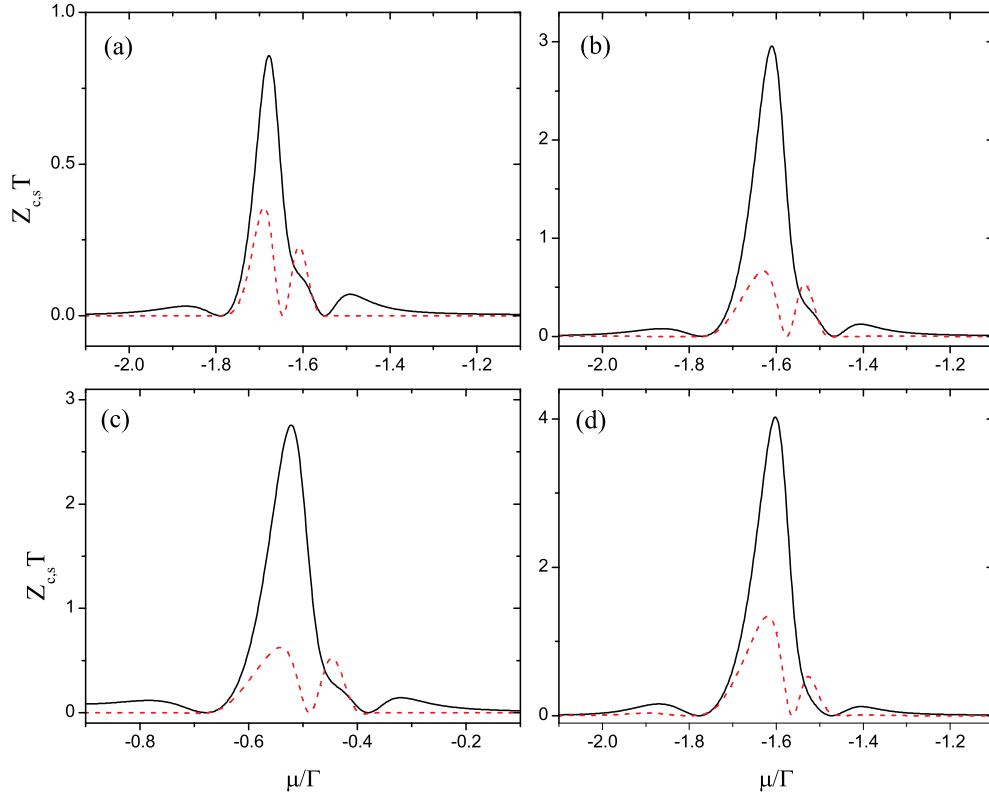


Figura 4.9: *Figura de mérito en función de la energía de Fermi para (a)  $\phi = \pi/2$  y  $p = 0.2$ , (b)  $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.2$ , (c)  $\phi = \pi/16$  y  $p = 0.2$ , (d)  $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.6$ . Las líneas negras sólidas (rojas segmentadas) corresponden la figura de mérito de carga (espín).*

alcanzado por la figura de mérito de carga es  $Z_c T \approx 0.86$  y de espín  $Z_s T \approx 0.36$ , mientras que en la Fig. 4.9(b) ( $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.2$ ) los máximos valores alcanzados por la figura de mérito de carga y espín son respectivamente 2.96 y 0.66. Entonces,

esto nos indica que la eficiencia termoeléctrica depende, además de la forma de la transmisión, de la fase de Aharonov-Bohm, la que desplaza las energías de resonancia. En la Fig. 4.9(c) ( $\phi = \pi/16$  y  $p = 0.2$ ) los máximos valores alcanzados por la figura de mérito de carga y espín son 2.75 y 0.62, por lo que las máximas eficiencias, tanto de carga como de espín, se alcanzan para valores de la fase de Aharonov-Bohm cercanos a  $\pi/6$ . Por último, la Fig. 4.9(d) ( $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.6$ ) nos muestra que los valores máximos de la potencia termoeléctrica también crecen a medida que el parámetro de polarización de los contactos crece. Esto se debe a que, como vimos anteriormente, el parámetro  $p$  ensancha la resonancia de un espín y angosta la del otro, lo que hace que la potencia termoeléctrica de uno de los índices de espín aumente debido al angostamiento de su resonancia Fano y, por consiguiente, la eficiencia termoeléctrica de espín también crece.

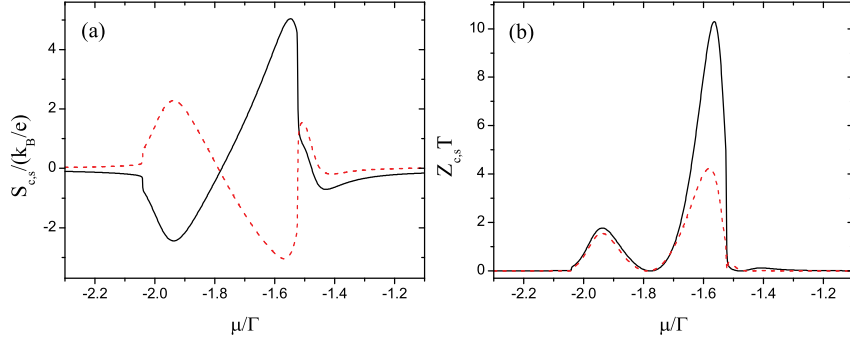


Figura 4.10: (a) *Potencia termoeléctrica* y (b) *figura de mérito* en función de la energía de Fermi para  $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.99$ . Las líneas negras sólidas (rojas segmentadas) corresponden a la *thermopower* y *figura de mérito de carga (espín)*.

En la Fig. 4.10 se muestra la potencia termoeléctrica y figura de mérito de carga y espín en función de la energía de Fermi para  $\phi = \pi/6$  y  $p = 0.99$ . Vemos que para estos valores, la figura de mérito de carga y espín alcanzan valores de  $Z_c T > 10$  y  $Z_s T > 4$ , siempre en torno a la energía de una de las resonancias Fano. Por lo tanto, podemos controlar la eficiencia del sistema cambiando la fase

de Aharonov-Bohm y el parámetro de polarización de los contactos. Además vemos que cuando  $\phi$  tiene valores cercanos a  $\pi/6$  y  $p \rightarrow 1$  se alcanza la máxima eficiencia del sistema.

# Capítulo 5

## Conclusiones

Hemos estudiado el transporte electrónico y las propiedades termoeléctricas de una molécula de triple punto cuántico atravesada por un campo magnético y conectada a contactos ferromagnéticos y, encontramos que el transporte electrónico a través de ésta, depende de la simetría de los acoplamientos. Cuando los acoplamientos son iguales no hay presencia de resonancias Fano, mientras que al tomar acoplamientos distintos, ya sea simétricos o asimétricos hacia la izquierda y derecha, aparecen dos resonancias Fano centradas en las energías de ligadura. El ancho de estas resonancias se puede controlar haciéndose más anchas (angostas) mientras mayor (menor) sea la diferencia entre los acoplamientos.

Los contactos ferromagnéticos y el desdoblamiento de Zeeman hacen que el transporte sea dependiente de espín. Esta polarización de espín en la transmisión se puede controlar con los parámetros de polarización de los contactos, de energía de desdoblamiento de Zeeman y de acoplamiento, y escogiéndolos adecuadamente, podemos encontrar un eficiente filtro de espín (100%) para pequeños rango de energía, pero para un gran rango de la fase de Aharonov-Bohm  $\phi$ .

Por último, calculamos la potencia termoeléctrica y figura de mérito, que nos entregan información de las propiedades termoeléctricas del sistema, y encontramos que para temperaturas de alrededor de  $k_B T = 0.026 \Gamma$  (que en sistemas de

puntos cuánticos corresponden a  $T = 300$  mK), se puede aumentar la eficiencia termoeléctrica del sistema bajo la acción combinada de los contactos ferromagnéticos y la fase de Aharonov-Bohm cuando hay resonancias Fano en la transmisión. Para  $\phi$  cercanos a  $\pi/6$  y  $p \rightarrow 1$ , encontramos que la figura de mérito de carga alcanza valores  $Z_c T > 10$ , lo que se traduce en una alta eficiencia de carga, además la figura de mérito de espín alcanza valores  $Z_s T > 4$ , que es un aumento mucho mayor, considerando que  $Z_s T$  es menor en 1 o 2 órdenes de magnitud con respecto a  $Z_c T$ .

# Bibliografía

- [1] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts and B. O'Quinn, *Nature (London)* **413**, 597 (2001).
- [2] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa and E. Saitoh, *Nature (London)* **455**, 778 (2008).
- [3] Y. S. Liu and X. F. Yang, *J. Appl. Phys.* **108**, 023710 (2010).
- [4] G. Gómez-Silva, O. Ávalos-Ovando, M. L. Ladrón de Guevara and P. A. Orellana, *J. Appl. Phys.* **111**, 053704 (2012).
- [5] P. Trocha and J. Barnás, *Phys. Rev. B* **85**, 085408 (2012).
- [6] Y. S. Liu, F. Chi, X. F. Yang and J. F. Feng, *J. Appl. Phys.* **109**, 053712 (2011).
- [7] G. Rajput and K. C. Sharma, *J. Appl. Phys.* **110**, 113723 (2011).
- [8] C. M. Finch, V. M. García-Suárez and C. J. Lambert, *Phys. Rev. B* **79**, 033405 (2009).
- [9] J. Zheng and F. Chi, *J. Appl. Phys.* **111**, 093702 (1012).
- [10] J. Zheng, F. Chi and Y. Guo, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 265301 (2012).
- [11] H. J. Xue, T. Q. Lü, H. C. Zhang, H. T. Yin, L. Cui and Z. L. He, *Chin. Phys. B.* **21**, 037201 (2012).

- [12] S. Amaha, T. Hatano, T. Kubo, S. Teraoka, Y. Tokura, S. Tarucha, and D. G. Austing, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 092103 (2009).
- [13] H. Fu and K. Yao, *J. Appl. Phys.* **110**, 094502 (2011).
- [14] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha and L. M. K. Vandersypen, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1217 (2007).
- [15] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [16] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [17] M. Di Ventra, *Electrical Transport in Nanoscale Systems*, Cambridge University Press, New York 2008.
- [18] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer, Heidelberg 2006.
- [19] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge 1997.
- [20] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
- [21] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957).
- [22] U. Sivan and Y. Imry, *Phys. Rev. B.* **33**, 551 (1986).
- [23] Y. S. Liu, Y. R. Chen and Y. C. Chen, *ACS Nano* **3**, 3497 (2009).
- [24] Y. Boikov, B. M. Goltsman and V. A. Danilov, *Semiconductors* **29**, 464 (1995).
- [25] A. Balandin and K. L. Wang, *Phys. Rev. B* **58**, 1544 (1998).
- [26] M. L. Ladrón de Guevara, F. Claro and P. A. Orellana, *Phys. Rev. B* **67**, 195335 (2003).
- [27] M. L. Ladrón de Guevara and P. A. Orellana, *Phys. Rev. B* **73**, 205303 (2006).