



UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL NORTE

FACULTAD DE CIENCIAS

Departamento de Física

Bombeo de carga y espín en puntos cuánticos

Tesis para optar al grado de Magíster en Ciencias con
mención Física

Juan Pablo Ramos Andrade

Profesor Guía: Dr. Pedro Orellana Dinamarca.

Dr. Víctor Marcelo Apel.

Dr. Luis Foa Torres.

Antofagasta, Chile

2013

A mi madre.

Agradecimientos

Agradezco el financiamiento otorgado por el proyecto FONDECYT N° 1100560, *Electronic transport in nano devices* y por la beca CONICYT N° 22121816 para estudios de magíster en Chile, año académico 2012.

Resumen

En este trabajo se estudia un sistema capaz de proporcionar bombeo cuántico de carga (una corriente bombeada) en el régimen adiabático controlado por un solo parámetro, al ser perturbado por un potencial dependiente del tiempo sumado a un campo magnético estacionario transversal a él. El modelo estudiado consiste en un anillo con dos puntos cuánticos embebidos, cada uno en un brazo del anillo, en donde incluyendo interacción espín-órbita obtenemos corrientes bombeadas diferenciadas en espín y al considerar una correcta sintonización entre los parámetros podemos lograr una corriente bombeada pura de espín. Adicionalmente, mostramos que al acoplar uno de los puntos cuánticos del anillo de forma lateral con un arreglo unidimensional podemos mejorar la eficiencia del bombeo en el sistema.

Abstract

In this work we study a system that provides charge quantum pump (a pumped current) in the adiabatic limit, controlled by a single parameter, perturbing the system with a time-periodic potential and also a static magnetic field across them. The model studied consists of a quantum ring with a quantum dot embedded in each arm, where the spin-orbit coupling is included to obtain differentiated pumped currents for each spin and even with the correct tuning between the parameters, we can obtain a pure quantum spin current. Further, we showed that the coupling from a quantum dot to a finite one dimension arrangement can be used to enhance the charge quantum pump.

Índice general

Introducción	5
1. Conceptos previos	7
1.1. Efectos coherentes	9
1.1.1. Efecto Fano	9
1.1.2. Bombeo cuántico de carga	11
1.2. Efectos debidos a campos externos	12
1.2.1. Efecto Aharonov-Bohm	12
1.2.2. Acoplamiento espín-órbita	14
2. Formalismo teórico	15
2.1. Teoría de Floquet	15
2.2. Funciones de Green	17
2.3. Transmitancia y corriente media	19
3. Modelo	22
3.1. Sistema temporalmente periódico	22
3.2. Utilizando la teoría de Floquet	24
3.3. Modelo decimado	28
3.4. Arreglo lateral	28

<i>Índice General</i>	1
4. Resultados	31
4.1. Bombeo cuántico de carga	31
4.2. Bombeo cuántico de espín	37
Conclusiones	41
Bibliografía	43

Índice de figuras

1.1. Imagen experimental de un punto cuántico. Las zonas claras denotadas con I corresponden a los contactos que proporcionan los potenciales de puerta que permiten el confinamiento del electrón, mientras que II corresponde al contacto que otorga un potencial de barrera controlable. Las zonas oscuras corresponden al continuo de energía. Ésta es una imagen realizada mediante microscopia atómica. [8]	8
1.2. Izquierda, esquema cualitativo del efecto Fano. Derecha, perfiles Fano para distintos valores de q [11].	11
1.3. Esquema del montaje experimental para medir bombeo cuántico de carga en un punto cuántico abierto perturbado por dos parámetros desfasados en ψ , con diferencia de potencial nula [13].	12
1.4. Esquema citado como ejemplo de sistema con trayectoria cerrada para el desplazamiento de los portadores.	13
3.1. Modelo propuesto para producir bombeo cuántico de carga y espín.	23
3.2. Canales de Floquet.	27
3.3. Modelo propuesto para producir bombeo cuántico de carga y espín, acoplado lateralmente a una cadena finita y ordenada a través del punto cuántico no perturbado.	29

4.1. Transmisiones totales izquierda–derecha y derecha–izquierda con $V_0 = \gamma/2$ y $\Phi = 0,1\Phi_0$. La línea roja segmentada es para transmisión de derecha a izquierda y la línea negra sólida es para la transmisión de izquierda a derecha. 32

4.2. Diferencia entre transmisiones totales izquierda–derecha y derecha–izquierda con $V_0 = \gamma/2$. La línea roja segmentada es para $\Phi = 0$, la línea negra sólida es para $\Phi = 0,1\Phi_0$ y la línea azul punteada es para $\Phi = 0,9\Phi_0$ 33

4.3. Corriente bombeada media de carga para $\Phi = 0$ (línea negra sólida), $\Phi = 0,1\Phi_0$ (línea roja segmentada) y $\Phi = 0,3\Phi_0$ (línea azul punteada). Aquí la energía del punto cuántico perturbado es $\varepsilon_0 = -\gamma$ y del no perturbado $\varepsilon_1 = E_0 = 0$. Además, $V_0 = \gamma/2$ y todos los otros acoplamientos en el sistema son γ 34

4.4. Corriente bombeada media de carga para diferentes valores de la magnitud del acoplamiento al punto cuántico perturbado (QD0), siendo la misma tanto a la izquierda como a la derecha, considerando un flujo magnético de $\Phi = 0,1\Phi_0$ 34

4.5. Corriente bombeada media de carga para diferentes valores de la energía del punto cuántico perturbado (QD0), siendo la del no perturbado $\varepsilon = E_0 = 0$, considerando un flujo magnético de $\Phi = 0,1\Phi_0$ y un acoplamiento $V_0 = 0,25\gamma$ 35

4.6. Diferencia entre transmisiones totales izquierda–derecha y derecha–izquierda con $V_0 = \gamma/2$, $\Phi = 0,1\Phi_0$ y $t_p = \gamma/10$ 36

4.7. Corriente bombeada media de carga para diferentes valores del acoplamiento a la cadena finita, considerando un flujo magnético de $\Phi = 0,1\Phi_0$ y un acoplamiento $V_0 = 0,25\gamma$ 36

4.8. Corriente bombeada media de espín arriba (línea negra sólida) y de espín abajo (línea roja segmentada). Aquí el flujo de AB $\Phi_{AB} = 0,2\Phi_0$ mientras que el asociado al acoplamiento espín-órbita es $\Phi_{SO} = 0,1\Phi_0$ 38

4.9. Corriente bombeada media de espín arriba (línea negra sólida) y de espín abajo (línea roja segmentada). Aquí el flujo de AB $\Phi_{AB} = 0,5\Phi_0$ mientras que el asociado al acoplamiento espín-órbita es $\Phi_{SO} = 0,4\Phi_0$ 38

4.10. Corriente bombeada media de espín (línea negra sólida) y de carga (línea roja segmentada). Aquí el flujo de AB $\Phi_{AB} = 0,5\Phi_0$ mientras que el asociado al acoplamiento espín-órbita es $\Phi_{SO} = 0,4\Phi_0$ 39

4.11. Corriente bombeada media de espín arriba (línea negra sólida) y de espín abajo (línea roja segmentada). Aquí la fase de AB y de espín-órbita son iguales $\Phi_{AB} = \Phi_{SO} = 0,4\Phi_0$ 39

Introducción

La investigación en sistemas nanoscópicos se ha centrado principalmente en el estudio de fenómenos de transporte, en donde la coherencia de fase desempeña un papel fundamental. Este campo ha ganado un enorme impulso en las últimas décadas gracias a los avances en la fabricación de dispositivos en las escalas micro y nanométrica. Conceptualmente, dispositivos nanoscópicos permiten explorar y comprender los efectos de la dinámica electrónica, la cuantización de carga y de espín y la correlación electrónica de muchos cuerpos debido a la interacción Coulombiana. Estos dispositivos exhiben fenómenos tales como el bloqueo de Coulomb, cuantización de la conductancia, efectos Fano [1], Dicke [2] y filtrado de espín. Probablemente estas propiedades desempeñarán un papel clave en el futuro desarrollo de la nanotecnología, pues es posible estudiarlas en sistemas electrónicos, como puntos, alambres y anillos cuánticos, los cuales son buenos candidatos para la manipulación, almacenamiento y transporte de información cuántica [3, 4].

Por otra parte, usualmente los sistemas en los que se inducen corrientes continuas llevan asociada una cantidad de energía disipada en respuesta a la diferencia de potencial aplicada para inducir esta corriente. Alternativamente en dispositivos de escala nanoscópica es posible generar una corriente finita a diferencia de potencial nula [12], lo que se denomina bombeo de corriente o de carga, posibilitando con ello una substancial reducción de energía disipada. Tales dispositivos, conocidos como bombas cuánticas (BC), operan mediante la variación cíclica de dos o más parámetros controlables del sistema desfasados entre sí [5, 6], o bien mediante la

variación cíclica de un único parámetro conjuntamente con la ruptura de simetrías presentes en el sistema [7], tal como la simetría de reflexión espacial o mediante la aplicación de un campo magnético que promueva un quiebre en la simetría de inversión temporal.

Otra área de la nanociencia que ha adquirido recientemente notoria relevancia es la llamada espintrónica, cuyo objeto de estudio, entre otros, está vinculado con las propiedades de transporte electrónicas dependientes de espín y sus posibles aplicaciones en el desarrollo de dispositivos electrónicos. Estos dispositivos, basados en el control y manipulación del espín electrónico, comparados con los dispositivos semiconductores convencionales, poseen ventajas potencialmente enormes, tales como un aumento notorio en la rapidez de procesamiento de datos, la no volatilidad de información almacenada y una disminución considerable en el consumo de energía. En este contexto, estudiamos un sistema nanoscópico capaz de bombear corrientes de espín de manera coherente.

El sistema que proponemos en este trabajo como generador de corrientes de carga y espín bombeadas, modela una configuración de anillo cuántico conectado a dos contactos y con dos puntos cuánticos insertados cada uno en cada brazo del anillo. Como mostraremos, en este sistema al aplicar un campo magnético conjuntamente con un acoplamiento espín-orbita, la variación cíclica del potencial de puerta del punto cuántico, logra generar una corriente neta de espín bombeada. Un sistema análogo ha sido estudiado previamente de forma teórica, pero a diferencia del presente trabajo sólo se considera el efecto producido por un flujo magnético, obteniéndose de esa forma sólo una corriente bombeada neta de carga.

Esta tesis se organiza con un primer capítulo, en donde se muestra la generalidad cualitativa del transporte y los conceptos sobre los cuales sentamos el trabajo, para luego dar a conocer en el capítulo siguiente las herramientas teóricas utilizadas. En el tercer capítulo, se da a conocer el modelo general estudiado, mostrando posteriormente los resultados obtenidos y las discusiones generadas por éstos.

Capítulo 1

Conceptos previos

En la naturaleza, los efectos cuánticos se manifiestan de manera más evidente en sistemas cuyas dimensiones son lo suficientemente pequeñas, como por ejemplo en la escala atómica. En las últimas décadas, con el progreso en el desarrollo tecnológico, ha sido posible elaborar estructuras a escala nanométrica ($\propto 10^{-9}$ m), las que llamaremos nanoestructuras, y con ellas la construcción de nanodispositivos, en los cuales, en condiciones apropiadas, se manifiestan efectos que sólo pueden ser explicados mediante la mecánica cuántica.

Sabemos que en sistemas macroscópicos no es posible que partículas pasen a través de barreras, a modo de ejemplo podemos pensar en un balón que golpea una pared reflejándose completamente. En mecánica cuántica, debido a la naturaleza ondulatoria de las partículas, es posible que éstas pasen a través de barreras, fenómeno denominado efecto túnel, en donde cada partícula que encuentre una barrera en su camino, tendrá una probabilidad de reflejarse, R , y otra de transmitirse a través de ella, T , donde es evidente que ambas deben satisfacer que $R + T = 1$.

Existen nanoestructuras en las cuales es posible observar efectos cuánticos tales como el ya citado efecto túnel. Los puntos cuánticos son un ejemplo de tales nanoestructuras, en donde los electrones son confinados en una región muy pequeña del espacio. Debido al gran confinamiento, al que son sometidos los electrones

en estos pequeños sistemas, tanto la carga como los niveles de energía se encuentran cuantizados, es por ésto que a los puntos cuánticos también se les conoce como átomos artificiales. La Fig. (1.1) muestra una imagen de uno de estos puntos cuánticos, la cual ha sido realizada mediante microscopía atómica.

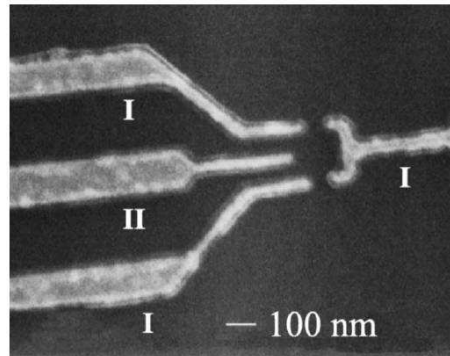


Figura 1.1: Imagen experimental de un punto cuántico. Las zonas claras denotadas con I corresponden a los contactos que proporcionan los potenciales de puerta que permiten el confinamiento del electrón, mientras que II corresponde al contacto que otorga un potencial de barrera controlable. Las zonas oscuras corresponden al continuo de energía. Ésta es una imagen realizada mediante microscopía atómica. [8]

Los electrones y en general las partículas subatómicas, poseen un grado de libertad intrínseco de momento angular llamado espín, el cual se encuentra cuantizado. Para el caso particular de los electrones, sólo podemos tener dos valores de la componente z del espín, estos son $\pm\hbar/2$, donde \hbar es la llamada constante reducida de Planck. En la actualidad, es posible utilizar nanodispositivos que explotan el grado de libertad de espín de los electrones, llamados nanodispositivos espintrónicos. En espintrónica el control de las corrientes de espín lleva a nuevas funcionalidades y mayores eficiencias que la electrónica usual, tornándose importante la obtención y detección de corrientes polarizadas en espín [9].

1.1. Efectos coherentes

En esta sección definiremos dos efectos asociados a la coherencia de los portadores, el efecto Fano y el bombeo cuántico de carga.

Como sabemos, una de las principales premisas de la coherencia cuántica, sostiene que la materia se comporta simultáneamente como partícula y como onda, lo que llamamos dualidad onda-partícula.

Mientras que una partícula posee el atributo de ocupar un lugar definido en el espacio, la onda se caracteriza por ser espacialmente extendida con periodicidad λ y por ello da lugar a fenómenos de interferencia. En el caso específico de los electrones, sus propiedades de transporte en un sistema determinado están controladas por tres longitudes características, la longitud de onda los electrones en el nivel de Fermi (λ_F), la longitud de coherencia (ξ_c) y la longitud característica del sistema (L). Para que el transporte sea coherente y con ello se manifiesten los fenómenos de interferencia derivados de la interferencia electrónica, deberá satisfacerse que $L \ll \xi_c$ y que $\lambda_F \ll \xi_c$.

Cuando existe coherencia de electrones, es posible que el transporte electrónico sea controlado mediante el efecto Aharonov-Bohm o mediante el acoplamiento espín-órbita, los cuales describiremos en la sección siguiente.

1.1.1. Efecto Fano

En física, existen numerosos ejemplos de fenómenos de resonancia, podemos mencionar ejemplos que van desde sistema clásicos como lo son el oscilador armónico amortiguado y forzado, hasta ejemplos más paradigmáticos como es el caso de la interacción radiación-materia, cuya fenomenología se encuadra bajo el dominio de la mecánica cuántica. Además, las líneas espectrales de emisión y absorción del átomo de hidrógeno, observadas por Rydberg en el año 1888, corresponden a sus frecuencias de resonancia, las cuales están determinadas por los niveles de

energía de este átomo. En un estudio más detallado realizado por Beutler [10], se observó que ciertas líneas espectrales atómicas presentaban una asimetría bastante acentuada. Siendo que este fenómeno de resonancias asimétricas es observado frecuentemente en diversos sistemas físicos, es natural preguntarse si existe una conexión entre todos ellos, y de existir esta conexión, cuál es la física subyacente que los engloba. Fue Ugo Fano (1935) quien propuso la primera explicación teórica de este fenómeno [1]. Fano sugirió la fórmula, que lleva su nombre, también conocida como fórmula de Fano-Beutler, la cual está básicamente determinada por unos pocos parámetros,

$$T(\epsilon) = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (1.1)$$

donde q es el llamado factor Fano. Esta ecuación permite describir fenómenos tan diversos como las resonancias en la dispersión de la luz por la materia, la dispersión de átomos contra átomos formando estados cuasiligados, o el transporte electrónico en hilos cuánticos acoplados a puntos cuánticos.

El efecto Fano es el resultado de la interferencia entre el estado en un canal discreto de energía y los estados correspondientes el continuo de energía. Un ejemplo claro de ello puede ser un punto cuántico embebido en un medio que presenta un continuo de energías propias. En este caso el parámetro $q \rightarrow \infty$, cuyo perfil de transmisión corresponde a una resonancia simétrica y centrada en el nivel de energía del punto cuántico, o bien un punto cuántico acoplado lateralmente al continuo, aquí $q \rightarrow 0$, con lo que el correspondiente perfil de transmisión mostrará una antirresonancia centrada también en el nivel de energía del punto cuántico. En la Fig. (1.2) es posible observar lo anteriormente descrito, donde además se muestra un perfil de transmisión antisimétrico, lo que corresponde a un q igual a la unidad, el cual puede corresponder, por ejemplo, a un anillo cuántico con puntos cuánticos embebidos en sus brazos o bien a un arreglo de puntos cuánticos acoplados entre sí, es decir una molécula artificial.

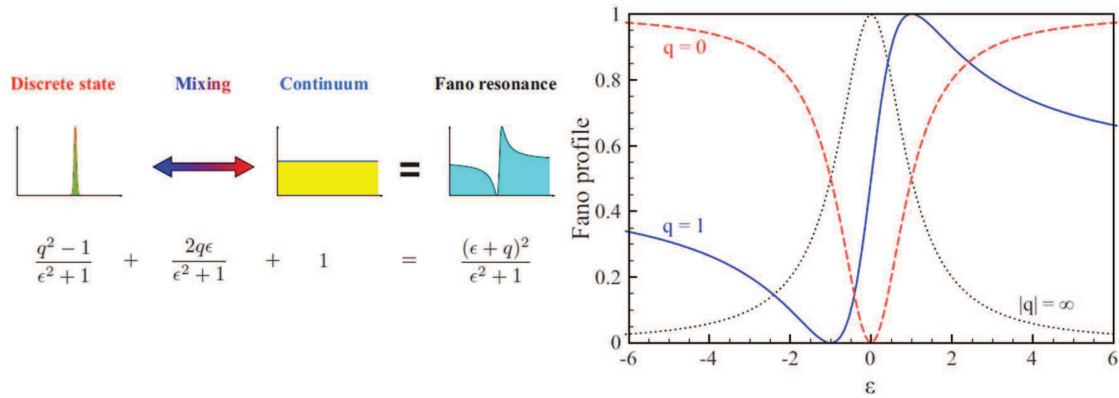


Figura 1.2: Izquierda, esquema cualitativo del efecto Fano. Derecha, perfiles Fano para distintos valores de q [11].

1.1.2. Bombeo cuántico de carga

Usualmente asociamos una corriente continua a una diferencia de potencial establecida entre dos puntos de una muestra. En mecánica cuántica es posible generar un flujo de carga continua sin la necesidad de una diferencia de potencial, efecto denominado bombeo cuántico de carga. Esto ocurre como un mecanismo de respuesta a perturbaciones presentes en el sistema, generalmente producidas por el cambio periódico de dos parámetros controlables desfasados con frecuencia ω_0 .

Es posible caracterizar dos regímenes en los cuales ocurre bombeo cuántico de carga, ambos referentes a la relación entre la frecuencia ω_0 y el recíproco del tiempo que le toma al electrón atravesar el sistema τ_T , el régimen adiabático y el no adiabático. Nos encontramos en el primer régimen cuando $\omega_0 \ll \tau_T^{-1}$ y en el segundo cuando $\omega_0 \gg \tau_T^{-1}$, también llamados en la literatura como régimen de bajas y altas frecuencias respectivamente. En el régimen adiabático el bombeo cuántico de carga ha sido bien estudiado a bajas frecuencias usando el método de la matriz de transferencia S , bajo una variación cíclica de dos parámetros controlables. La corriente bombeada fluye como respuesta a la variación cíclica de estos parámetros. A pesar de trabajos anteriores, L. E. F. Foa Torres mostró que es po-

sible utilizar un solo parámetro periódico, controlable, para obtener una corriente bombeada en este régimen de bajas frecuencias [7], lo cual es un paso importante en la comprensión y estudios de estos sistemas capaces de proporcionar bombeo.

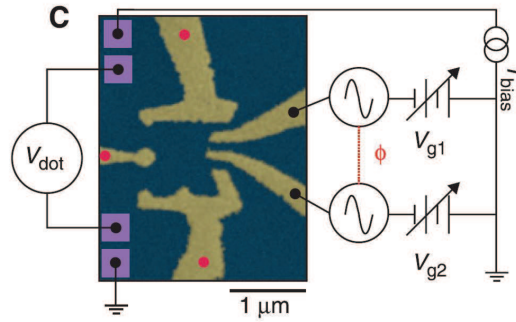


Figura 1.3: Esquema del montaje experimental para medir bombeo cuántico de carga en un punto cuántico abierto perturbado por dos parámetros desfasados en ψ , con diferencia de potencial nula [13].

La Fig. (1.3) muestra el montaje experimental del modelo más estudiado para obtener bombeo cuántico de carga, pero no por ello el único posible. A modo de ejemplo, podemos decir que también se ha estudiado el bombeo a través de nanotubos de carbono y cintas de grafeno, en ambos casos con defectos, en donde además se ha enriquecido la discusión incorporando en ella la topología de estos sistemas [14–16].

1.2. Efectos debidos a campos externos

1.2.1. Efecto Aharonov-Bohm

Clásicamente cuando una carga en movimiento se encuentra expuesta a un campo magnético, ésta se ve afectada a causa de una fuerza proporcional al producto vectorial entre su velocidad y dicho campo, llamada fuerza de Lorentz, de donde se puede desprender que al no existir el campo magnético, la carga no se ve afectada

por la fuerza de Lorentz. Por otra parte, en mecánica cuántica el movimiento de una carga está descrito por la ecuación de Schrödinger, la cual depende de forma implícita del campo magnético a través del potencial vector asociado a éste, dando lugar a comportamientos diferentes que los clásicos. Por ejemplo, supongamos que existe un campo magnético \vec{B} , con alguna componente transversal a un sistema en el cual los portadores de carga puedan moverse en cierta trayectoria cerrada, la cual no pueda ser penetrada por el campo, por ejemplo en un anillo cuántico como el de la Fig. (1.4). Que el campo magnético sea nulo sobre la trayectoria del anillo, no implica que el potencial vector asociado a él lo sea en esta misma región. Como consecuencia de esto, los desplazamientos de los portadores se ven afectados a través de una modificación sobre su probabilidad de propagación, agregando una fase (que denotaremos por Φ_{AB}) a ésta. Digamos que para cada portador no será lo mismo ir de un punto a otro por caminos distintos. La fase Φ_{AB} , la cual es proporcional en el factor e/h (donde e es la carga del electrón y h la constante de Planck) al flujo magnético a través del área que encierra dicha trayectoria cerrada, es decir $\Phi_{AB} = (e/h)\Phi_B$ [17], de donde se define a $\Phi_0 = h/e$ como el cuanto de flujo. A este fenómeno netamente cuántico se le llamó efecto Aharonov-Bohm (AB) en honor a los dos físicos que descubrieron este efecto en forma independiente [18].

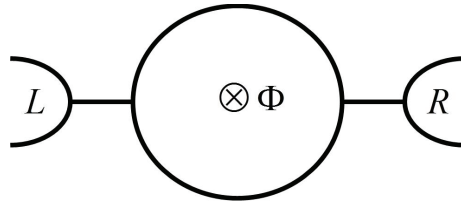


Figura 1.4: Esquema citado como ejemplo de sistema con trayectoria cerrada para el desplazamiento de los portadores.

1.2.2. Acoplamiento espín-órbita

Desde el punto de vista de la relatividad especial, cuando un electrón se mueve en presencia de un campo eléctrico, éste percibirá, en su marco de referencia, un campo magnético efectivo [19]. Cada electrón posee un momento magnético intrínseco, el cual interactúa con este campo magnético efectivo. Esto fue notado por Aharonov y Casher [20] al establecer que en partículas neutras, con momento magnético no nulo, se hace presente un efecto análogo al efecto Aharonov-Bohm para partículas cargadas, es decir el agregar una fase geométrica a su desplazamiento, efecto sólo atribuible al espín, llamado Aharonov-Casher (AC). En el caso de los electrones, el momento magnético se encuentra ligado a su grado de libertad de espín, es decir que tenemos uno ligado a espín *arriba* y otro a espín *abajo*, lo que hace posible distinguir el comportamiento para electrones con diferente espín. Como un electrón es una partícula cargada, podemos decir que el efecto AC es un desdoblamiento de la fase en el efecto AB.

El acoplamiento espín-órbita es llamado con mayor frecuencia como interacción Rashba, pues un par de décadas antes que Aharonov-Casher, E. I. Rashba notó este efecto [21]. En sistemas mesoscópicos, como el que se estudia en este trabajo de tesis, esta interacción puede controlarse de forma experimental al incluir un campo (o potencial) eléctrico en el sistema, como los estudiados en las referencias [25, 26].

El efecto AB descrito anteriormente quiebra la simetría de inversión temporal (TRS, por sus siglas en inglés), mientras que el acoplamiento espín-órbita, provoca el rompimiento de la degeneración de espín.

Capítulo 2

Formalismo teórico

En este capítulo se muestran las herramientas teóricas usadas en el cálculo de las propiedades mecánico-cuánticas, que permitirán resolver de forma completa el problema.

2.1. Teoría de Floquet

Para modelar el sistema que se propone como bomba cuántica, se considera su descripción mediante un Hamiltoniano temporalmente periódico, es por esto apropiado utilizar la llamada teoría de Floquet [22] (o Sambe [23]), que es el análogo temporal del teorema de Bloch, utilizado en sistemas con periodicidad espacial, como es el caso de las estructuras cristalinas. Esto es

$$H(t) = H(t + \tau) \tag{2.1}$$

$$\left(H(x, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(x, t) = 0 \tag{2.2}$$

donde τ es el periodo del sistema. Entonces, usando esta analogía se dice que existe una solución a la Ec. (2.2) de la forma

$$\psi_\alpha(x, t) = \exp(-i\varepsilon_\alpha t/\hbar) \phi_\alpha(x, t), \tag{2.3}$$

donde ε_α son llamadas cuasienergías del sistema, mientras que $\phi_\alpha(x, t)$ son los estados o modos de Floquet, en donde es fácil verificar que éstos poseen la misma periodicidad temporal que el Hamiltoniano

$$\phi_\alpha(x, t) = \phi_\alpha(x, t + \tau). \quad (2.4)$$

Acá es posible distinguir una separación de las escalas dinámicas del problema, una a largos tiempos (más grandes que el periodo) y otra para tiempos cortos, dentro de un periodo. Buscando una ecuación con una forma similar a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, es que se define el Hamiltoniano de Floquet como

$$H_F \equiv H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (2.5)$$

obteniendo así una ecuación análoga a la de Schrödinger independiente del tiempo, donde los modos de Floquet desempeñan el papel de los autoestados del Hamiltoniano H_F con sus respectivos autovalores, sus cuasienergías, es decir

$$H_F(x, t)\phi_\alpha(x, t) = \varepsilon_\alpha\phi_\alpha(x, t). \quad (2.6)$$

Para obtener los elementos de matriz del Hamiltoniano de Floquet se utiliza la periodicidad de los estados de Floquet mostrada en la Ec. (2.4). Con ésto es posible expandir el estado de Floquet de la siguiente forma

$$|\phi_\alpha(t)\rangle = \sum_n c_{n,\mu}^\alpha e^{i\omega_0 n t} |\mu\rangle, \quad (2.7)$$

donde $\omega_0 = 2\pi/\tau$. Siguiendo esta misma lógica, como el Hamiltoniano del modelo presenta la misma periodicidad que los estados de Floquet (Ec. (2.2)), es posible expandirlo como

$$H(t) = \sum_l H_{\mu,\nu}^l e^{i\omega_0 l t} |\nu\rangle\langle\mu|. \quad (2.8)$$

Al operar el lado derecho de la Ec. (2.5) con (2.7) y reemplazar en la Ec. (2.6), se obtienen los elementos del Hamiltoniano de Floquet en términos de la base

de un nuevo espacio vectorial compuesto por el espacio de Hilbert usual (\mathcal{R}) y el espacio temporal de todas las funciones periódicas con periodo τ (\mathcal{T}), es decir $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$, espacio llamado espacio de Floquet. La base asociada al espacio \mathcal{R} es $\{|\mu\rangle\}$ mientras que la de \mathcal{T} es $|n\rangle = \exp[i\omega_0 nt]$, con sus respectivas condiciones de ortonormalidad. Entonces, la base para dicho nuevo espacio vectorial compuesto es $|\nu, n\rangle = |\nu\rangle \otimes |n\rangle$, con lo que los elementos de matriz de H_F vienen dados por

$$\langle \mu, m | H_F | \nu, n \rangle = H_{\mu, \nu}^{(m-n)} + n\hbar\omega_0 \delta_{\mu, \nu} \delta_{m, n}, \quad (2.9)$$

donde $H_{\mu, \nu}^{(m-n)}$ son las componentes de Fourier de $H_{\mu, \nu}$, las cuales están dadas por

$$\langle \mu | H(t) | \nu \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} H_{\mu, \nu}^{(n)} e^{in\omega_0 t}. \quad (2.10)$$

El Hamiltoniano de Floquet es hermítico y a causa de ello sus autovalores, cuasienergías, son reales y además únicos sólo cuando difieren en múltiplos enteros de $\hbar\omega_0$, es decir

$$\varepsilon'_\alpha = \varepsilon_\alpha + n\hbar\omega_0, \quad (2.11)$$

en donde ε'_α son todas las soluciones físicamente equivalentes. Los autovalores entonces pueden habitar en un análogo temporal a la primera zona de Brillouin, la cual viene dada por

$$-\frac{\hbar\omega_0}{2} \leq \varepsilon \leq \frac{\hbar\omega_0}{2}. \quad (2.12)$$

2.2. Funciones de Green

El formalismo de las funciones de Green permite resolver problemas. Sólo por mencionar algunas de sus aplicaciones, en física clásica por ejemplo, las funciones de Green son usadas como método de resolución de ecuaciones diferenciales no homogéneas. A modo de ilustración, considérese el ejemplo de la electrodinámica clásica, donde conocer las funciones de Green equivale a tener resueltas las ecuaciones de Maxwell para cualquier tipos de fuentes del campo electromagnético, es decir, para cualquier distribución de carga y/o corriente.

En el contexto de la física de la materia condensada, las funciones de Green son especialmente útiles, puesto que contienen gran cantidad de información relativa al sistema y sus propiedades, tanto en equilibrio termodinámico como fuera de él. La necesidad real de utilizar las funciones de Green se hace más evidente cuando en el sistema bajo estudio son considerados efectos debidos a las interacciones de muchos cuerpos, tales como la interacción electrón–electrón o la interacción electrón–fonón. Estas interacciones dan lugar a excitaciones cerca del nivel de Fermi, llamadas cuasipartículas, cuyas características pueden ser entendidas a partir de las propiedades de las funciones de Green.

En mecánica cuántica no relativista, la función de Green (G) satisface la ecuación de Schrödinger no homogénea,

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)G(x, t; x', t') = \delta(x - x')\delta(t - t'), \quad (2.13)$$

es decir, la función de Green es, en términos simples, el propagador del sistema.

Formalmente la solución de la Ec. (2.13) puede ser escrita como

$$G = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)^{-1}, \quad (2.14)$$

o alternativamente, tomando la transformada de Fourier en el tiempo, la Ec. (2.14) toma la forma

$$G = [E - H]^{-1}. \quad (2.15)$$

Comenzando de la Ec. (2.15), se puede obtener información relevante como la densidad de estados o las resonancias del sistema, a partir de la parte imaginaria de la función de Green o de sus polos.

Cabe mencionar que se pueden distinguir dos tipos de funciones de Green, una correspondiente a las soluciones de ondas que se alejan del punto donde se genera la perturbación, llamada función de Green retardada (G_r) y la otra correspondientes a las ondas que se acercan a la perturbación, llamada función de Green avanzada

(G_a) , las cuales se encuentran relacionadas entre sí a través de su hermítico conjugado, es decir $G_r = [G_a]^\dagger$. Por simplicidad de notación, se considerará a G como la función de Green retardada del sistema y se referirá a ella simplemente como función de Green.

Por otra parte, también es posible obtener la función de Green de un sistema a través del operador evolución temporal del mismo, el cual está definido por las relaciones

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (2.16)$$

$$U(t_0, t_0) = 1, \quad (2.17)$$

en donde t_0 es el tiempo inicial de la evolución del sistema y $|\psi(t)\rangle$ es un estado arbitrario en un tiempo t , tal que $t > t_0$.

El sistema propuesto presenta periodicidad temporal, por lo que considerando la teoría de Floquet, se define la función de Green–Floquet como

$$G_F = [E - H_F]^{-1}. \quad (2.18)$$

En el presente trabajo, como se muestra en la próxima sección, la función de Green–Floquet será utilizada para el cálculo de las propiedades de transporte electrónico, tales como la corriente y transmitancia del sistema propuesto.

2.3. Transmitancia y corriente media

Existen diferentes aproximaciones teóricas desde donde abordar la variada gama de problemas relacionados con el cálculo y descripción de las propiedades de transporte electrónico en sistemas nanoscópicos. En problemas con interacción tipo electrón-electrón o electrón-fonón, una técnica apropiada en el cálculo de funciones de Green será el método de la ecuación de movimiento, mientras que en el caso fuera del equilibrio termodinámico, será más conveniente utilizar el formalismo de

Keldysh. En los casos como el tratado en el presente trabajo, donde se consideran problemas de un solo cuerpo, con el Hamiltoniano periódicamente dependiente en el tiempo, el uso del teorema de Floquet combinado con las funciones de Green sin duda es una de las formas más simple y elegante de abordar el problema. En este contexto, siguiendo la línea expuesta en la referencia [24], la fórmula general de la corriente media, a partir de la transmitancia, que usaremos en el caso de un sistema conectado a dos contactos, que denominaremos por razones obvias como derecho e izquierdo, está dada por,

$$\bar{I}_\sigma = \frac{e}{h} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int [T_{L \rightarrow R, \sigma}^{(n)}(\varepsilon) f_R(\varepsilon) - T_{R \rightarrow L, \sigma}^{(n)}(\varepsilon) f_L(\varepsilon)] d\varepsilon, \quad (2.19)$$

donde $f_{L(R)}(\varepsilon)$ es la distribución de Fermi en el contacto izquierdo(derecho). Además, $T_{L \rightarrow R, \sigma}^{(n)}(\varepsilon)$ ($T_{R \rightarrow L, \sigma}^{(n)}(\varepsilon)$) es la transmitancia o probabilidad de que un electrón con espín σ incidente con energía ε se transmita desde el contacto izquierdo al derecho (derecho al izquierdo) bajo la absorción de energía $n\hbar\omega_0$ o emisión de energía $-n\hbar\omega_0$ usando $n < 0$. Estas probabilidades de transmisión de izquierda a derecha están dadas por

$$T_{L \rightarrow R, \sigma}^{(n)}(\varepsilon) = 4\Gamma_R(\varepsilon + n\hbar\omega_0) |G_{LR, \sigma}^{(n)}(\varepsilon)|^2 \Gamma_L(\varepsilon), \quad (2.20)$$

mientras que para obtener la transmitancia en el sentido inverso, de derecha a izquierda, se debe intercambiar las posiciones de los índices L y R . $G_{LR, \sigma}^{(n)}$ son las componentes de Fourier de la descomposición de la función de Green. Además las cantidades $\Gamma_{L(R)}(\varepsilon)$ vienen dadas por la parte imaginaria de las autoenergías $\Sigma_{L(R)}$ del contacto izquierdo(derecho), es decir $\Gamma_{L(R)} = -\text{Im}\Sigma_{L(R)}$.

Por otra parte, se define la corriente de espín media, como el número de electrones que abandonan la región de dispersión con espín arriba sustrayéndole el número de electrones que abandonan la región de dispersión con espín abajo, es decir

$$\bar{I}_{\text{es}} \equiv \bar{I}_\uparrow - \bar{I}_\downarrow, \quad (2.21)$$

de donde también podemos definir la corriente media de carga, en relación a las corrientes medias diferenciadas en espín, como

$$\bar{I}_{\text{car}} \equiv \bar{I}_{\uparrow} + \bar{I}_{\downarrow}. \quad (2.22)$$

Capítulo 3

Modelo

En este capítulo se da a conocer el modelo estudiado en este trabajo de tesis. Un modelo comparable ha sido reportado en la literatura, en el cual se muestra que es posible obtener corriente bombeada de carga bajo la variación periódica de un único parámetro dependiente del tiempo al incluir un campo magnético estacionario transversal al sistema [7]. Se propone un modelo en el cual sea posible controlar el sentido de la corriente bombeada así como también explorar corrientes bombeadas de espín, para lo cual se incorporan aspectos nuevos al modelo citado anteriormente.

3.1. Sistema temporalmente periódico

El modelo consiste en un anillo cuántico, el cual contiene en cada uno de sus brazos un punto cuántico embebido en él, mientras es atravesado a la vez de forma transversal por un flujo debido a la presencia de un campo magnético estacionario. Uno de estos puntos cuánticos es perturbado por una fuente de voltaje alterno, la cual oscila con frecuencia ω_0 , como se muestra en la Fig. (3.1).

El modelo está descrito por un Hamiltoniano de Anderson no interactuante, el cual considera las contribuciones de los contactos y de los puntos cuánticos (pc)

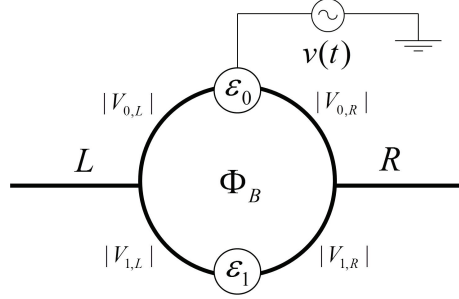


Figura 3.1: Modelo propuesto para producir bombeo cuántico de carga y espín.

por separado, además del acoplamiento entre los puntos cuánticos y los contactos, es decir

$$H(t) = H_{\text{contactos}} + H_{\text{muestra}}(t) + H_{\text{muestra-contactos}}, \quad (3.1)$$

con

$$H_{\text{muestra}} = \varepsilon_0(t) \sum_{\sigma} d_{0,\sigma}^{\dagger} d_{0,\sigma} + \varepsilon_1 \sum_{\sigma} d_{1,\sigma}^{\dagger} d_{1,\sigma} + \text{c.c.} \quad (3.2)$$

$$H_{\text{contactos}} = \sum_{k_L,\sigma} \varepsilon_{k_L,\sigma} c_{k_L,\sigma}^{\dagger} c_{k_L,\sigma} \quad (3.3)$$

$$H_{\text{muestra-contactos}} = \sum_{k_L,\sigma} V_{L,0}^{\sigma} c_{k_L,\sigma}^{\dagger} d_{0,\sigma} + V_{R,0} \sum_{k_R,\sigma} c_{k_R,\sigma}^{\dagger} d_{0,\sigma} \quad (3.4)$$

$$+ V_{L,1} \sum_{k_L,\sigma} c_{k_L,\sigma}^{\dagger} d_{1,\sigma} + V_{R,1} \sum_{k_R,\sigma} c_{k_R,\sigma}^{\dagger} d_{1,\sigma} + \text{c.c.} \quad (3.5)$$

de donde se puede escribir $H(t)$ en forma matricial como

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} E_L + \Sigma_L & V_{0,L}^{\sigma} & V_{1,L} & 0 \\ V_{L,0}^{\sigma} & \varepsilon_0(t) & 0 & V_{0,R} \\ V_{L,1} & 0 & \varepsilon_1 & V_{1,R} \\ 0 & V_{R,0} & V_{R,1} & E_R + \Sigma_R \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

donde se ha considerado que cada punto cuántico tiene sólo un nivel discreto de energía y se ha despreciado la correlación entre electrones. La energía del punto cuántico perturbado por el potencial dependiente del tiempo es $\varepsilon_0(t) = \varepsilon_0 + v \cos(\omega_0 t)$, mientras que la del no perturbado es denotada por ε_1 . La contribución del campo magnético a través del efecto Aharonov-Bohm, así como también

del acoplamiento espín-órbita será considerada en el segmento de brazo del anillo que acopla el sitio izquierdo con el punto cuántico perturbado por potencial dependiente del tiempo (QD0)

$$V_{0,L}^\sigma = V_0 \exp[i2\pi(\Phi_{AB} + \sigma\Phi_{SO})/\Phi_0], \quad (3.7)$$

donde σ es el índice de espín ($\sigma = \uparrow, \downarrow$ o $1, -1$), Φ_{AB} y Φ_{SO} son las fases debidas a los efectos Aharonov-Bohm y acoplamiento espín-órbita respectivamente, descritos en el capítulo 1. $V_{L,0}^\sigma = (V_{0,L}^\sigma)^*$ y además $|V_{L,0}^\sigma| = |V_{0,L}^\sigma| = V_0$, con V_0 real. El Hamiltoniano es periódico, con periodo $\tau = 2\pi/\omega_0$, por lo cual sobre él es posible utilizar la teoría de Floquet descrita en el capítulo 2.

3.2. Utilizando la teoría de Floquet

A partir de las Ecs. (2.9) y (2.10), se obtiene el Hamiltoniano de Floquet H_F para nuestro sistema, el cual es independiente del tiempo. H_F en apariencia tiene la forma del Hamiltoniano mostrado en la ecuación (3.6), donde cada uno de sus elementos es ahora un bloque matricial cuadrado de orden $N = 2n + 1$, en donde n indica el número de fotones emitidos ($n < 0$) o absorbidos ($n > 0$) por el sistema.

Entonces, H_F tiene la siguiente forma matricial

$$\hat{H}_F = \begin{pmatrix} \hat{E}_L + \hat{\Sigma}_L & \hat{V}_{0,L}^\sigma & \hat{V}_{L,1} & \hat{0} \\ \hat{V}_{L,0}^\sigma & \hat{\varepsilon}_0 & \hat{0} & \hat{V}_{0,R} \\ \hat{V}_{L,1} & \hat{0} & \hat{\varepsilon}_1 & \hat{V}_{1,R} \\ \hat{0} & \hat{V}_{R,0} & \hat{V}_{R,1} & \hat{E}_R + \hat{\Sigma}_R \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Este Hamiltoniano de Floquet se puede interpretar al observar los resultados dados por las ecuaciones que describen cada uno de los elementos de matriz de H_F mostradas en el capítulo 2, lo cual es descrito a continuación. Como se indica en la Ec. (2.11), en el espacio de Floquet existen soluciones físicamente equivalentes para el problema de autovalores propuesto en la Ec. (2.6), cada una de ellas indizadas

con n , de ahí la idea de pensar en nuevos canales para el sistema en donde las energías se vean modificadas en cantidades enteras de $\hbar\omega_0$, lo cual se asocia a una absorción (o emisión) de energía en cada uno de estos canales, los cuales se llamarán canales de Floquet. Cada canal de Floquet es una copia virtual del modelo original, lo que se puede afirmar al apreciar cada elemento de matriz de H_F .

Las matrices de acoplamientos son matrices diagonales, lo que sugiere que sólo existe acoplamiento entre sitios propios de cada canal de Floquet

$$\hat{V}_{L(R),1} = \hat{V}_{1,L(R)} = V_1 \hat{I} \quad (3.9)$$

$$\hat{V}_{R,0} = \hat{V}_{0,R} = V_0 \hat{I} \quad (3.10)$$

$$\hat{V}_{L,0}^\sigma = [\hat{V}_{0,L}^\sigma]^\dagger = V_0 \exp[i2\pi(\Phi_{AB} + \sigma\Phi_{SO})/\Phi_0] \hat{I}, \quad (3.11)$$

donde \hat{I} es la matriz identidad del orden correspondiente. Las matrices energías de los sitios izquierdo y derecho del anillo, \hat{E}_L y \hat{E}_R y las correcciones debidas a los contactos izquierdo y derecho, corresponden a las autoenergías de los contactos $\hat{\Sigma}_L$ y $\hat{\Sigma}_R$ respectivamente, que son también matrices diagonales, cuyos elementos se ven afectados por la emisión (o absorción) de radiación en la forma

$$\hat{E}_{L(R)} = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & E_{L(R)} - \hbar\omega_0 & & & \\ & & & E_{L(R)} & & \\ & & & & E_{L(R)} + \hbar\omega_0 & \ddots \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\hat{\Sigma}_{L(R)} = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \Sigma_{L(R)}(\varepsilon + \hbar\omega_0) & & & \\ & & & \Sigma_{L(R)}(\varepsilon) & & \\ & & & & \Sigma_{L(R)}(\varepsilon - \hbar\omega_0) & \ddots \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

donde

$$\Sigma_{L(R)}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - 4\gamma_{L(R)}^2}}{2}, \quad (3.14)$$

es decir, que ambos contactos son considerados como cadenas semi infinitas de sitios discretos con energía $E_0 = 0$ y acoplamiento $\gamma_{L(R)}$ entre sitios de la cadena izquierda(derecha).

La matriz energía asociada al punto cuántico sin perturbación es una matriz diagonal, lo que indica que cada una de las copias de éste sólo tiene conexiones dentro del canal de Floquet en el que se encuentra y no con los otros, esto a diferencia de la matriz energía asociada al punto cuántico perturbado, pues cada copia de éste está conectada con sus copias vecinas más próximas, es decir que cada canal de Floquet está conectado con los canales de Floquet que son primeros vecinos a través de éstas réplicas, todo esto es interpretado a partir de su forma tridiagonal. Ambas matrices vienen dadas por

$$\hat{\varepsilon}_1 = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & \varepsilon_1 - \hbar\omega_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_1 + \hbar\omega_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$\hat{\varepsilon}_0 = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & \varepsilon_0 - \hbar\omega_0 & v/2 & 0 & 0 \\ 0 & v/2 & \varepsilon_0 & v/2 & 0 \\ 0 & 0 & v/2 & \varepsilon_0 + \hbar\omega_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

En resumen, el efecto del potencial alterno perturbando al punto cuántico con energía ε_0 del sistema, es el de crear N nuevos canales virtuales en el mismo, nombrados como canales de Floquet, que naturalmente participan en el transporte. Cada uno de ellos es individualizado con un índice n , lo que quiere denotar que en

el n -ésimo canal, el transporte se encuentra asistido por la absorción de radiación en una cantidad $n\hbar\omega_0$ (o por emisión en el caso de $n < 0$). Un esquema cualitativo de lo descrito anteriormente en palabras se muestra en la Fig. (3.2).

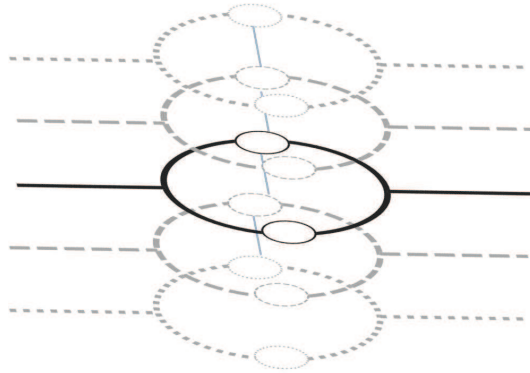


Figura 3.2: Canales de Floquet.

A partir de las ecuaciones anteriores y de la Fig. (3.2), notamos que la dimensión de H_F dependerá del número de canales de Floquet que se consideren en el sistema. Para controlar el crecimiento desmesurado de la dimensión, se considera un modelo efectivo construido a través de un proceso de decimación del modelo original, lo cual se describe en la siguiente sección. Además, considerando la teoría de perturbaciones a segundo orden, es posible establecer un criterio para una convergencia al utilizar una baja cantidad de canales de Floquet, éste es el siguiente

$$\left(\frac{v}{\omega_0}\right)^2 \ll 1. \quad (3.17)$$

Este quiere decir que controlando la magnitud del potencial temporalmente periódico y la frecuencia del mismo, es posible lograr una convergencia rápida, lo cuál es útil para disminuir los tiempos computacionales empleados en los cálculos.

3.3. Modelo decimado

El obtener un modelo efectivo, decimando el original, permite reducir el Hamiltoniano de Floquet a un Hamiltoniano de Floquet efectivo, pasando de tener un Hamiltoniano de 4 x 4 bloques matriciales a uno de 2 x 2 bloques matriciales. El proceso de decimación es muy utilizado en general en la física, permite trabajar sobre modelos más simples que son equivalentes a otros más complejos. En esta oportunidad se decimará resolviendo un problema de autovalores para H_F , reacomodando los términos con el fin obtener un Hamiltoniano de Floquet efectivo de la forma

$$\hat{H}_F^{ef} = \begin{pmatrix} \hat{E}_L^{ef} & \hat{V}_{LR}^{ef} \\ \hat{V}_{RL}^{ef} & \hat{E}_R^{ef} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

donde cada una de las entradas diagonales vienen dadas por

$$\hat{E}_{L(R)}^{ef} = \hat{E}_{L(R)} + \hat{\Sigma}_{L(R)} + \hat{V}_{L(R),0}[\varepsilon\hat{I} - \hat{\varepsilon}_0]^{-1}\hat{V}_{0,L(R)} + \hat{V}_{L(R),1}[\varepsilon\hat{I} - \hat{\varepsilon}_1]^{-1}\hat{V}_{1,L(R)}, \quad (3.19)$$

mientras que las no diagonales se obtienen a partir de

$$\hat{V}_{LR(RL)}^{ef} = \hat{V}_{L(R),0}[\varepsilon\hat{I} - \hat{\varepsilon}_0]^{-1}\hat{V}_{R(L),0} + \hat{V}_{L(R),1}[\varepsilon\hat{I} - \hat{\varepsilon}_1]^{-1}\hat{V}_{R(L),1} \quad (3.20)$$

Con este modelo decimado se construye la función de Green correspondiente $G_F^{ef} = [\varepsilon\hat{I} - H_F^{ef}]^{-1}$ y con ella las propiedades de transporte estudiadas en éste trabajo.

3.4. Arreglo lateral

Adicionalmente, se ha considerado acoplar el punto cuántico no perturbado a un arreglo lateral, es decir conectar ε_1 con variados estados posibles. El arreglo considerado es una cadena lineal finita y ordenada de N_c sitios con energía ε_c conectados entre sí con un acoplamiento de magnitud t_p , la cual está descrita por el Hamiltoniano

$$H_{\text{cadena}} = \sum_{i=1}^{N_c} \varepsilon_i d_i^\dagger d_i + \sum_{j=1}^{N_c-1} t_p d_j^\dagger d_{j+1}, \quad (3.21)$$

similar a la utilizada por P. A. Orellana et al. [28] para estudiar la conductancia a través de un alambre cuántico donde este arreglo está conectado de manera lateral. El modelo utilizado se muestra de manera esquemática en la Fig. (3.3)

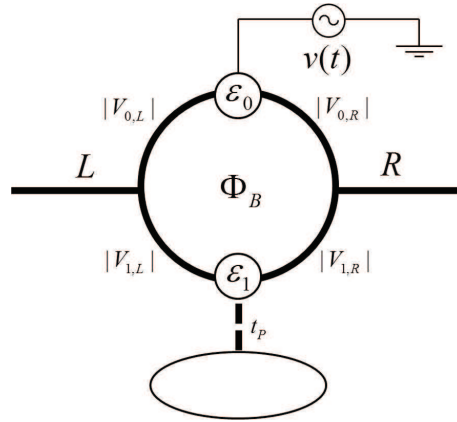


Figura 3.3: Modelo propuesto para producir bombeo cuántico de carga y espín, acoplado lateralmente a una cadena finita y ordenada a través del punto cuántico no perturbado.

Al incluir este arreglo, el espectro del sistema se ve modificado. Esta modificación se debe al aumentar la cantidad de estados posibles en el sistema. Para esta cadena finita se puede utilizar un proceso de decimación recursivo, corrigiendo la energía ε_1 de la siguiente forma

$$\tilde{\varepsilon}_1(\varepsilon) = \varepsilon_1 - \frac{t_p^2}{Q_{\text{cadena}}(\varepsilon)}, \quad (3.22)$$

con

$$Q_{\text{cadena}}(\varepsilon) = \varepsilon - \varepsilon_c - \frac{\gamma^2}{\varepsilon - \varepsilon_c - \frac{\gamma^2}{\varepsilon - \varepsilon_c \dots}}, \quad (3.23)$$

donde t_p es acoplamiento entre el punto cuántico no perturbado y la cadena, γ es el acoplamiento entre sitios de la cadena. Con la inclusión de la cadena lineal, se ven modificadas las entradas diagonales de la matriz ligada al punto cuántico no

perturbado, $\hat{\varepsilon}_1$. Dicha modificación resulta en

$$\hat{\varepsilon}_1(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \tilde{\varepsilon}_1(\varepsilon - \hbar\omega) - \hbar\omega_0 & & & \\ & & 0 & \tilde{\varepsilon}_1(\varepsilon) & & \\ & & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_1(\varepsilon + \hbar\omega) + \hbar\omega_0 & \ddots \\ & & 0 & & & \ddots \\ & & 0 & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

donde ya se ha considerado la teoría de Floquet.

Capítulo 4

Resultados

En este capítulo se dan a conocer los resultados de este trabajo, primero describiendo lo obtenido para el bombeo cuántico de carga, para luego pasar al bombeo cuántico de espín. De aquí en adelante se considera que la frecuencia de la fuente de voltaje alterno es tal que $\hbar\omega_0 = 0,2$ eV y que la magnitud de la misma será 0,07 V. Además, consideramos que ambos contactos se encuentran en equilibrio termodinámico, es decir $f_L(\varepsilon) = f_R(\varepsilon) = f(\varepsilon)$ y que son cadenas discretas semi infinitas con sitios discretos de energías E_0 acoplados entre ellos mediante un acoplamiento γ .

4.1. Bombeo cuántico de carga

Comenzando la descripción de los resultados, se muestra la transmisión total (sumando la contribución de cada canal de Floquet) de izquierda a derecha y de derecha a izquierda por separado en la Fig. (4.1) en el panel izquierdo, mientras que en el derecho se muestra una ampliación de la zona en donde se observa que existe una diferencia entre estas transmisiones, calculadas en sentidos opuestos. La forma del perfil de transmisión total en un sentido (o el opuesto), sin resonancias o antirresonancias delgadas apreciables, no quiere decir que no existan en cada

canal de Floquet de forma individual, pues cuando ocurren antirresonancias, por ejemplo en canales sobre el central, aparecen resonancias finitas en los otros canales, inferiores al central, en las mismas energías, por lo que al considerar la suma de todos estos canales, antirresonancias y resonancias se complementan. Ésto se debe al desplazamiento de los niveles de energía en cantidades enteras proporcionales a $\hbar\omega_0$ en cada uno de los ya mencionados canales de Floquet.

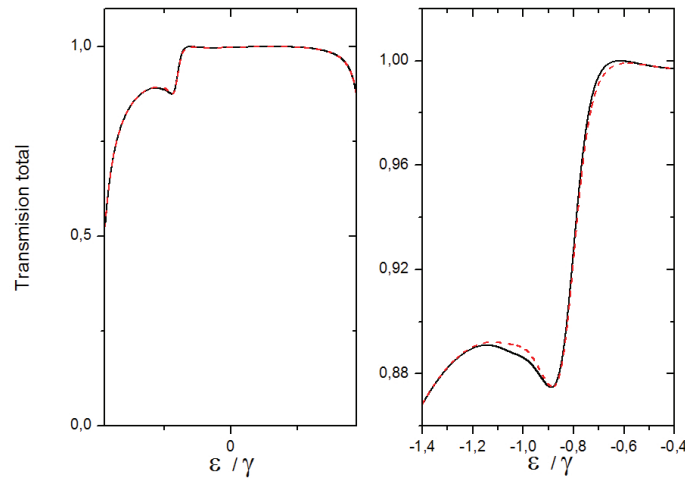


Figura 4.1: Transmisiones totales izquierda–derecha y derecha–izquierda con $V_0 = \gamma/2$ y $\Phi = 0,1\Phi_0$. La línea roja segmentada es para transmisión de derecha a izquierda y la línea negra sólida es para la transmisión de izquierda a derecha.

Con la intención de cuantificar la diferencia existente entre transmisiones totales en sentidos opuestos, se muestra la Fig. (4.2), donde se observa la diferencia entre las transmisiones totales izquierda-derecha y derecha-izquierda, es decir un factor del integrando de la Ec. (2.19), para el caso de flujo magnético nulo y otros dos casos con flujos magnéticos no nulos. Por otro lado, en la Fig. (4.3) se muestra la corriente media de carga bombeada para tres valores diferentes de flujo magnético a través del anillo, uno de ellos nulo. A partir de estas figuras, es posible notar que al no existir un flujo magnético a través del anillo no se obtiene corriente bombeada de carga, lo que es posible explicar diciendo que no existe ningún

quiebre de simetrías en el sistema, por lo que no hay diferencia entre las transmisiones de izquierda-derecha y derecha-izquierda, independiente de los valores de los otros parámetros utilizados (línea roja segmentada en la Fig. (4.2)). Una vez establecido un flujo magnético no nulo, es posible apreciar una corriente bombeada como consecuencia de quebrar la simetría de inversión temporal, donde además se puede notar que de la fase asociada al flujo magnético a través del anillo, depende el sentido en el que fluya la carga bombeada.

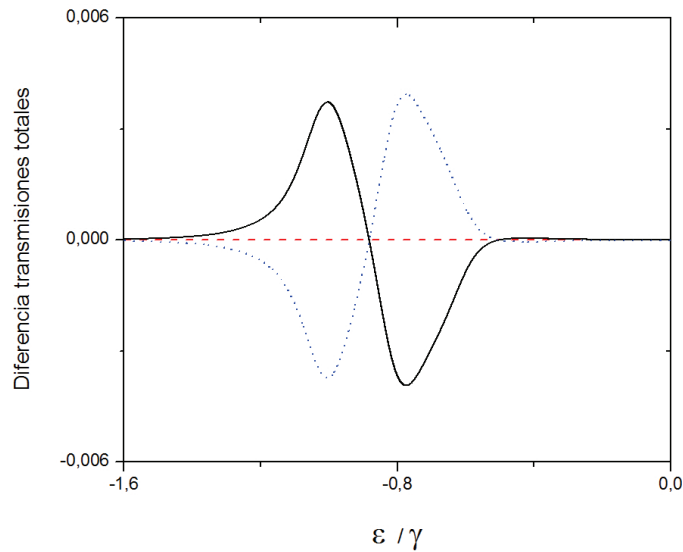


Figura 4.2: Diferencia entre transmisiones totales izquierda-derecha y derecha-izquierda con $V_0 = \gamma/2$. La línea roja segmentada es para $\Phi = 0$, la línea negra sólida es para $\Phi = 0,1\Phi_0$ y la línea azul punteada es para $\Phi = 0,9\Phi_0$.

Se considera que las magnitudes de los acoplamientos ubicados en cada brazo son idénticas, es decir que el punto cuántico no perturbado, embebido en el brazo inferior del anillo, está acoplado de la misma forma a la izquierda como a la derecha y de la misma manera para el punto cuántico perturbado. En la Fig. (4.4) se estudia la contribución de los acoplamientos ubicados en el brazo superior del anillo, de magnitudes V_0 , donde se ve que una magnitud en torno a los $V_0 = 0,25\gamma$ establece una cota superior a la corriente media de carga bombeada. Además, se nota que

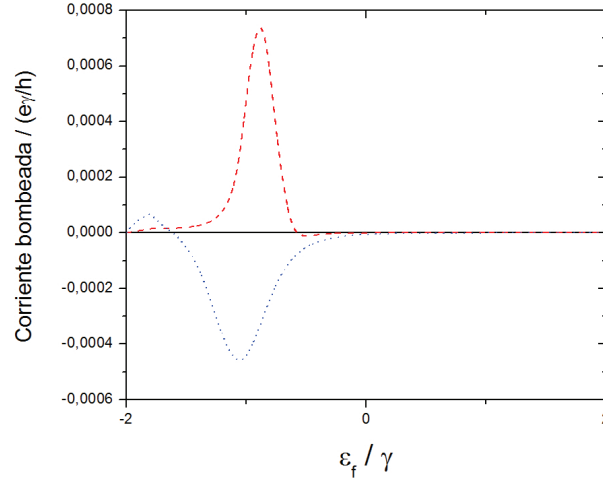


Figura 4.3: Corriente bombeada media de carga para $\Phi = 0$ (línea negra sólida), $\Phi = 0,1\Phi_0$ (línea roja segmentada) y $\Phi = 0,3\Phi_0$ (línea azul punteada). Aquí la energía del punto cuántico perturbado es $\varepsilon_0 = -\gamma$ y del no perturbado $\varepsilon_1 = E_0 = 0$. Además, $V_0 = \gamma/2$ y todos los otros acoplamientos en el sistema son γ .

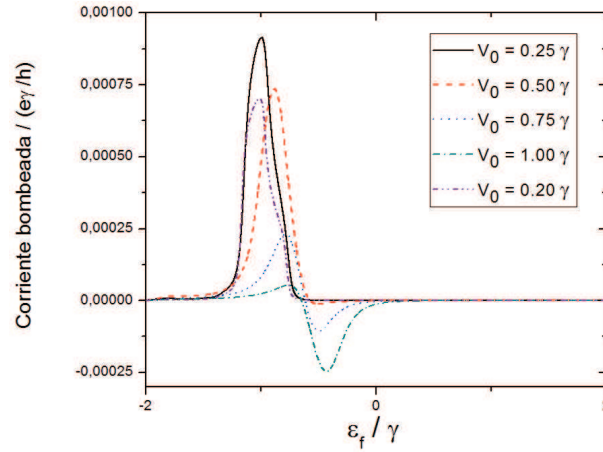


Figura 4.4: Corriente bombeada media de carga para diferentes valores de la magnitud del acoplamiento al punto cuántico perturbado (QD0), siendo la misma tanto a la izquierda como a la derecha, considerando un flujo magnético de $\Phi = 0,1\Phi_0$.

modificar V_0 implica desplazar el punto resonante en el eje de la energía de Fermi e incluso para algunos valores se aprecia el cambio en el sentido del flujo de carga,

siendo el punto de inflexión un valor específico de la energía de Fermi.

Se sabe que experimentalmente es posible controlar los niveles de energías en los puntos cuánticos, es por eso que se estudia la corriente bombeada para diferentes valores de la energía del punto cuántico perturbado, estando el no perturbado de forma fija. La Fig. (4.5) muestra la corriente bombeada para diferentes energías del punto cuántico perturbado, en donde se nota que manipulando este parámetro es posible cambiar el sentido de la corriente bombeada, diciendo que si la energía del punto cuántico perturbado se encuentra en la zona central de la banda, fluye en un sentido y en caso contrario, cuando se encuentra en los extremos, fluye en el sentido opuesto. Por otro lado, se aprecia también un aumento importante en el máximo de la curva de corriente bombeada, cuando las energías de ambos puntos cuánticos, perturbado y no perturbado, coinciden y cuando difieren en una cantidad $3\gamma/2$. En ambos casos se nota un comportamiento simétrico.

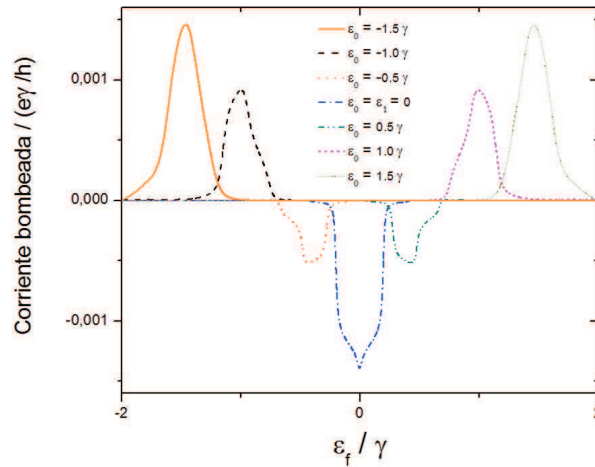


Figura 4.5: Corriente bombeada media de carga para diferentes valores de la energía del punto cuántico perturbado (QD0), siendo la del no perturbado $\varepsilon = E_0 = 0$, considerando un flujo magnético de $\Phi = 0,1\Phi_0$ y un acoplamiento $V_0 = 0,25\gamma$.

En la Fig. (4.6) se muestra que al acoplar el punto cuántico no perturbado, de manera lateral con una cadena finita de sitios, como se describe en el Capítulo

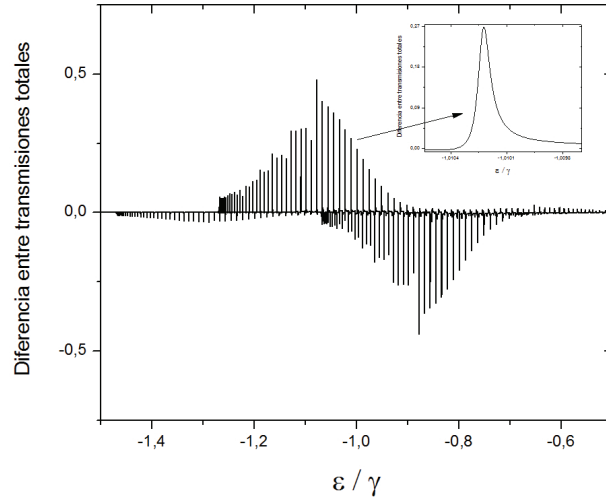


Figura 4.6: Diferencia entre transmisiones totales izquierda–derecha y derecha–izquierda con $V_0 = \gamma/2$, $\Phi = 0,1\Phi_0$ y $t_p = \gamma/10$.

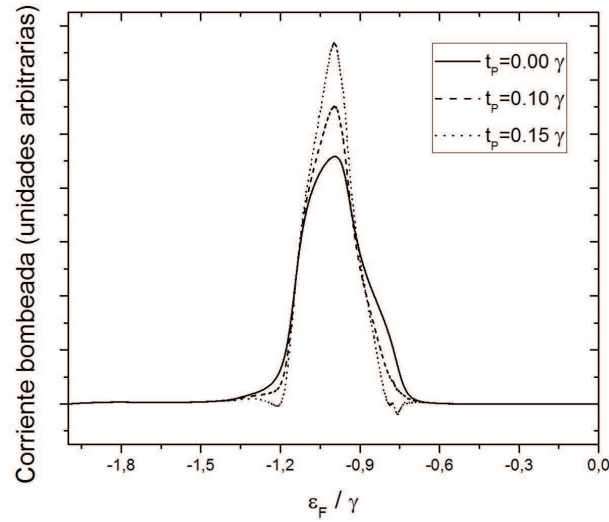


Figura 4.7: Corriente bombeada media de carga para diferentes valores del acoplamiento a la cadena finita, considerando un flujo magnético de $\Phi = 0,1\Phi_0$ y un acoplamiento $V_0 = 0,25\gamma$.

3, se consigue que el espectro de energía del sistema considere un mayor número de estados discretos, lo que se refleja en la aparición de nuevas antirresonancias del tipo Fano en el perfil de transmisión, tanto de derecha a izquierda como de

izquierda a derecha, es decir que el integrando de la Ec. (2.19) ve modificada su forma. En el caso considerado aquí, se ha centrado la energía de sitio de la cadena igual para cada sitio e igual a la energía de Fermi resonante sin la inclusión de esta cadena. Siguiendo con el análisis, la Fig. (4.7) muestra la modificación en la corriente bombeada al acoplar la cadena finita a uno de los puntos cuánticos, donde se han considerado diferentes valores para el acoplamiento de la misma al punto cuántico. Como resultado de este acoplamiento, se puede apreciar claramente que existe un aumento en el máximo de la corriente bombeada como a su vez una disminución de la magnitud de la misma en la zonas laterales de su máximo, es decir que se observa un crecimiento vertical de la curva al mismo tiempo que vemos un angostamiento de la misma.

4.2. Bombeo cuántico de espín

Una vez establecida la existencia de corriente bombeada de carga en el sistema, ahora en esta sección, se muestran los resultados obtenidos al considerar el grado de libertad de espín de los electrones. De aquí en adelante se considerará el conjunto de parámetros usado para obtener la curva dibujada con una línea negra sólida en la Fig. (4.4), con excepción de la fase agregada al desplazamiento de los electrones, pues ahora además de considerar el efecto AB, se incorpora el acoplamiento espín-órbita.

Al incorporar el acoplamiento espín-órbita en el sistema, podemos obtener corrientes bombeadas medias diferenciadas en espín, como lo muestra la Fig. (4.8), en donde mostramos en negro y rojo la corriente bombeada para un espín y para el otro respectivamente. Esto se debe principalmente a que el acoplamiento espín-órbita y el efecto AB, en conjunto, permiten quebrar la degeneración de espín presente en el sistema. Al considerar la Ec. (3.7), se nota que es posible nombrar el término de la exponencial $\Phi_{AB} + \sigma\Phi_{SO}$ como una fase efectiva dependiente de espín

$\Phi_{\sigma}^{\text{ef}}$, situación que se aprovecha al considerar el comportamiento asimétrico de la corriente bombeada en función del flujo magnético a través del anillo, mostrado en la referencia [7], el cual también se sugiere en la Fig. (4.2). La Fig. (4.9)

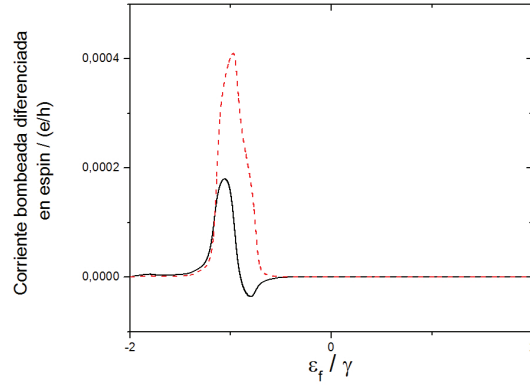


Figura 4.8: Corriente bombeada media de espín arriba (línea negra sólida) y de espín abajo (línea roja segmentada). Aquí el flujo de AB $\Phi_{\text{AB}} = 0,2\Phi_0$ mientras que el asociado al acoplamiento espín-órbita es $\Phi_{\text{SO}} = 0,1\Phi_0$.

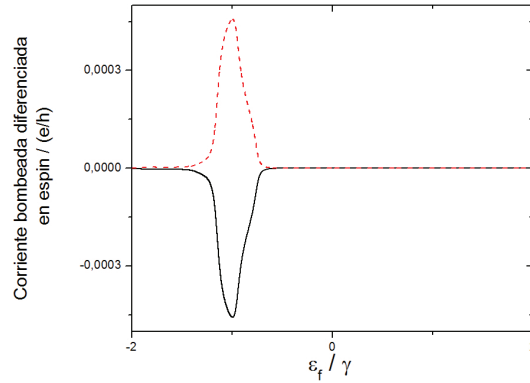


Figura 4.9: Corriente bombeada media de espín arriba (línea negra sólida) y de espín abajo (línea roja segmentada). Aquí el flujo de AB $\Phi_{\text{AB}} = 0,5\Phi_0$ mientras que el asociado al acoplamiento espín-órbita es $\Phi_{\text{SO}} = 0,4\Phi_0$.

muestra que ajustando o sintonizando los parámetros de flujos debidos a los efectos AB y acoplamiento espín-órbita de manera adecuada, de tal forma que se logre

una energía de Fermi resonante común para ambos espines y generando corrientes medias en sentidos opuestos, es que se obtiene una corriente pura de espín, es decir que sólo existe flujo de corriente de espín, no así de carga, lo que se observa en la Fig. (4.10).

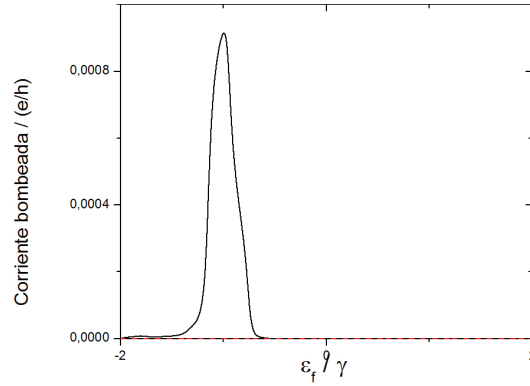


Figura 4.10: Corriente bombeada media de espín (línea negra sólida) y de carga (línea roja segmentada). Aquí el flujo de AB $\Phi_{AB} = 0,5\Phi_0$ mientras que el asociado al acoplamiento espín-órbita es $\Phi_{SO} = 0,4\Phi_0$.

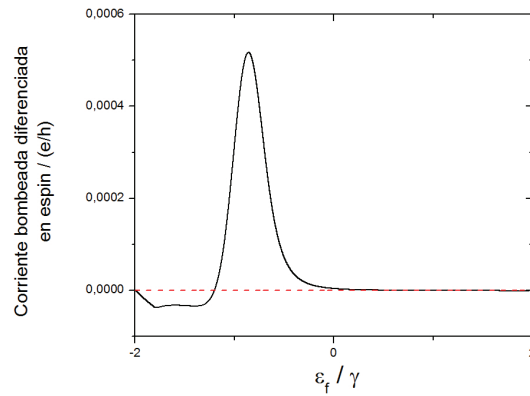


Figura 4.11: Corriente bombeada media de espín arriba (línea negra sólida) y de espín abajo (línea roja segmentada). Aquí la fase de AB y de espín-órbita son iguales $\Phi_{AB} = \Phi_{SO} = 0,4\Phi_0$.

Por otro lado, es posible además enfocar el sistema como un generador de

corriente bombeada y que a la vez funcione como un filtro de espín. La Fig. (4.11) muestra que es posible lograr una sintonización entre las fases debidas al efecto AB y al acoplamiento espín-órbita, tal que muestren una corriente bombeada nula para un espín mientras que para el opuesto exista una corriente bombeada finita, en una gran región de la banda.

Conclusiones

En este trabajo de tesis, se estudió el flujo de carga y el flujo de espín a través de un sistema que consiste en un anillo cuántico con un punto cuántico embebido en cada uno de sus brazos, sin la necesidad de la existencia previa de una diferencia de potencial de *bias* entre los extremos del sistema, es decir el bombeo cuántico de carga y de espín. Se incluyó una perturbación temporalmente periódica sobre uno de los puntos cuánticos, lo que llevó a utilizar la teoría de Floquet. Se concluye que para que exista una corriente bombeada es necesario romper las simetrías existentes en el sistema, lo cual es posible lograr incorporando un flujo magnético a través del anillo que lleva a la presencia del efecto Aharonov-Bohm. Se estudió el efecto de los diferentes parámetros del sistema, explorando valores para los cuales el bombeo de carga se alcanza la mayor amplitud posible, fijándose adicionalmente en que existen condiciones para que la corriente bombeada fluya en un sentido o en el opuesto. Además, se acopló una cadena lineal finita de sitios discretos, cuyas energías corresponden a la energía de Fermi del punto resonante, al punto cuántico no perturbado, observando un aumento del bombeo de carga en la zona central de resonancia, mientras que para las zonas laterales muestra una pequeña pero notable disminución, lo cual se atribuye al aumento del área de la zona central de integración a causa de la aparición de sucesivas antirresonancias Fano y la disminución de esta área en las zonas laterales de integración.

También se ha estudiado el bombeo de espín a través de este sistema con la idea de contribuir al campo de la espintrónica, para lo cual se rompió la degeneración

de éste mediante la inclusión de los efectos Aharonov–Bohm y la interacción espín–órbita simultáneamente. Se observa que es posible obtener corrientes bombeadas diferenciadas para cada espín, además de una corriente bombeada pura de espín (corriente de carga nula) luego de realizar un correcto ajuste entre los parámetros, con lo que además también es posible obtener una corriente bombeada no nula para un único espín, es decir $I_{\text{car}} = I_{\text{es}}$.

Bibliografía

- [1] FANO, U. 1961. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts. *Physical Review*. **124**(6): 1866–1878. .
- [2] DICKE, R. H. 1953. The Effect of Collisions upon the Doppler Width of Spectral Lines. *Physical Review*. **89**(2): 472–473.
- [3] CHAKRABORTY, T. 1999. *Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms*. Elsevier Science. 348p.
- [4] JACAK, L., HAWRYLAK, P. y WÓJS, A. 1998. *Quantum dots*. Berlin. Springer. 176p.
- [5] BROUWER, P. W. 1998. Scattering approach to parametric pumping. *Physical Review B*. **58**(16): 10135.
- [6] BÜTTIKER, M. THOMAS, H. y PRÊTRE, A. 1994. Current Partition in Multi-Probe Conductors in the Presence of Slowly Oscillating External Potentials. *Z. Phys. B: Condensed Matter*. **94**: 133.
- [7] FOA TORRES, L. E. F. 2005. Mono-parametric quantum charge pumping: Interplay between spatial interference and photon-assisted tunneling. *Physical Review B*. **72**(24): 245339.
- [8] GÖRES, J. D. et al. 2000. Fano resonances in electronic transport through a single-electron transistor. *Physical Review B* **62**(3): 2188.

- [9] PULIZZI, F. 2012. Spintronics. *Nature Materials*. **11**: 367.
- [10] BEUTLER, H. 1935. Über Absorptionsserien von Argon, Krypton und Xenon zu Termen zwischen den beiden Ionisierungsgrenzen ${}^2P_3^{2/0}$ und ${}^2P_1^{2/0}$. *Z. Phys. A* **93**(3-4): 177–196.
- [11] MIROSHNICHENKO, A. E. FLACH, S. KIVSHAR, Y. S. 2010. Fano resonances in nanoscale structures. *Review Modern Physics*. **82**(3): 2257–2298.
- [12] THOULESS, D. J. 1983. Quantization of particle transport. *Physical Review B*. **27**(10): 6083.
- [13] Switkes, M. MARCUS, C. M. CAMPMAN, K. y GOSSARD, A. C. 1999. An Adiabatic Quantum Electron Pump. *Science*. **283**: 1905.
- [14] PRADA, E. SAN-JOSE, P. y SCHOMERUSC, H. 2011. Gate driven adiabatic quantum pumping in graphene. *Solid State Communications*. **151**: 1065–1070.
- [15] KIM, B.-K. KIM, J.-J. Seo, M., CHUNG, Y. et. al. 2010. Single electron pumping through a quantum dot-embedded carbon nanotube using surface acoustic wave. *Applied Physics Letter*. **97**(26): 262110.
- [16] LOW, T. JIANG, Y. KATNELSON, M. y GUINEA, F. 2012. Electron Pumping in Graphene Mechanical Resonators. *Nano Letter*. **12**: 850-854.
- [17] SAKURAI, J. J. 1994. *Modern Quantum Mechanics*. Rev. ed. Addison-Wesley. 500p.
- [18] AHARONOV, Y. y BOHM, D. 1961. Further Considerations on Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. *Physical Review*. **123**(4): 1511.
- [19] COHEN-TANNOUDJI, C. et. al. 1977. *Quantum Mechanics*. Paris. Rev. ed. Wiley interscience. 1524p.

- [20] AHARONOV, Y. y CASHER, A. 1984. Topological Quantum Effects for Neutral Particles. *Physical Review Letter*. **53**(4): 319-321.
- [21] RASHBA, E. I. 1960. Properties of semiconductors with an extremum loop: Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop. *Fizika tverd. tela*. **2**(6): 1224-1238.
- [22] SHIRLEY, J. H. 1965. Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time. *Physical Review*. **138**(4B): B979.
- [23] SAMBE, H. 1973. Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field. *Physical Review A*. **7**: 2203.
- [24] CAMALET, S. LEHMANN, J. KOHLER, S. y HÄNGGI, P. 2003. Current Noise in ac-Driven Nanoscale Conductors. *Physical Review Letters*. **90**: 210602.
- [25] CIMMINO, A. OPAT, G. I. y KLEIN, A. G. 1989. Observation of the topological Aharonov-Casher phase shift by neutron interferometry. *Physical Review Letter*. **63**: 4.
- [26] MIRELESS, F. y KIRCZENOW, G. 2001. Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires. *Physical Review B*. **64**: 024426.
- [27] VALLEJO, M. L. LADRÓN DE GUEVARA, M. L. y ORELLANA, P. A. 2010. Triple Rashba dots as a spin filter: Bound states in the continuum and Fano effect. *Physics Letter A*. **374**: 4028.
- [28] ORELLANA, P. A. DOMÍNGUEZ-ADAME, F. GÓMEZ, I. y LADRÓN DE GUEVARA, M. L. 2003. Transport through a quantum wire with a side quantum-dot array. *Phys. Rev. B*. **67**: 085321.