

**Decoherencia en el transporte cuántico:
Descripciones dinámicas y procesos
dependientes de espín**

por

Lic. Lucas Fernández-Alcázar

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y
Computación como parte de los requerimientos para la obtención del
grado de

Doctor en Física

de la

Universidad Nacional de Córdoba

Marzo de 2016

©FaMAF- UNC 2016

Director: Dr. Horacio M. Pastawski



Decoherencia en el transporte cuántico: Descripciones dinámicas y procesos dependientes de espín por Lucas J. Fernández. Se distribuye bajo Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 2.5 Argentina.

Agradecimientos

En primer lugar me gustaría agradecer a la FaMAF, a toda la gente que conforma este espacio tan especial donde abunda la calidez y donde siempre me he sentido como en casa.

Quisiera agradecer a CONICET y a las políticas de estado de esta última década que permitieron que pudiera desarrollar mis actividades de investigación en el país y para el país.

Hay muchas personas con las que he compartido estos maravillosos cinco años de doctorado. De todas ellas aprendí algo y han dejado una huella en mí, así como espero haberlo hecho en sus vidas.

Quiero agradecer a Horacio por todo lo que me ha enseñado en este tiempo. Pero por sobre todo agradezco la dedicación incondicional que tiene con sus estudiantes y la pasión con que vive la Física, la cual logró transmitirme. A Raúl Bustos, por su inmensa ayuda que facilitó enormemente el tramo final de este trabajo. A Carlos Cattena, quien realizó un trabajo asombroso y por demás brillante en los códigos que utilicé. A los profesores que tuve durante la carrera y que contribuyeron a mi formación profesional. Agradezco al tribunal y a la comisión asesora por sus valiosos comentarios que contribuyeron a mejorar este trabajo.

A mis padres, en especial a Esther, siempre dándome su apoyo y sus valiosos consejos. A mis abuelos, tíos y particularmente a mis pequeños hermanos por los cálidos momentos compartidos.

A mis amigos, en especial a los chicos de la oficina con quienes tuve en placer y el honor de compartir estos años y a los chicos de basket, por todas las tardes de diversión que pasamos juntos.

Y finalmente agradezco a mi amor, Alba, quien estuvo siempre a mi lado en los momentos buenos y los malos, quien me ayudó tanto en la vida como en lo académico, quien se convirtió en un pilar de mi vida. Un agradecimiento infinito...

Resumen Breve

La pérdida de correlación de fase en un sistema cuántico es conocida como decoherencia y es consecuencia de las interacción con el ambiente. En esta tesis nos enfocamos en desarrollar herramientas teóricas y numéricas que permitan describir el efecto de la decoherencia en el transporte cuántico de sistemas con dependencia temporal o que presenten procesos de inversión de espín. En particular abordamos problemas de transporte a través de paredes de dominios magnéticos, magnetorresistencia gigante, dinámica cuántica decoherente y motores cuánticos. Los modelos y métodos desarrollados son los suficientemente generales como para ser aplicados en otras situaciones.

PALABRAS CLAVE: decoherencia – transporte electrónico – mecánica cuántica – dinámica – electrones – D’Amato-Pastawski

Brief Abstract

The loss of phase correlation in a quantum system is known as decoherence and it is consequence of interactions with the environment. In this thesis, we focus on developing theoretical and numerical tools to describe the effect of decoherence in quantum transport of systems with time dependence or with spin-flipping processes. In particular we address the problems of transport through magnetic domain walls, giant magnetoresistance, decoherent quantum dynamics and adiabatic quantum motors. The models and methods developed in this thesis are general enough to be applied in other situations.

KEY WORDS: decoherence – electron transport – quantum mechanics – dynamics – electrons – D’Amato-Pastawski

03.65.Yz Decoherence; open systems; quantum statistical methods

73.23.-b Electronic transport in mesoscopic systems

73.63.-b Electronic transport in nanoscale materials and structures

85.85.+j Micro- and nano-electromechanical systems (MEMS/NEMS) and devices

Resumen

En la últimas décadas ha aparecido una necesidad imperiosa por describir la dinámica cuántica de sistemas que interactúan con los grados de libertad del ambiente que lo rodea. Esta interacción degrada fenómenos intrínsecamente cuánticos como interferencias, efectos de tunelamiento y entrelazamientos y se la denomina decoherencia. En esta tesis nos enfocamos en desarrollar herramientas teóricas que permitan describir el efecto de la decoherencia en el transporte cuántico de sistemas con dependencia temporal o que presenten procesos de inversión de espín. Sin embargo, nuestra principal expectativa es buscar que los modelos y métodos desarrollados sean lo suficientemente generales como para ser aplicados en otras situaciones. Nuestro punto de partida es el modelo de D'Amato y Pastawski (DP) que describe la decoherencia en el transporte estacionario empleando Hamiltonianos efectivos no-Hermíticos.

En primer lugar estudiamos una variante del modelo de Cabrera y Falicov para el transporte electrónico dependiente de espín a través de una pared de dominio magnético suave. Originalmente, la magnetización simplemente precesa alrededor de un eje mientras se avanza a través de la pared. Aquí extendimos esta propuesta permitiendo una modulación en la intensidad del campo y mostramos que esta simple variación tiene consecuencias no triviales en el transporte. Con esta variante, este problema resulta representativo de una amplia clase de dispositivos con inhomogeneidades magnéticas. En particular, vimos que en un régimen en que el campo baja su intensidad dentro de la pared, la conductancia dependiente del espín puede ser evaluada como un problema de pasaje a través de un cruce evitado asociándola con el fenómeno de Landau-Zener. En contraste, para un régimen donde el campo se intensifica dentro de la pared, encontramos interferencias bien definidas como función del ancho de la pared de dominio, las cuales fueron interpretadas como oscilaciones de Rabi. Este problema se trata también en presencia de decoherencia dentro del modelo DP hallándose la persistencia de estas oscilaciones aún cuando son atenuadas por el ambiente.

Uno de los fenómenos paradigmáticos de la espintrónica es la magnetorresistencia gigante (GMR) en la que aparece un cambio drástico en la resistencia eléctrica al alterar la configuración magnética de un material multicapa. Desarrollamos un modelo simplificado que permite describir adecuadamente la GMR, tanto en un régimen puramente cuántico como su límite semiclásico y aún en el clásico. Nuestro modelo, permite identificar los perfiles de potencial a lo largo del sistema como así también las corrientes locales.

Cada vez más frecuentemente se requiere la inclusión de la decoherencia en problemas

de transporte dinámicos. En sistemas cerrados, lo más usual es usar el formalismo de superoperadores de Lindblad o bien cálculos numéricos de una dinámica estocástica de la matriz densidad. En esta tesis, desarrollamos un esquema alternativo donde la función de onda sufre eventos estocásticos que desplazan sus energías locales y por ello lo denominamos “corrimientos cuánticos” (QD). Mostramos su equivalencia con el modelo DP para el estado estacionario, y con un modelo de saltos cuánticos (QJ) para sistemas dinámicos. Mostramos que el QD no solo recupera el decaimiento exponencial típico de las oscilaciones de sistemas cuánticos en presencia de decoherencia, sino que también describe “Transiciones de Fase en la Dinámica Cuántica” inducidas por decoherencia. A partir de un ejemplo, mostramos que el QD es más eficiente computacionalmente que el QJ y, por ende, que los cálculos basados en la matriz densidad. Aplicado a un sistema de dos espines entrelazados, no solo reproducimos el decaimiento exponencial de las oscilaciones de Rabi, sino que también verificamos, a través del Eco de Loschmidt, que un estado cuántico es más frágil frente a perturbaciones locales mientras transita un estado de superposición no local. Al estudiar una excitación local en una cadena de espines interactuantes, recuperamos el comportamiento recurrente (Ecos Mesoscópicos) atenuado por decoherencia observados en experimentos de Resonancia Magnética Nuclear.

Muy recientemente, ha surgido el interés en las fuerzas inducidas por corrientes (CIFs). En general, las descripciones usuales para tratar la interacción de los electrones con los dispositivos mecánicos se restringen a regímenes puros, tanto cuánticos como clásicos. En esta tesis, extendemos la teoría de las CIFs para incluir eventos decoherentes. Para ello extendemos el modelo DP a sistemas con dinámica adiabática. Verificamos que la teoría desarrollada es consistente con el teorema de fluctuación-disipación y con las relaciones de reciprocidad de Onsager. Encontramos que la decoherencia no solo afecta a las CIFs sino que además altera los coeficientes de fricción y las fluctuaciones térmicas intrínsecas de los sistemas. Finalmente, aplicando la teoría a un modelo para motor cuántico adiabático (AQM) encontramos que la decoherencia afecta de manera no trivial la eficiencia de estos AQMs: La eficiencia de sistemas que operaban en condiciones óptimas disminuye, mientras que la eficiencia de sistemas operados fuera del régimen óptimo se incrementa. En particular, motores en los que todo trabajo producido por las fuerzas inducidas por corrientes es disipado, pueden tornarse capaces de realizar trabajo aprovechable si se ajusta una adecuada interacción con el ambiente.

En resumen, a lo largo de esta tesis hemos desarrollado las herramientas teóricas y computacionales necesarias para extender el estudio del transporte cuántico decoherente hacia nuevas fronteras que involucran sistemas abiertos y problemas dinámicos. Esto nos acerca a una adecuada descripción de la transición desde la mecánica cuántica hacia las leyes del mundo macroscópico.

Glosario

A lo largo de esta tesis se utilizan varias siglas. A los efectos de facilitar su lectura se presenta esta lista de siglas frecuentes.

- AQM:** Adiabatic Quantum Motor
- CIFs:** Current Induced Forces
- DBRTD:** Double Barrier Resonant Tunneling Device
- DP:** D'Amato-Pastawski
- DW:** Domain Wall
- FGR:** Fermi Golden Rule
- GLBE:** Generalized Landauer-Büttiker Equations
- GMR:** Giant Magnetoresistance
- KBK:** Kadanoff-Baym-Keldysh
- LB:** Landauer-Büttiker
- LCAO:** Linear Combination of Atomic Orbitals
- LDoS:** Local Density of States
- LE:** Loschmidt Echo
- MDR:** Modelo de Dos Resistencias (se evitó la sigla en inglés TRM por su similitud con TMR)
- ME:** Mesoscopic Echo
- NMR:** Nuclear Magnetic Resonance
- QD:** Quantum Drift
- QDPT:** Quantum Dynamical Phase Transition
- QJ:** Quantum Jumps
- TLS:** Two Level System
- TMR:** Tunneling Magnetoresistance

Índice general

Agradecimientos	v
Resumen	ix
Glosario	xi
1. Introducción	5
1.1. Transporte electrónico de estado estacionario	7
1.1.1. Reservorios de electrones: aproximación de una única partícula al problema de muchos cuerpos	7
1.1.2. Transporte cuántico coherente de estado estacionario	8
1.2. Decoherencia en el transporte cuántico	10
1.2.1. Modelo de Büttiker.	10
1.2.2. Modelo D'Amato-Pastawski.	12
1.3. Transporte cuántico dependiente del tiempo	16
1.4. Organización de esta tesis	17
2. Transporte dependiente de espín a través de campos magnéticos modulados	21
2.1. Introducción	21
2.2. Hamiltoniano de los electrones de conducción	22
2.3. Estructura electrónica en campos magnéticos modulados.	23
2.4. Conductancia	24
2.5. Transporte a través de una modulación débil: el problema de Landau-Zener	26
2.5.1. Resultados numéricos del transporte de estado estacionario.	28
2.6. Transporte a través de una modulación fuerte: interferencias como oscilaciones de Rabi	30
2.6.1. Resultados de la dinámica	31
2.7. Rol de la decoherencia	34
2.8. Conclusión	36

3. Transición cuántica-clásica en un modelo para magnetorresistencia gigante	39
3.1. Introducción	39
3.2. Transporte en materiales magnéticos	40
3.2.1. Dispersión dependiente de espín: Modelo de dos bandas de Mott . .	40
3.2.2. Magnetorresistencia: Modelo de las dos resistencias	42
3.3. Descripción de la magnetorresistencia a partir de un Hamiltoniano	44
3.4. Obtención de corrientes y potenciales químicos locales a partir de las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker	45
3.5. De la cuántica a la clásica	46
3.5.1. Régimen clásico de la magnetorresistencia: el modelo de las dos resistencias	47
3.5.2. Régimen semiclásico de la magnetorresistencia: Teoría de Valet y Fert	47
3.6. Conclusión	49
4. Transporte dependiente del tiempo más allá de la formulación de Landauer-Büttiker	51
4.1. Introducción	51
4.2. Transporte cuántico decoherente: reinyección, paralelismo, atenuación e incerteza en la energía	53
4.3. El método “Quantum Drift”	54
4.3.1. Ejemplo: dinámica decoherente de un paquete de ondas	56
4.4. Aplicaciones	58
4.4.1. Transporte decoherente	58
4.4.2. Transición de fase en la dinámica cuántica en un sistema de dos niveles	60
4.4.3. Eco de Loschmidt	65
4.4.4. Saltos cuánticos y corrimientos cuánticos en una dinámica de muchos espines	68
4.5. Conclusión	72
5. Decoherencia en fuerzas inducidas por corrientes: aplicación a motores cuánticos adiabáticos	75
5.1. Introducción	75
5.2. Fuerzas inducidas por corrientes	76
5.3. Decoherencia en las fuerzas inducidas por corrientes.	78
5.3.1. Conservación de la carga y potencial químico autoconsistente	78
5.3.2. Fuerzas inducidas por decoherencia y teorema de fluctuación-disipación	80
5.3.3. Eficiencia termodinámica del motor	81
5.3.4. Límite de velocidad terminal constante, $d \approx 1$	82
5.4. Ejemplo: Motor cuántico adiabático basado en una bomba peristáltica . . .	83
5.4.1. Trabajo por ciclo del motor	87
5.4.2. Coeficientes de fricción: contribución coherente y decoherente	87

5.4.3.	Eficiencia termodinámica del motor	89
5.5.	Generalización de la teoría de fuerzas inducidas por corrientes en presencia de decoherencia a sistemas de muchos terminales	89
5.5.1.	Decoherencia en las corrientes	91
5.5.2.	Expresiones generales de las fuerzas inducidas por corrientes en presencia de decoherencia	93
5.5.3.	Cumplimiento del Teorema de fluctuación-disipación	94
5.5.4.	Cumplimiento de las relaciones de reciprocidad de Onsager	94
5.6.	Conclusión	95
6.	Conclusión	97
6.1.	Conclusión general	97
6.2.	Principales contribuciones originales	98
6.3.	Perspectivas	100
6.4.	Trabajos derivados de esta tesis	100
A.	Métodos analíticos para el transporte cuántico	103
A.1.	Procedimientos de <i>decimación</i> y Hamiltonianos efectivos	103
A.2.	Descripción de los alambres	105
A.3.	La regla de oro de Fermi en el escape hacia cables o procesos decoherentes.	106
B.	Algoritmo de evolución Trotter-Suzuki	107
C.	Matriz S y Funciones de Green	109
C.1.	Coefficiente de reflexión y función de Green en un cristal unidimensional con una impureza	110
C.2.	Conservación de la carga y teorema óptico	113

Capítulo 1

Introducción

Los rápidos avances en la miniaturización y control de la materia en la nanoescala ocurridos en las últimas décadas, han permitido el desarrollo de dispositivos electrónicos tan pequeños que fallan las descripciones que resultan útiles para los dispositivos tradicionales. Básicamente en esta nueva escala, la mecánica cuántica comienza a jugar un rol central en el comportamiento electromecánico de los dispositivos y en particular en las propiedades de transporte electrónico. Esto ofrece una gran oportunidad, no solamente para el aprovechamiento de estos fenómenos físicos en novedosos dispositivos electrónicos, sino también para explorar aspectos fundamentales de la física asociados con ellos. Ejemplo de esto es el rol del ambiente sobre los sistemas mecanico-cuánticos, un problema que extiende su importancia al naciente campo de la información cuántica.

El transporte cuántico ha sido una parte fundamental de la física de la materia condensada desde mediados del siglo pasado. En 1957, Landauer propuso su célebre fórmula que vinculaba la conductancia, magnitud esencialmente macroscópica, con la transmitancia cuántica, magnitud intrínsecamente microscópica. [Lan57] Durante la segunda mitad del siglo XX los aportes de físicos como Imry, Thouless, Anderson y Büttiker, entre otros, contribuyeron a desarrollar el formalismo ahora conocido como de “Landauer-Büttiker”. [B86a, B86b, BvH91, IL99] En muchos casos, éste permite calcular el transporte cuántico en muestras nanoscópicas, o incluso mesoscópicas, a partir de primeros principios.

Un aspecto del transporte electrónico que permanece dificultoso de resolver es la interacción de los sistemas cuánticos con el ambiente. Por “ambiente” se puede entender a todos los procesos de interacción de los electrones que no son tenidos en cuenta en una formulación necesariamente simplificada de cualquier problema que se aborde. Típicamente, esos procesos se refieren a las interacciones de los electrones con fonones, con otros electrones, con momentos magnéticos individuales o colectivos, así como con cualquier centro dispersor ausente de la situación idealizada. A menudo, estos procesos se manifiestan degradando las interferencias que caracterizan al sistema ideal, por lo que su efecto se denomina genéricamente **decoherencia**. Su estudio es un gran campo en sí mismo, abarcando áreas que van desde la física básica hasta la física aplicada. En el primer caso, parte del interés surge porque, como sostiene el paradigma actual, el comportamiento clásico podría interpretarse como emergente de la pérdida de coherencia de los sistemas cuánticos.

[Zur97, Zur03] Dentro de las áreas aplicadas, el estudio de la decoherencia es importante en áreas que dependen de la coherencia cuántica como la computación e información cuántica. Aún en biofísica [DT98] la decoherencia parece ser crucial para la optimización de los procesos de transferencia de excitaciones [PH08, RMK⁺09] y algo análogo aparece al intentar justificar la alta conductividad de conductores poliméricos. [CBP10] El interés por la decoherencia se está desarrollando en consonancia con la nanotecnología, ya que comienza a resultar evidente que el transporte en la nanoescala resulta de un delicado balance entre el comportamiento cuántico y el clásico.

Büttiker fue el primero en notar que la introducción de voltímetros en la descripción de un problema de transporte de electrones implica una medición clásica que reinyecta electrones de distinta energía y sin memoria de su historia. [B86b] Este concepto fue posteriormente desarrollado por D’Amato y Pastawski, quienes identificaron el escape hacia los voltímetros y consecuente reinyección como colapso local del estado cuántico. La consecuencia de esto es que los electrones “medidos” son decoherentes. Así, desarrollaron una descripción Hamiltoniana al introducir el llamado modelo D’Amato-Pastawski (DP) que, además de incluir naturalmente una distribución de eventos decoherentes a lo largo del sistema, provee una interpretación física para la transición cuántico-clásica de gran valor práctico. [DP90, Pas91]

Los aportes de Pastawski y colaboradores a la temática de decoherencia han continuado a lo largo de los años. Entre ellos podemos mencionar: la extensión del método DP para contemplar una distribución continua de procesos decoherentes y su relación con los modelos clásicos de transporte electrónico; [Pas91] la fundamentación del modelo DP en base al formalismo cuántico de campos de Keldysh, Kadanoff y Baym para funciones de Green de no-equilibrio que permitieron una descripción dinámica temporal; [Pas91, Pas92] la generalización del método DP a sistemas multiterminal; [Cat12, CFABM⁺14] el desarrollo de algoritmos recursivos (de *decimación*) específicos para el método que permiten un mejor aprovechamiento de las simetrías del sistema; [CFABM⁺14, NBMC⁺16] la aplicación del método para explicar la alta conducción de polímeros conductores desordenados y cuasi-unidimensionales [CBP10] así como también para explicar la transición entre un régimen de “*tunelamiento cuántico*” a uno de “*saltos térmicamente asistidos*” en la conducción de alambres moleculares. [NGdRPC12]

En esta tesis exploramos aspectos novedosos sobre la decoherencia en el problema de transporte electrónica que permanecían relativamente inexplorados. Principalmente, conductancia en presencia de procesos que modifican la proyección de espín, tales como los que aparecen en paredes de dominio magnético y dispositivos de magnetoresistencia gigante. Asimismo, consideramos efectos de la decoherencia en la dinámica de excitaciones electrónicas, para lo cual desarrollamos nuevas estrategias resolución. Finalmente, consideramos el rol de la decoherencia en las fuerzas mecánicas inducidas por corrientes que son estudiadas para el desarrollo de motores cuánticos. Antes de profundizar en las contribuciones específicas de esta tesis, introduciremos brevemente los aspectos fundamentales del transporte cuántico, tanto coherente como en presencia de decoherencia, que resultarán relevantes para nuestras contribuciones.

1.1. Transporte electrónico de estado estacionario

El transporte es consecuencia de un desbalance entre el flujo de electrones que entran y que abandonan cada reservorio a través de la muestra. Distintas regiones del sistema están conectadas mediante **cables**, también denominados **alambres**, a **voltímetros** y **fuentes de corriente**, es decir a los **terminales** que actúan como reservorios de partículas. Dado su carácter macroscópico, incluso los cables pueden ser vistos como reservorios que tienden al equilibrio térmico debido a su número enorme de electrones.[IL99] Su descripción involucra un problema intrínsecamente de muchos cuerpos, por lo cual necesitaremos hacer simplificaciones apropiadas para abordarlo.

1.1.1. Reservorios de electrones: aproximación de una única partícula al problema de muchos cuerpos

Los contactos metálicos actúan como reservorios con un número enorme de electrones N_e cercano a 10^{23} . La formulación de este problema requiere de funciones de onda de muchos cuerpos, Ψ , las cuales deben ser antisimétricas respecto al intercambio de electrones. La forma usual de obtener funciones de onda Ψ que cumplan esta condición es combinando determinantes de Slater, cada uno de ellos contruidos a partir de las funciones de onda de un electrón $\psi_k(x)$,

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(x_1) & \psi_{k_1}(x_2) & \cdots & \psi_{k_1}(x_N) \\ \psi_{k_2}(x_1) & \psi_{k_2}(x_2) & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \psi_{k_N}(x_1) & \cdots & & \psi_{k_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (1.1) \\ &= \langle x_1, x_2, \dots, x_N | \hat{c}_{k_N}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_2}^\dagger \hat{c}_{k_1}^\dagger | \emptyset \rangle, \end{aligned}$$

donde las funciones de onda de una partícula suelen ser aproximadas por ondas planas, $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L_s}} \exp[ikx]$. En la segunda igualdad, la función de onda se representa compactamente usando los operadores \hat{c}_k^\dagger y \hat{c}_k que describen respectivamente la creación y aniquilación de un electrón con vector de onda k al aplicarse sobre el estado del vacío $|\emptyset\rangle$. [LL58]

En los cables, los electrones sufren diversas interacciones que llevan al sistema a un estado termalizado descrito por una función de onda de equilibrio térmico Ψ_T . En la aproximación usual, el estado $|\Psi_T\rangle$ es descrito por una superposición incoherente de determinantes de Slater. Debido a esto, las excitaciones electrónicas en un conductor infinito son descritas por ondas planas donde la probabilidad de ocupación viene dada por la función de distribución de Fermi,

$$\langle \Psi_T | \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k | \Psi_T \rangle = f(\varepsilon_k, \mu, k_B T) = \frac{1}{1 + \exp\left[-\frac{\varepsilon_k - \mu}{k_B T}\right]}, \quad (1.2)$$

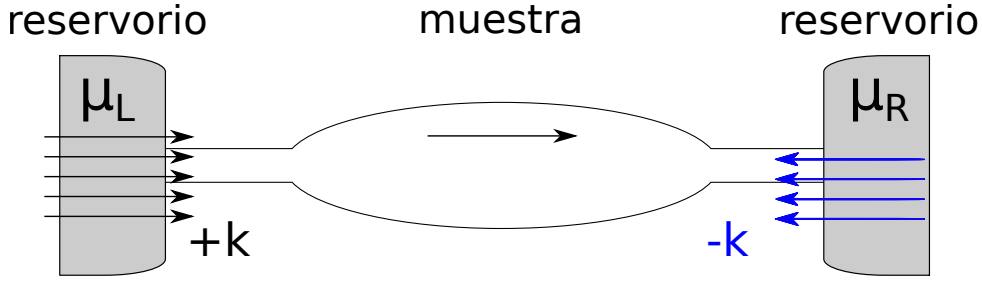


Figura 1.1: Representación esquemática del transporte electrónico de estado estacionario. Los electrones son emitidos, con vectores de onda $+k$ y $-k$, por los reservorios que presentan una diferencia en sus potenciales químicos $\mu_L - \mu_R = eV$, donde V es la diferencia de potencial. Dado que éstos son mutuamente incoherentes, la corriente resulta como consecuencia del desbalance entre las contribuciones de cada reservorio.

donde $k_B T$ es la energía térmica, μ es el potencial químico del reservorio y ε_k es la energía del estado k de un electrón. [AGD63]

Dentro de la muestra no es posible realizar estas aproximaciones ya que en la mayoría de los dispositivos mesoscópicos los mecanismos de termalización son débiles comparados con el tiempo de tránsito de los electrones. En este caso, la probabilidad de ocupación de un estado k generalmente no coincide con la de un estado térmico, sino que depende de un balance detallado del intercambio de carga y energía con los reservorios.

1.1.2. Transporte cuántico coherente de estado estacionario

El formalismo más usado para tratar problemas de transporte en el estado estacionario se basa en las ideas pioneras de R. Landauer. [Lan57, IL99] Este toma en cuenta el papel fundamental que tienen los terminales conectados a la muestra, en contraposición a las descripciones de Boltzmann y Kubo-Greenwood que tradicionalmente los dejan de lado. [AA85]

En su trabajo pionero, Landauer consideraba explícitamente que la muestra estaba conectada con reservorios externos a la izquierda (L) y a la derecha (R) a través de dos **cables** modelados por **alambres unidimensionales** (ver figura 1.1). La corriente total a través del sistema era evaluada considerando el número de estados de energía ε disponibles para el transporte en los alambres de la izquierda y derecha. Este número se encuentra determinando por las densidades de estado $N_L(\varepsilon)$ y $N_R(\varepsilon)$ en los respectivos alambres, de los cuales, la mitad ($1/2$) corresponde a estados que “salen” de los reservorios externos (estados $+k$ en el reservorio L y $-k$ en R). Por tanto están ocupados de acuerdo a las funciones de Fermi de equilibrio $f_L(\varepsilon)$ y $f_R(\varepsilon)$. Las corrientes electrónicas están determinadas por la velocidad v de los electrones en los distintos alambres, v_L y v_R (con $v = \frac{1}{\hbar} \partial \varepsilon_k / \partial k$), y las probabilidades de transmisión, T_{LR} y T_{RL} , donde T_{ij} es la probabilidad

de ir desde j hasta i . La corriente I_L evaluada en el cable L resulta entonces:

$$I_L = -e \int \left[T_{RL}(\varepsilon) v_L(\varepsilon) \frac{1}{2} N_L(\varepsilon) f_L(\varepsilon) - T_{LR}(\varepsilon) v_R(\varepsilon) \frac{1}{2} N_R(\varepsilon) f_R(\varepsilon) \right] d\varepsilon. \quad (1.3)$$

Esta ecuación representa un balance entre corrientes provenientes de distinta fuente, es decir, sin coherencia relativa. El primer término corresponde a la fracción T_{RL} de aquellos electrones que son inyectados a la muestra por el cable L y que efectivamente llegan a R , mientras que el segundo término da cuenta de aquellos que hacen el proceso inverso, viajando de R a L . En el enfoque de Landauer, fue esencial notar que la densidad de estados en el alambre $N(\varepsilon) = 2/(h v(\varepsilon))$ compensa la velocidad de los portadores. Por tanto, la corriente neta que fluye a través del cable es simplemente

$$I_L = -\frac{e}{h} \int [T_{RL}(\varepsilon) f_L(\varepsilon) - T_{LR}(\varepsilon) f_R(\varepsilon)] d\varepsilon. \quad (1.4)$$

En esta expresión queda en evidencia que la corriente neta es una consecuencia del desbalance entre las ocupaciones de los estados en los cables, es decir la diferencia de potencial o voltaje fijado externamente.

En este modelo, el flujo de corriente está completamente determinado por los procesos que ocurren dentro del rango de energías entre μ_L y μ_R . Esto ocurre ya que los estados con energía ε menores que μ_R no contribuyen a la corriente neta por encontrarse exactamente compensados debido a que $T_{RL}(\varepsilon) = T_{LR}(\varepsilon)$, en ausencia de campos magnéticos. Por esto, tomaremos μ_R como referencia, y luego $\delta\mu_L = \mu_L - \mu_R = eV$ y $\delta\mu_R = 0$. Al considerar una diferencia de potencial eV infinitesimal, la única energía relevante es la de Fermi, ε_F , la cual corresponde a la energía del último estado ocupado en los reservorios a temperatura nula. Ésta define un vector de onda k_F que caracteriza el momento de los electrones.

Asumiendo bajas temperaturas ($f_i \approx \Theta(\varepsilon - \mu_i)$), simetría de reversión temporal ($T_{R,L} = T_{L,R}$) y régimen de respuesta lineal respecto a la diferencia de potencial químico $eV \ll \varepsilon_F$, resulta

$$I = \frac{e}{h} T_{RL}(\varepsilon_F) eV, \quad (1.5)$$

lo que lleva a la fórmula de Landauer para la *conductancia de dos terminales*:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &\equiv \frac{1}{\mathbf{R}} \equiv \frac{I}{V} \\ &= (2_S) \frac{e^2}{h} T_{RL}(\varepsilon_F), \end{aligned} \quad (1.6)$$

donde el factor 2_S da cuenta de la degeneración de espín no incluida en la descripción anterior. Dado que el valor máximo para T_{RL} es 1, esta fórmula pone de manifiesto la universalidad de la unidad de resistencia que muy posteriormente se manifestó en el efecto Hall cuántico entero [vK86], en el efecto Hall fraccionario [Lau99] y en la espectacular cuantización de la conductancia [CKGGM⁺97]. La idea clave de Landauer es reflejada en esta ecuación, que relaciona dos cantidades de diferentes escalas y constituye su lema: “*La*

conductancia es transmitancia". Es decir, vincula la conductancia macroscópica, que es el resultado de una medición experimental, con la probabilidad cuántica de transmisión. Esta última podría ser obtenida directamente del Hamiltoniano del sistema obtenido a partir de primeros principios, y por lo tanto debería contemplar todos los efectos de interferencias cuánticas que el sistema pudiere presentar.

Büttiker extendió el enfoque de Landauer a un sistema conectado a múltiples terminales donde cada terminal i se caracteriza por un potencial químico $\delta\mu_i = \mu_i - \mu_0$, según la condición de contorno impuesta externamente. En una fuente que provee un flujo de corriente determinado, $\delta\mu_i$ es aquel que posibilita esta corriente en las condiciones del circuito. Equivalentemente, para un voltímetro, este flujo debe ser cero y esto determina la caída de potencial $\delta\mu_i$ respecto de la referencia μ_0 . [B86a] Büttiker se dio cuenta de que se puede tratar todos los terminales en igualdad de condiciones mediante la aplicación de las leyes de Kirchhoff. En este caso, la corriente I_i que ingresa al cable i para el caso multiterminal resulta:

$$\begin{aligned} I_i &= \frac{e}{h} \sum_{j(\neq i)} \{-T_{j,i}(\varepsilon_F)\delta\mu_i + T_{i,j}(\varepsilon_F)\delta\mu_j\}, \\ &= \underbrace{-\frac{e}{h}[1 - R_i]\delta\mu_i}_{\text{salen}} + \underbrace{\frac{e}{h} \sum_{j(\neq i)} T_{ij}\delta\mu_j}_{\text{entran}}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

donde se usan las mismas aproximaciones que en 1.5 y $R_i = 1 - \sum_{j(\neq i)} T_{ji}$. Esta ecuación representa el balance entre las contribuciones a la corriente de los electrones que "entran" y que "salen" del terminal i , donde definimos a la primera como negativa. Nótese que las definiciones de transmitancias $T_{i,j}$ y reflectancia R_i evaluadas a la energía de Fermi requieren que se excluya el caso $j = i$ en la suma de la ecuación 1.7.

Para incorporar el espín en las ecuaciones de más arriba basta con multiplicar por el factor 2_S las corrientes o conductancias, siempre y cuando las proyecciones de espín estén degeneradas y desacopladas. Problemas que involucren acoplamientos espín-órbita, o bien campos magnéticos o inhomogeneidades magnéticas acoplarán las proyecciones del espín dando origen a procesos de inversión de espín. En este caso, el transporte no podría ser resuelto de una manera tan sencilla, ya que cada canal de espín y sus acoplamientos deberán ser considerados explícitamente. Por este motivo, en parte de esta tesis nos abocamos a tratar el problema del transporte dependiente de espín para lo cual utilizamos modelos que resultan suficientemente generales como para abordar una amplia clase de situaciones.

1.2. Decoherencia en el transporte cuántico

1.2.1. Modelo de Büttiker.

Uno de los primeros modelos fenomenológicos para incluir decoherencia en el transporte cuántico fue el desarrollado por Büttiker, [B86b, B86a] inspirado en la formulación

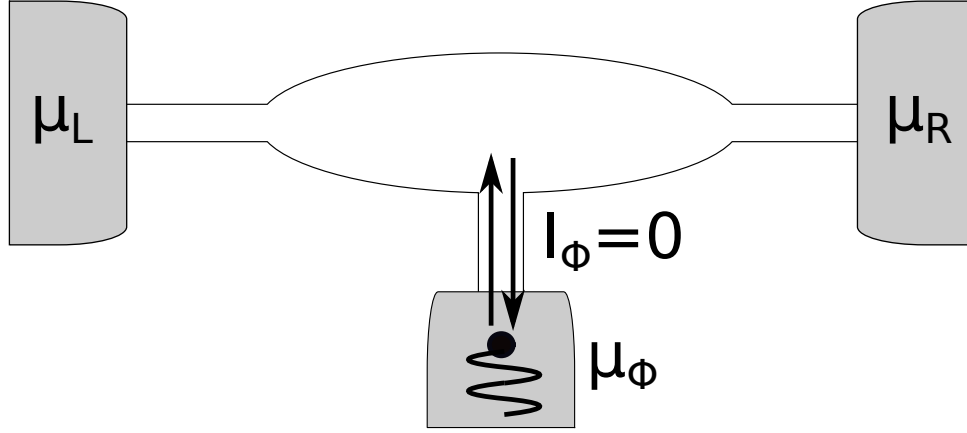


Figura 1.2: Representación esquemática de un sistema conectado a tres terminales. Dos de ellas, L y R , actúan como fuente y sumidero mientras que la tercera, ϕ , se conecta a un voltímetro y no transporta corriente neta. Los electrones que ingresan al voltímetro son medidos allí produciéndose un colapso de su función de onda. Por tanto pierden su correlación de fase respecto de los electrones en la muestra.

de Landauer. En esta última se considera que, en los reservorios, los electrones sufren interacciones de naturaleza irreversible. En consecuencia, los electrones que vienen de diferentes terminales son incoherentes entre ellos y, a la inversa, cuando las partículas entran en los reservorios, eventualmente termalizan y pierden su correlación de fase. Por ello, los reservorios asociados con cada terminal son la fuente última de irreversibilidad y decoherencia en los circuitos electrónicos.

Seguindo este razonamiento, Büttiker se dio cuenta de que la decoherencia puede ser introducida mediante un terminal conectado a un voltímetro. De hecho, resulta razonable que un voltímetro, al “medir” el número de electrones en el cable, produzca algún tipo de colapso de la función de onda, lo que lleva a la decoherencia. Adicionalmente, un terminal que conduzca a un voltímetro no debe transportar corriente. Esto nos asegura que un voltímetro no afecta la conservación de carga dentro de la muestra.

Esta idea clave puede ser fácilmente visualizada considerando un circuito de tres terminales como en la figura 1.2. Allí, dos terminales, la fuente L y el sumidero R , proveen una diferencia de potencial infinitesimal $\delta\mu_L - \delta\mu_R = eV$ que produce una corriente a través del sistema, mientras el tercer terminal, ϕ , se conecta al voltímetro. Las corrientes se evalúan usando la ecuación 1.7, que, en forma matricial resulta:

$$\begin{pmatrix} I_L \\ I_\phi \\ I_R \end{pmatrix} = \frac{e}{h} \begin{pmatrix} -(T_{\phi L} + T_{RL}) & T_{\phi L} & T_{RL} \\ T_{L\phi} & -(T_{L\phi} + T_{\phi R}) & T_{\phi R} \\ T_{LR} & T_{R\phi} & -(T_{LR} + T_{R\phi}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mu_L \\ \delta\mu_\phi \\ \delta\mu_R \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

La corriente a través del sistema entonces se puede escribir como:

$$I_R \equiv -I_L = \frac{e}{h} T_{RL} (\delta\mu_L - \delta\mu_R) + \frac{e}{h} T_{\phi L} (\delta\mu_L - \delta\mu_\phi). \quad (1.9)$$

En los voltímetros se satisface una condición de corriente nula

$$I_\phi = 0, \quad (1.10)$$

lo que permite el cálculo del potencial químico $\delta\mu_\phi$, resultando:

$$\delta\mu_\phi = \frac{1}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} (T_{\phi L}\delta\mu_L + T_{\phi R}\delta\mu_R). \quad (1.11)$$

Introduciendo $\delta\mu_\phi$ en la ecuación 1.9, obtenemos

$$I_R \equiv \frac{e}{h} \tilde{T}_{RL} eV, \quad (1.12)$$

donde

$$\tilde{T}_{RL} = \underbrace{T_{RL}}_{\text{coherente}} + \frac{T_{R\phi}T_{\phi L}}{\underbrace{T_{R\phi} + T_{\phi L}}_{\text{decoherente}}} \quad (1.13)$$

es la transmitancia efectiva. El primer término es la probabilidad de que la partícula viaje (coherentemente) desde L hasta R sin sufrir ningún proceso decoherente en el voltímetro ϕ . El segundo término da cuenta de aquellos electrones que escaparon hacia el canal ϕ y fueron reinyectados al sistema pero sin conservar coherencia. Es importante destacar que este modelo fenomenológico no provee una interpretación clara del origen de las $T_{i\phi}$ ni de cómo calcularlas.

1.2.2. Modelo D’Amato-Pastawski.

Si bien el modelo de Büttiker permite evaluar el transporte decoherente de manera simple y transparente, la situación ideal es poder evaluar las transmitancias a partir de Hamiltonianos electrónicos modelo que incluyan tanto la muestra como los cables y los procesos decoherentes. Este importante paso fue dado por D’Amato y Pastawski (DP) en 1990. [DP90]

La observación de D’Amato y Pastawski fue que cualquier estado electrónico “local” que está débilmente acoplado a un gran número de grados de libertad del ambiente debe decaer desde su estado inicialmente desacoplado sin involucrar efectos de memoria. Esta es precisamente la condición de validez de la regla de oro de Fermi (FGR por “*Fermi golden rule*”) [Pas07] que describe, por ejemplo, el decaimiento radiativo. Recordamos que la FGR resulta de regularizar la divergencia de una teoría de perturbaciones de segundo orden, lo que resulta en una corrección imaginaria $\Gamma_i = \hbar / (2\tau_i)$ a la energía del estado no perturbado E_i , que determina la escala temporal τ_i del decaimiento (ver Apéndice A.3). Así, el decaimiento de estos estados hacia canales decoherentes se describen mediante energías locales que tienen una componente imaginaria:

$$\hat{\Sigma}_{\phi i} = -i\Gamma_{\phi i} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i. \quad (1.14)$$

Aquí, la corrección imaginaria a la energía, $\Gamma_{\phi i}$, representa una incerteza en la energía asociada con los procesos de interacción ϕ que mezclan los estados electrónicos locales asociados al sitio i con los grados de libertad del ambiente. Es importante resaltar que el estado i no necesariamente representa una base local, sino que, por ejemplo, puede referirse a un modo colectivo de una guía de ondas o también a un estado de la base de momentos. Las incertezas en la energía debido a procesos decoherentes pueden ser estimadas para cada proceso específico, [CBP10] y podría no ser el mismo para cada estado i . En consecuencia, cada sitio i puede estar sujeto a diferentes procesos de decaimiento α : aquellos asociados a cables, $\alpha = \lambda$, y/o aquellos relacionados con procesos decoherentes, $\alpha = \phi$, siendo ambos casos indistinguibles desde el punto de vista de la ecuación 1.14 (ver Apéndice A.2).

Dado que las energías corregidas contienen componentes imaginarias, el Hamiltoniano efectivo resultante, $\hat{H}_{\text{eff.}}$, que incluye tanto los cables como los procesos decoherentes, es no Hermítico [Rot09]:

$$\hat{H}_{\text{eff.}} = \hat{H}_S + \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^N \hat{\Sigma}_{\alpha i}. \quad (1.15)$$

Aquí las *energías propias* (“*self-energies*”) $\Sigma_{\alpha i}$ serán nulas solo en aquellos sitios i no sujetos a procesos decoherentes ($\alpha = \phi$) ni a escapes hacia los cables ($\alpha = \lambda$) (ver figura 1.3). Trivialmente, si las correcciones imaginarias fueran todas homogéneas (el mismo valor para cada estado i), los autovalores del Hamiltoniano efectivo simplemente se correrían respecto de los autovalores del Hamiltoniano no perturbado, en un desplazamiento uniforme hacia el plano complejo. En contraste, se ha visto que las correcciones no homogéneas a las energías de sitio pueden producir una bifurcación espectral no-analítica que resulta en una transición de fase en la dinámica cuántica. [DBP08]

Estas correcciones a las energías de sitio o decaimientos producidos por los procesos decoherentes, $\Sigma_{\phi i}$, resultan formalmente equivalentes a las asociadas a un terminal real, $\Sigma_{\lambda i}$. Sin embargo hay una diferencia substancial a tener en cuenta: la condición de conservación del número de partículas requiere una eventual restitución o reinyección de cualquier partícula que escape. Al igual que en el modelo de Büttiker, el modelo DP trata estas fuentes de dispersión decoherente como voltímetros “ficticios”. Esto asegura que cada electrón con energía definida que se escapa de un sitio “ i ” hacia un canal decoherente es re-inyectado en el mismo sitio y *con la misma energía* pero sin correlación de fase.

El cálculo desde primeros principios de las tasas (“*rates*”) de decaimiento de los electrones hacia procesos decoherentes y su identificación con el escape hacia los voltímetros nos permiten obtener todas las transmitancias $T_{\phi\alpha}$ de la ecuación 1.8. Además, su naturaleza local da lugar a la posibilidad de incluir diversos procesos decoherentes distribuidos en distintos lugares del sistema.

La evaluación de los autovalores de la matriz Hamiltoniana \mathbb{H}_0 de un sistema cerrado puede hacerse a partir de las divergencias de su resolvente, $\mathbb{G}^{0R}(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} [(\varepsilon + i\eta)\mathbb{I} - \mathbb{H}_0]^{-1}$. El cálculo de las transmitancias en el sistema abierto descrito por un Hamiltoniano efectivo no-Hermítico $\mathbb{H}_{\text{eff.}}$, dado por 1.15, requiere de la función de Green retardada \mathbb{G}^R y la

función de Green avanzada \mathbb{G}^A definidas consecuentemente

$$\mathbb{G}^R(\varepsilon) = [\varepsilon\mathbb{I} - \mathbb{H}_{\text{eff}}]^{-1} = \mathbb{G}^{A\dagger}(\varepsilon). \quad (1.16)$$

Estas funciones de Green contienen toda la información de las energías y la dinámica de excitaciones en el sistema cuántico completo, incluyendo el acoplamiento a los cables y al ambiente. Por tanto, constituyen el núcleo para abordar computacional y conceptualmente el problema de transporte.

En particular, las amplitudes de transmisión de las excitaciones electrónicas entre los canales identificados con procesos α en el sitio i y procesos β en el sitio j pueden ser evaluadas a partir de la forma generalizada de la fórmula de Fisher-Lee [PM01, FL81]:

$$t_{\alpha i, \beta j}(\varepsilon) = i2 \sqrt{\Gamma_{\beta j}(\varepsilon)} G_{j,i}^R(\varepsilon) \sqrt{\Gamma_{\alpha i}(\varepsilon)}. \quad (1.17)$$

Estas amplitudes de transmisión son el elemento esencial de la formulación denominada matriz de dispersión desarrollada en física nuclear y extendida a los problemas de materia condensada. [Wei90]

Consecuentemente, las probabilidades de transmisión, o transmitancias, requeridas por la formulación de Landauer-Büttiker están dadas por:

$$\begin{aligned} T_{\beta j, \alpha i}(\varepsilon) &= |t_{\alpha i, \beta j}(\varepsilon)|^2 \quad (\alpha i \neq \beta j) \\ &= 4\Gamma_{\beta j}(\varepsilon)G_{j,i}^R(\varepsilon)\Gamma_{\alpha i}(\varepsilon)G_{i,j}^A(\varepsilon). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Aquí, $\Gamma_{\alpha i} = i(\Sigma_{\alpha,i}^R - \Sigma_{\alpha,i}^A)/2$ determina la tasa de decaimiento o velocidad de escape desde la muestra hacia el canal acoplado al sitio i debido al proceso α .¹ Por tanto una transmitancia entre los canales de propagación i y j es proporcional a la probabilidad $G_{j,i}^R(\varepsilon)G_{i,j}^A(\varepsilon) = |G_{j,i}^R(\varepsilon)|^2$ de que una excitación de energía ε salda del canal i llegue hasta el canal j multiplicada por las tasas de decaimiento hacia cada uno de esos canales.

Considerando todos los ingredientes del modelo DP discutidos más arriba, ya es posible calcular la corriente total a través del sitio i hacia el terminal (o proceso) α incluyendo todos los procesos decoherentes que se deseen. Usando esto en la ecuación 1.7 resulta:

$$I_{\alpha i} = \frac{|e|}{h} \left[(R_{\alpha i} - 1)\delta\mu_{\alpha i} + \sum_{\beta=L,\phi} \sum_{\substack{j=1 \\ \alpha i \neq \beta j}}^N T_{\alpha i, \beta j} \delta\mu_{\beta j} \right]. \quad (1.19)$$

El conjunto de todas las ecuaciones acopladas dadas por 1.19 puede ser dispuesto en una notación matricial compacta, separando los procesos asociados con los cables de los procesos decoherentes. Entonces, las corrientes hacia los cables se disponen en el vector \vec{I}_λ ,

¹Por el momento conservaremos la notación de doble índice, $(\alpha, i) = (\text{proceso}, \text{sitio})$. Sin embargo, con el fin de mantener una notación más concisa, luego omitiremos el índice de proceso.

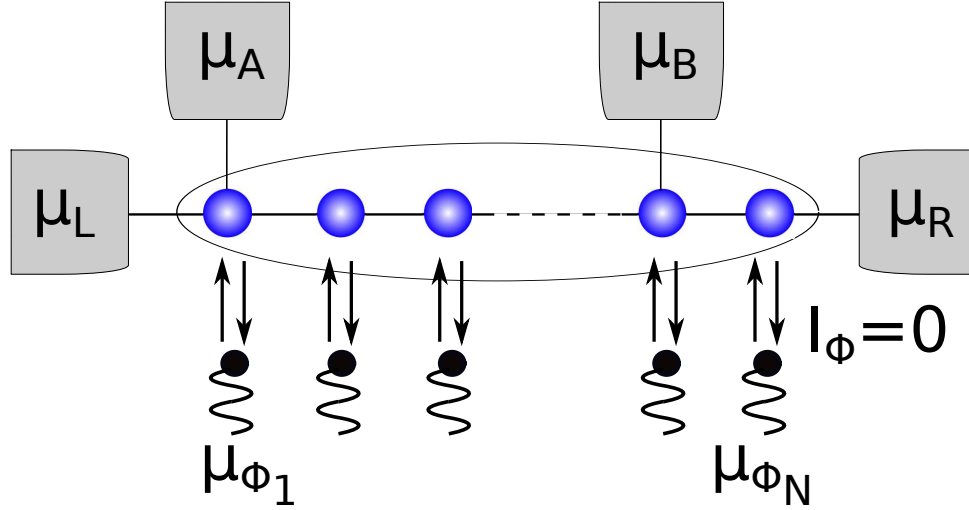


Figura 1.3: Esquema de un sistema multiterminal conectado a varios terminales y voltímetros, donde estos últimos representan procesos decoherentes. El sistema se representa a través de un Hamiltoniano de enlace fuerte donde los sitios pueden estar conectados a terminales de corriente o bien sufrir eventos decoherentes.

mientras que las corrientes hacia procesos decoherentes se disponen en \vec{I}_ϕ . Recordando que $\vec{I}_\phi \equiv \vec{0}$, obtenemos

$$\begin{pmatrix} \vec{I}_\lambda \\ \vec{0} \end{pmatrix} = \frac{|e|}{h} \mathbb{T} \begin{pmatrix} \delta\vec{\mu}_\lambda \\ \delta\vec{\mu}_\phi \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

Aquí, los elementos no diagonales de \mathbb{T} son las probabilidades de transmisión y por lo tanto son definidas positivas. En contraste, los elementos de la diagonal son negativos, acorde a la ecuación 1.19. La conservación del número de partículas se ve reflejada en que la suma sobre los elementos de cualquier fila o columna se anula. Esta matriz también se puede subdividir en la misma estructura de bloques:

$$\mathbb{T} = \begin{bmatrix} \mathbb{T}_{\lambda\lambda} & \mathbb{T}_{\lambda\phi} \\ \mathbb{T}_{\phi\lambda} & \mathbb{T}_{\phi\phi} \end{bmatrix}. \quad (1.21)$$

Esta notación recalca que $\mathbb{T}_{\lambda\lambda}$ sólo involucra términos que conectan terminales reales, $\mathbb{T}_{\phi\phi}$ vincula solamente transmitancias entre canales decoherentes y finalmente, los bloques $\mathbb{T}_{\lambda\phi}$ y $\mathbb{T}_{\phi\lambda}$ conectan cables con procesos decoherentes. Se puede usar la condición de corriente nula sobre los canales decoherentes, $\vec{I}_\phi \equiv \vec{0}$, para calcular los potenciales químicos en los canales decoherentes $\delta\vec{\mu}_\phi$, resultando:

$$\delta\vec{\mu}_\phi = [-\mathbb{T}_{\phi\phi}]^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \delta\vec{\mu}_\lambda. \quad (1.22)$$

Aquí, $\delta\vec{\mu}_\phi$ provee el perfil de los potenciales químicos dentro de la muestra en cada sitio que experimenta decoherencia. Si cada sitio representa un punto en el espacio, la ecuación 1.22

nos informa acerca de las caídas locales de potencial debido a los procesos decoherentes. De hecho, se puede demostrar que en el límite continuo y para sistemas lo suficientemente grandes, esta caída de potencial resulta lineal en concordancia con la ley de Ohm. [DP90]

Aplicando un proceso denominado *decimación* por bloques (ver Apéndice A.1), podemos eliminar en la ecuación 1.20 los potenciales químicos dados por 1.22, llegando a la expresión para la corriente efectiva

$$\vec{I}_\lambda = \frac{e}{h} \tilde{\mathbb{T}}_{\lambda\lambda} \vec{\delta\mu}_\lambda. \quad (1.23)$$

con lo cual, las conductancias efectivas adimensionales son los elementos no diagonales de la matriz

$$\tilde{\mathbb{T}}_{\lambda\lambda} = \mathbb{T}_{\lambda\lambda} + \mathbb{T}_{\lambda\phi} [-\mathbb{T}_{\phi\phi}]^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda}. \quad (1.24)$$

Aquí, el primer término representa las transmisiones coherentes mientras que el segundo, involucra la inversión de una matriz de dimensión $N \times N$, donde N es el número de sitios que sufren procesos decoherentes. Esta forma multiterminal del modelo DP converge a la formulación original para $\lambda = \{L, R\}$, donde podemos identificar la matriz $[-\mathbb{T}_{\phi\phi}]$ con la matriz \mathbb{W} de la referencia [DP90].

1.3. Transporte cuántico dependiente del tiempo

Para abordar fenómenos de transporte que involucran dependencia temporal, uno puede recurrir a la versión dinámica de las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker (GLBEs por sus siglas en inglés). [Pas92] En ellas, Pastawski usó la teoría cuántica de campos para obtener que pequeñas excitaciones electrónicas $\delta\varepsilon$ de un mar de Fermi, en una aproximación semiclassical, describen dependencias temporales de la corriente en escalas lentas $t \gtrsim \hbar/\delta\varepsilon \gg \hbar/\varepsilon_F$. [AGD63, Dan84] En esta formulación, se generalizan las expresiones de Fisher-Lee para evaluar “transmitancias retardadas por unidad de tiempo”, $T_{ji}(t)$ definidas como:

$$T_{ji}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} 4\Gamma_j(\varepsilon) G_{j,i}^R(\varepsilon + \frac{1}{2}\hbar\omega) \Gamma_i(\varepsilon) G_{i,j}^A(\varepsilon - \frac{1}{2}\hbar\omega) \exp[-i\omega t] \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (1.25)$$

donde por simplicidad no se ha explicitado la dependencia en ε de las $T_{ji}(t)$. Con ellas, la corriente en un cable i a un tiempo t , resulta

$$I_i(t) = -\frac{e}{h} \underbrace{\sum_j \int_t^\infty T_{ji}(t' - t) \delta\mu_i(t) dt'}_{\text{salen}} + \underbrace{\sum_j \int_{-\infty}^t T_{ij}(t - t') \delta\mu_j(t') dt'}_{\text{entran}}. \quad (1.26)$$

La generalización de las ecuaciones formuladas por Büttiker al régimen temporal resulta obvia. Al igual que en las ecuaciones 1.3, 1.4 y 1.7, la corriente resulta de un balance entre las contribuciones que “salen” y que “entran” del cable i . El primer término corresponde

a la corriente que sale del cable i a un tiempo t y que llega a un tiempo (futuro) t' a un cable j con un coeficiente de transmisión $T_{ji}(t' - t)$. Del mismo modo, el segundo término de la ecuación 1.26 es la corriente que llega a i habiendo sido inyectada desde un cable j en $t' \leq t$ y que tiene un coeficiente de transmisión por unidad de tiempo $T_{ij}(t - t')$.

La ecuación 1.26 puede ser simplificada en gran medida al definir la transmitancia de paquetes con energía ε , como

$$T_{ji} = \int_t^\infty T_{ji}(t' - t) dt', \quad (1.27)$$

es decir los electrones que al tiempo t están partiendo del reservorio i y que alguna vez llegarán al reservorio j . Esta es, de hecho, la transmitancia en el estado estacionario. Supongamos que nuestra definición algorítmica de $T_{ji}(t \geq 0)$ pueda extenderse para $j = i$ y que su integral resulte finita $T_{ii} = \int_t^\infty T_{ii}(t' - t) dt'$. Dado que no excluimos el índice $j = i$ en la suma sobre los terminales en la ecuación 1.26, necesitamos hacer estas definiciones: $R_i = \bar{R}_i + T_{ii} = 1 - \sum_j T_{ji} + T_{ii}$. Luego, la ecuación 1.26 queda

$$I_i(t) = -\frac{e}{h}[1 - \bar{R}_i]\delta\mu_i(t) + \frac{e}{h} \sum_j \int_{-\infty}^t T_{ij}(t - t')\delta\mu_j(t') dt'. \quad (1.28)$$

Aún usando estas simplificaciones, la resolución de la ecuación 1.26 requiere la memoria de los procesos de inyección en cada cable para todos los tiempos previos a t . Esto resulta en una integral temporal auto-consistente sobre todo el rango $(-\infty, t)$ para cada tiempo t . Así, a pesar de que la ecuación 1.28 provee un método para evaluar el transporte con dependencia temporal en términos de los operadores de evolución cuánticos, [Pas92] éstas resultan complejas de calcular y costosas numéricamente en términos de memoria computacional.

En sistemas dependientes del tiempo, la decoherencia fue incorporada a través de la ecuación 1.28 considerando algunos de los canales como procesos decoherentes, donde estos satisfacen $I_\phi(t) \equiv 0$. [Pas92] Sin embargo, como hemos mencionado, la resolución de las ecuaciones requieren el conocimiento previo de toda la historia del sistema en cada reservorio incluyendo en este caso los adicionales canales decoherentes. Así, la complejidad y el excesivo costo computacional de este procedimiento vuelve poco práctica a esta formulación, más aún que para el caso coherente. Por lo tanto, a lo largo de esta tesis vamos a buscar otras estrategias que nos permitan superar estas dificultades y así poder abordar el problema de la dinámica del transporte de electrones cuando se incluyen eventos decoherentes.

1.4. Organización de esta tesis

A lo largo de esta tesis se abordaron distintos aspectos del transporte cuántico en presencia de eventos decoherentes buscando extender el conocimiento y las herramientas teóricas acumuladas a lo largo de los años en el grupo. Distintos interrogantes, que sin

embargo están íntimamente relacionados, motivaron los trabajos que componen esta tesis. Entre ellos queremos destacar:

¿Cuál es el rol que juega la decoherencia en los procesos de transporte cuántico cuando hay procesos capaces de invertir la orientación de espín? En particular, esta situación está presente en la magnetorresistencia gigante (GMR) [Fer08, Fer11] y debería jugar un rol en el transporte a través de paredes de domino magnético y, consecuentemente, en el eventual movimiento de dichas paredes inducido por las colisiones de las cargas.

¿Es posible desarrollar un método de cálculo que permita la inclusión de eventos decoherentes directamente en la dinámica de paquetes de onda? Dado que una evolución cuántica solo depende del estado en el instante anterior, esto permitiría el cálculo del transporte cuántico decoherente dependiente del tiempo de manera sencilla y computacionalmente eficiente superando los demandantes requerimientos de las GLBEs para la evaluación de la memoria cuántica.

En un determinado sistema cuántico, cuando los electrones colisionan ceden cierta cantidad de impulso induciendo fuerzas mecánicas que ejercen su influencia sobre los grados de libertad del sistema [BAL⁺12, AvO15] y es incluso esperable que estas puedan posibilitar el diseño de nanomotores. Una implementación de este concepto lo constituyen los motores cuánticos adiabáticos (AQM), [BMRvO13, Avr13] ¿Cuál sería el rol de la decoherencia en las fuerzas inducidas por corriente en un AQM?

Entender estas preguntas generales y los detalles que surgen de sus desarrollos nos permitirá, por ejemplo:

- Comprender la transición del régimen de transporte cuántico al régimen Ohmico mediado por decoherencia en el contexto de la GMR.
- Recuperar el significado de la función de onda frente a la descripción en términos de matriz densidad.
- Interpretar, en nuestra descripción dinámica, la decoherencia presente en el estado estacionario como una consecuencia de la fluctuación dinámica de las energías locales.
- Comprender cómo los fenómenos de fluctuación que producen la decoherencia inducen mecanismos de fricción adicionales en motores cuánticos adiabáticos.

Esta tesis está organizada de la siguiente manera:

- En el **capítulo 2** tratamos el problema de la conductancia cuántica dependiente del espín en un cable donde hay un campo magnético espacialmente modulado. Las distintas proyecciones del espín se representan por canales de conducción independientes que resultan acoplados por la precesión coherente de la proyección de espín inducida por el campo local. Este problema provee un marco adecuado para estudiar y comparar el transporte en el estado estacionario con la propagación dinámica de paquetes de onda. En este capítulo, además, se estudia la naturaleza de ciertas oscilaciones del transporte como función de la geometría de sistemas modelo que habían sido observadas previamente, y que fueron asociadas con interferencias de Fabry-Pérot,[GWJS04] reassignándolas como un efecto de oscilaciones dinámicas tipo Rabi.

- En el **capítulo 3** presentamos una descripción que nos permite estudiar el fenómeno de la magnetorresistencia gigante. A través del modelo DP, incorporamos procesos decoherentes en un modelo para una válvula de espín. Allí, las orientaciones del espín se representan como canales de conducción independientes que, sin embargo, resultan acoplados por procesos aleatorios que revierten la dirección del espín. Presentamos el cálculo de las caídas de potencial y las corrientes locales, y mostramos que nuestros resultados son consistentes con resultados previos.
- En el **capítulo 4** desarrollamos e implementamos un modelo que permite incluir decoherencia en la dinámica de paquetes de onda. El modelo, que denominamos corrimientos cuánticos (“*quantum drifts model*”), resulta particularmente adaptable a esquemas de transporte dependiente del tiempo en términos de una función de onda parcialmente estocástica, cuyas fases locales fluctúan alrededor de la energía en una base local. Sin embargo, este modelo no se limita únicamente a la conductancia ya que mostramos que puede ser utilizado con ventajas para tratar dinámicas de sistemas cerrados en presencia de decoherencia, tanto en problemas de una partícula como de muchas partículas interactuantes. En un sistema de espines interactuantes, la perturbación se identifica naturalmente con fluctuaciones locales de la energía de interacción mutua así como las debidas al ambiente local.
- En el **capítulo 5** nos preguntamos acerca del rol de la decoherencia en las fuerzas inducidas por corrientes. Para abordar este problema, extendemos el modelo DP para considerar la dinámica de sistemas bajo regímenes de movimiento adiabático. Demostramos que nuestro modelo presenta consistencia interna, requerida por el Teorema de Fluctuación-disipación y las relaciones de reciprocidad de Onsager. Aplicamos este procedimiento para el estudio del efecto de la decoherencia sobre motores cuánticos adiabáticos demostrando, en particular, que la decoherencia puede activar la operación de un motor.
- En el **capítulo 6** se presenta un resumen de las principales contribuciones derivadas del trabajo de tesis. Además se incluye una breve discusión de posibles sistemas físicos en los que podrían aplicarse los métodos desarrollados en esta tesis, así como también de potenciales ramificaciones o extensiones de las líneas desarrolladas.

Capítulo 2

Transporte dependiente de espín a través de campos magnéticos modulados

2.1. Introducción

El diseño y control de dispositivos modulados magnéticamente para el transporte electrónico dependiente de espín representa un desafío tecnológico prometedor. [vFDS04] Los dispositivos llamados espintrónicos cambian el estado de espín o filtran a los electrones de acuerdo a este grado de libertad. La forma más directa de controlar el transporte, más allá de los efectos de espín órbita, [SEL03, RUB⁺08] es diseñar inhomogeneidades magnéticas, las cuales se acoplan directamente con el espín. Los dispositivos más prominentes son aquellos basados en el fenómeno de magnetorresistencia gigante. [Fer08, VF93] Por otro lado, desarrollos recientes utilizan válvulas de espín basadas en moléculas orgánicas, [SGL⁺13, Ded13] y transistores de espín cuasi-unidimensionales. [BDS⁺12, SDR12] Ya que en esta escala molecular los efectos cuánticos se vuelven relevantes, la descripción del transporte utiliza la idea de Landauer, de que “la conductancia es transmitancia”. [IL99]

Estudios previos de transporte cuántico sugieren la presencia de fenómenos físicos interesantes. Por ejemplo, la conductancia a través de nanohilos ferromagnéticos con una pared de dominio muestran algunas interferencias identificadas como de Fabry-Perot, que no han sido completamente entendidas. [GWJS04, FJWS04] Además, el transporte en válvulas de espín semiconductoras [SDR12] puede presentar regímenes compatibles con el problema de Landau-Zener. Por otro lado, el transporte cuántico a través de inhomogeneidades magnéticas se ha vuelto una herramienta prometedora en espintrónica, donde las diferentes escalas de tiempo y longitud aún deben ser identificadas. En este contexto, una descripción dinámica de los procesos de transporte mejorarían la comprensión de estos fenómenos.

En este capítulo consideramos una variante del modelo de Cabrera y Falicov [CF74]

para transporte electrónico dependiente del espín a través de una pared de dominio suave. Esta variante es representativa de una amplia clase de inhomogeneidades magnéticas. En el modelo original, la magnetización simplemente precesa alrededor de la pared de dominio magnético. Aquí extendemos esta propuesta permitiendo una modulación en la intensidad del campo dentro de la pared. En efecto, diferentes cálculos de primeros principios han mostrado que la magnetización neta puede verse reforzada [CYM08] o debilitada [BSJ⁺06] en la región donde gira debido a la pared de dominio. Esta simple variación tiene consecuencias no triviales en el transporte. Mostramos que en un régimen de baja intensidad dentro de la pared, la conductancia dependiente de espín puede ser evaluada como un problema de transición a través de un cruce evitado, y por consiguiente descrita por la fórmula de Landau-Zener. En contraste, para un régimen de intensidad fuerte, encontramos interferencias bien definidas como función del ancho de la pared de dominio, las cuales son interpretadas como oscilaciones de Rabi. Esta interpretación es confirmada por un análisis de la dinámica de paquetes de onda. Para cualquier aplicación práctica de este fenómeno es imprescindible que las oscilaciones no sean particularmente sensibles frente a procesos que ocasionan decoherencia. Es por ello que, en la sección final de este capítulo, mediante cálculos de estado estacionario basados en el modelo D'Amato-Pastawski verificamos la robustez de estas oscilaciones frente a decoherencia.

2.2. Hamiltoniano de los electrones de conducción

Cuando los electrones se propagan a lo largo de un alambre semiconductor o magnético, su pequeña sección eficaz produce la cuantización de su energía cinética a lo largo de las dimensiones transversales, digamos y y z . Esto deja un número finito de modos transversales con energías más abajo del nivel de Fermi y que se asocian a los canales de conducción a lo largo del cable (dirección x). Por ello, la corriente que viaja a través del sistema debería calcularse realizando la suma sobre los pocos canales de conducción. En este trabajo vamos a analizar el transporte en uno de estos canales, donde el Hamiltoniano electrónico dependiente del espín es [GWJS04]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}(x). \quad (2.1)$$

El primer término es la energía cinética de los electrones con masa efectiva m a lo largo de la dirección x . El segundo término, análogo a una interacción Zeeman, es el acople entre el momento magnético de espín $\vec{\mu}$ y el campo magnético efectivo en x , $\vec{B}(x)$. Aquí, $\vec{\mu} = -\mu_B \vec{\sigma}$, donde μ_B es el magnetón de Bohr y $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli. En particular, la dependencia en x de la magnitud y dirección de $\vec{B}(x)$ puede causar dispersión (*scattering*) dependiente de espín. Estas inhomogeneidades pueden ser naturales, como en paredes de dominio ferromagnéticas, [CYM08, BSJ⁺06] o generadas artificialmente como en guías de ondas magnéticas semiconductoras. [BDS⁺12] Vamos a optar por expresar nuestros resultados en el lenguaje concreto de los nanohilos ferromagnéticos.

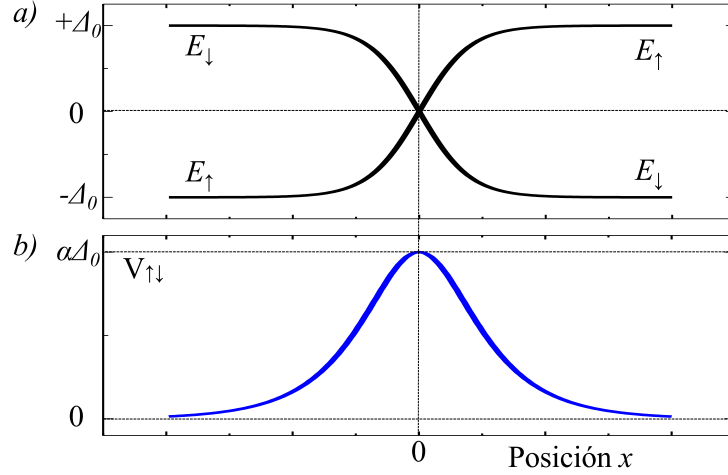


Figura 2.1: a) Energía Zeeman local no perturbada para ambas orientaciones del espín. b) Intensidad de los procesos de inversión de espín descritos por el parámetro $V_{\uparrow\downarrow}$. Estos procesos tienen su máxima intensidad en el interior de la pared de dominio y se desvanecen en los dominios. Las magnitudes $E_{\uparrow(\downarrow)}$ y $V_{\uparrow\downarrow}$ se encuentran descritas por las ecuaciones 2.5 y 2.6.

2.3. Estructura electrónica en campos magnéticos modulados.

Cabrera y Falicov describen a una pared de dominio considerando un campo magnético cuya orientación gira mientras se avanza a lo largo de la pared y dos canales de conducción a lo largo de x , uno por cada proyección de espín.[CF74] Nosotros generalizamos esta descripción al incluir una modulación en la intensidad del campo. El vector $\vec{f}(x) = (f_x(x), f_y(x), f_z(x)) = -\vec{B}(x)/B_\infty$, describe la forma de la pared de dominio y B_∞ es tal que se satisface $|\vec{f}(x)| \rightarrow 1$ si $x \rightarrow \pm\infty$. Usando el eje z como la dirección de cuantización para el espín,

$$\vec{f}(x) = \left(\alpha / \cosh\left(\frac{x}{W}\right), 0, \tanh\left(\frac{x}{W}\right) \right). \quad (2.2)$$

Aquí, W es el semi-ancho de la pared. La asimetría en la intensidad de la modulación está descrita por el parámetro $\alpha = B(0)/B_\infty$. Obviamente, $\alpha = 1$ corresponde a un campo de intensidad constante que gira espacialmente dentro de la pared, lo cual corresponde al modelo original de Cabrera y Falicov. El término Zeeman es $\vec{\mu} \cdot \vec{B}(x) = \Delta_0 \vec{\sigma} \cdot \vec{f}(x)$, donde $\Delta_0 = \mu_B B_\infty$. La función de onda para un electrón de conducción tiene componentes en ambas direcciones, $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, referidas al eje de cuantización paralelo al campo (dirección z) en el dominio izquierdo,

$$|\psi(x)\rangle = \varphi_{\uparrow}(x) |x, \uparrow\rangle + \varphi_{\downarrow}(x) |x, \downarrow\rangle. \quad (2.3)$$

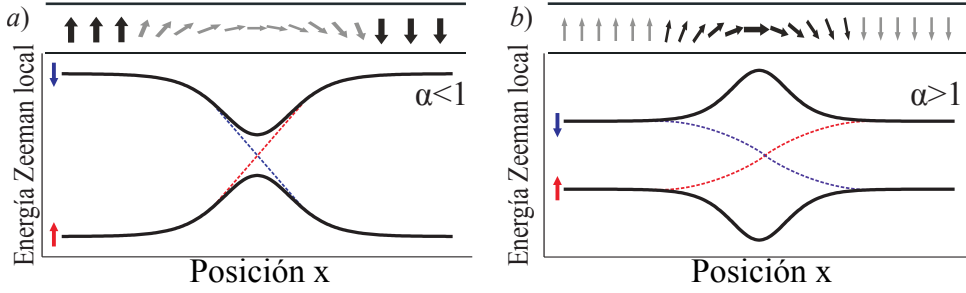


Figura 2.2: Las líneas sólidas son las autoenergías locales para electrones con espín \uparrow y \downarrow en presencia de un campo rotado localmente, que es esquematizado en la parte superior de la figura. La intensidad del campo es a) débil ($\alpha < 1$) o b) fuerte ($\alpha > 1$) en el centro de la pared de dominio. Las líneas de guiones son las energías Zeeman no perturbadas.

Por lo tanto, las ecuaciones que gobiernan el tuneleo (*tunneling*) de los electrones y la inversión de espín son:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_{\uparrow}(x) + E_{\uparrow}(x) \varphi_{\uparrow}(x) + V_{\uparrow\downarrow}(x) \varphi_{\downarrow}(x) = \varepsilon \varphi_{\uparrow}(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_{\downarrow}(x) + E_{\downarrow}(x) \varphi_{\downarrow}(x) + V_{\downarrow\uparrow}(x) \varphi_{\uparrow}(x) = \varepsilon \varphi_{\downarrow}(x), \end{cases} \quad (2.4)$$

donde ε es la energía asociada con la dinámica en dirección x , identificando

$$\mu_B B_z(x) = E_{\downarrow}(x) = \Delta_0 \tanh\left(\frac{x}{W}\right), \text{ y} \quad (2.5)$$

$$\mu_B B_x(x) = V_{\uparrow\downarrow}(x) = \alpha \Delta_0 / \cosh\left(\frac{x}{W}\right). \quad (2.6)$$

Las energías de los estados de espín, identificadas como energías Zeeman, cumplen $E_{\downarrow}(x) = -E_{\uparrow}(x)$. Por tanto, éstas presentan un cruce en el centro de la pared ya que $E_{\downarrow}(x=0) = E_{\uparrow}(x=0) = 0$, como puede verse en la figura 2.1 a). El acople entre espines, $V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\uparrow}$, se desvanece en los dominios mientras que toma su valor máximo en el centro de la pared, $V_{\uparrow\downarrow}(x=0) = \alpha \Delta_0$, como se ilustra en la figura 2.1 b). Allí, los estados de espín se mezclan debido a $V_{\uparrow\downarrow}(x)$ mientras el electrón se mueve a través de la pared. En consecuencia, el cruce se convierte en un cruce evitado donde la separación de las energías de los autoestados locales está dada por $2V_{\uparrow\downarrow}(x=0)$ (ver figura 2.2).

2.4. Conductancia

Para evaluar la conductancia cuántica utilizaremos el formalismo de Landauer-Büttiker multiterminal descrito en el capítulo anterior. Las diferentes conductancias están dadas por las transmitancias entre estados de momento y espín definido en los contactos. En

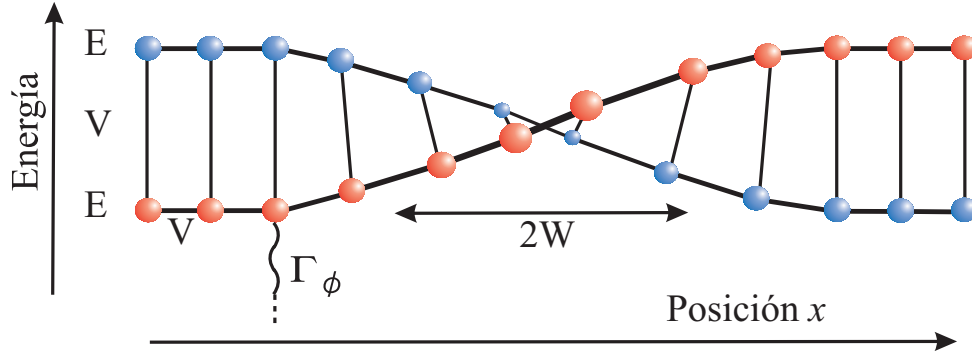


Figura 2.3: Representación esquemática del Hamiltoniano en un modelo de enlaces fuertes (*tight-binding*). Cada una de las cadenas representa un estado de espín, $|\uparrow\rangle$ ó $|\downarrow\rangle$, cuya energía Zeeman local depende de la posición x . Los “peldaños” de la escalera son las amplitudes de los procesos de inversión de espín $V_{\uparrow\downarrow}$. El ancho efectivo de la pared de dominio, $2W$, determina el paso de rotación de la escalera. Una incerteza en la energía local Γ_ϕ debida a los procesos decoherentes produce un escape del haz coherente que se compensa localmente por una reinyección incoherente (ver sección 2.7). (La variación del tamaño de los sitios, así como la inclinación de las líneas de conexión entre cadenas, es a efectos meramente artísticos.)

una representación de enlace fuerte (*tight-binding*), [PM01] la coordenada espacial toma valores discretos x_n en una grilla de unidad a . Cada sitio en la grilla tiene una función de onda localizada $|n\rangle$, que llamaremos el orbital n –ésimo, como en un esquema LCAO. Cada orbital tiene una energía dada por el potencial local $E_s(x_n) = E_{n,s}$, donde s es el índice de espín y toma valores \uparrow o \downarrow , y el campo transverso da $V_{\uparrow\downarrow}(x_n) = V_{n,\uparrow\downarrow}$. Una función de onda con espín definido puede ser escrita en términos de una suma discreta

$$|\varphi_s\rangle \rightarrow \sum_n u_{n,s} |n, s\rangle, \quad (2.7)$$

donde, de acuerdo con 2.4, las amplitudes de los orbitales $u_{n,s}$ deben satisfacer,

$$\begin{cases} -V [u_{n+1,\uparrow} - 2u_{n,\uparrow} + u_{n-1,\uparrow}] + E_{n,\uparrow}u_{n,\uparrow} + E_{n,\uparrow}u_{n,\uparrow} + V_{n,\uparrow\downarrow}u_{n+1,\downarrow} = \varepsilon u_{n,\uparrow} \\ -V [u_{n+1,\downarrow} - 2u_{n,\downarrow} + u_{n-1,\downarrow}] + E_{n,\downarrow}u_{n,\downarrow} + E_{n,\downarrow}u_{n,\downarrow} + V_{n,\uparrow\downarrow}u_{n+1,\uparrow} = \varepsilon u_{n,\downarrow} \end{cases} \quad (2.8)$$

La unidad de energía está dada por el valor del parámetro de salto (*hopping*) $V = \hbar^2/(2ma^2)$. Vamos a considerar energías cercanas al centro de banda ($\varepsilon \simeq 2V$). Un esquema de enlace fuerte que representa este problema se muestra en la figura 2.3. Cada orientación de espín está representada por una cadena con número de orbitales $N \gg 1$ que comprende la pared de dominio por completo. Los índices L y R corresponden a sitios ubicados simétricamente a la izquierda y la derecha de la pared de dominio y satisfacen $(R - L)a = Na \gg W$. Luego $E_{n,s} \equiv E_{L,s} = \pm\Delta_0$ para $n \leq L$ y $E_{n,s} \equiv E_{R,s} = \mp\Delta_0$ para

$n \geq R$. Dado que lejos de la pared de dominio $V_{\uparrow\downarrow} \equiv 0$, los autovalores asintóticos con vector de onda k , son

$$\varepsilon_{k,s} = \pm\Delta_0 + 2V - 2V \cos(ka). \quad (2.9)$$

En la región de la pared, ambas orientaciones de espín se acoplan debido a la componente perpendicular del campo magnético, representada por el parámetro de salto $V_{n,\uparrow\downarrow}$.

Los dominios magnéticos, que actúan como contactos, son descritos mediante un procedimiento de renormalización (ver Apéndice A.2). [LPD90, PM01] En un sistema abierto, esto nos da un Hamiltoniano efectivo no Hermítico [Pas07]

$$\hat{H}_T = \hat{H} + \hat{\Sigma}, \quad (2.10)$$

donde

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}(\varepsilon) &= \Sigma_{L\uparrow}(\varepsilon) |L \uparrow\rangle \langle L \uparrow| + \Sigma_{L\downarrow}(\varepsilon) |L \downarrow\rangle \langle L \downarrow| \\ &+ \Sigma_{R\uparrow}(\varepsilon) |R \uparrow\rangle \langle R \uparrow| + \Sigma_{R\downarrow}(\varepsilon) |R \downarrow\rangle \langle R \downarrow|. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Σ_j son las self-energies que satisfacen la ecuación de Dyson en los dominios magnéticos:

$$\Sigma_j(\varepsilon) = \frac{V^2}{\varepsilon - E_j - \Sigma_j(\varepsilon)} = \text{Re}\Sigma_j(\varepsilon) - i\Gamma_j(\varepsilon) \quad (2.12)$$

$$\simeq -i\Gamma_j, \text{ en el centro de banda.} \quad (2.13)$$

El doble subíndice espín-orbital $j = L \uparrow, L \downarrow, R \uparrow$ o $R \downarrow$ indica el canal izquierdo (L) o el derecho (R) dentro de los dominios magnéticos con la orientación de espín correspondiente. $2a\Gamma_j/\hbar$ es la velocidad de grupo en los canales de espín j conectados a cada orbital a los lados, es decir $L \uparrow, L \downarrow, R \uparrow$ y $R \downarrow$ en un circuito de cuatro terminales.

A través del Hamiltoniano \hat{H}_T obtenemos las funciones de Green retardada y avanzada: $\hat{G}^R(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} (\varepsilon + i\eta - \hat{H}_T)^{-1}$ y $\hat{G}^A = \hat{G}^{R\dagger}$, respectivamente. Luego, la transmitancia se obtienen a partir de la fórmula de Fisher y Lee 1.18 que, en esta representación de enlace fuerte resulta [PM01, FL81, Dat95]

$$T_{ij}(\varepsilon) = 2\Gamma_i(\varepsilon) |G_{ij}^R(\varepsilon)|^2 2\Gamma_j(\varepsilon), \quad (2.14)$$

donde $i, j = L \uparrow, L \downarrow, R \uparrow, R \downarrow$, siendo j el canal de entrada y i el de salida. Cuando evaluamos el transporte entre canales de espín que corresponden a proyecciones de espín opuestas en lados contrarios de la pared le llamaremos transmitancias de inversión de espín (*spin-flip*) denotándolas con $T_{\downarrow\uparrow}$.

2.5. Transporte a través de una modulación débil: el problema de Landau-Zener

En la ecuación 2.4 se evidencia que $V_{\uparrow\downarrow}$ es responsable de la mezcla de las orientaciones de espín. Aunque $V_{\uparrow\downarrow}(x)$ se anula en los dominios, podemos considerar que resulta

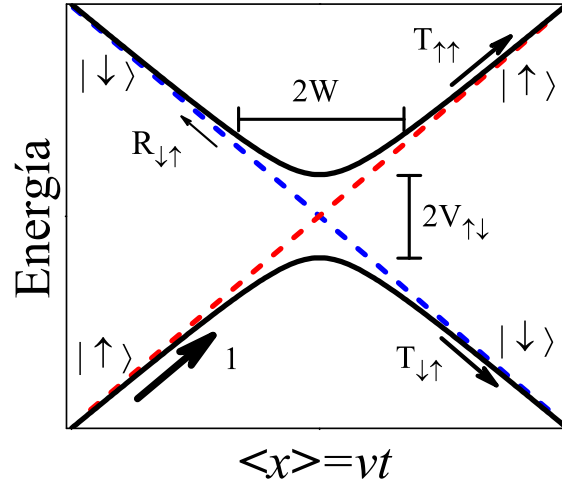


Figura 2.4: Esquema de las autoenergías de un sistema de dos niveles, $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, en función del parámetro dinámico, $\langle x \rangle = vt$, que controla la transición de Landau-Zener. Los niveles de energía muestran un cruce evitado debido a la presencia de una perturbación que acopla los estados. Las energías en ausencia de la perturbación se muestran con líneas de guión. La energía y la coordenada tienen dimensiones arbitrarias.

aproximadamente constante en el centro de la pared de dominio. Adicionalmente, E_{\uparrow} y E_{\downarrow} dan cuenta de la energía Zeeman en el referencial de laboratorio y tienen el sentido de potenciales efectivos para aquellos electrones cuyo espín esté orientado en la dirección del campo. Mientras en los dominios $E_{\uparrow} - E_{\downarrow} = 2\Delta_0$, que corresponde al valor del desdoblamiento Zeeman, en el centro de la pared de dominio ambas energías se interceptan, $E_{\uparrow} = E_{\downarrow} = 0$.

Considere un paquete de ondas que representa la función de onda del electrón, con una dada proyección de espín y que se mueve con momento definido hacia la pared de dominio. Su posición media resulta proporcional al tiempo transcurrido $\langle x(t) \rangle \equiv x \simeq v_F t$. La energía potencial media, que depende del espín, cambiará acorde el paquete se traslada a lo largo de la pared, situación en la que el término $V_{\uparrow\downarrow}$ comienza a invertir las orientaciones de espín. Dichas energías potenciales se pueden identificar como las energías dependientes del tiempo del sistema de dos niveles en un problema de Landau-Zener.[Zen32]

El problema de Landau-Zener consiste en un sistema de dos niveles, donde sus energías no perturbadas tienen un cruce y un término adicional constante (no diagonal) en el Hamiltoniano que acopla ambos estados. La región donde los estados deberían estar degenerados se convierte en un cruce evitado debido a la perturbación, como se muestra en la figura 2.4. Consideremos un estado de espín inicialmente preparado en \uparrow del lado izquierdo del cruce. Si x se incrementa con el tiempo barriendo las energías a través del cruce evitado, entonces ¿cuál será el estado de espín en que el sistema emerge del lado derecho? La fórmula de Landau-Zener describe esta transición entre dos estados que son barridos a través del cruce evitado para el caso más simple, en que las energías varían

linealmente con x , y por ende, con el tiempo.

En la figura 2.4 se muestra el diagrama de energías en la región de la pared de dominio. La comparación entre este diagrama y los niveles Zeeman, en la figura 2.2a), evidencia la analogía entre el problema de Landau-Zener y el régimen $\alpha < 1$. Luego, la probabilidad de salir en el estado $|\downarrow\rangle$ a la derecha dado que inicialmente el estado a la izquierda era $|\uparrow\rangle$ está dada por la fórmula de Landau Zener,

$$P_{\downarrow\uparrow} = 1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{\hbar} \frac{|V_{\uparrow\downarrow}|^2}{(dE(0)/dt)}\right). \quad (2.15)$$

Aquí podemos usar $E(x) = E_{\uparrow}(x) - E_{\downarrow}(x)$ y $x \simeq v_F t$ para evaluar la derivada. Es evidente que el comportamiento en el cruce evitado depende de las pendientes de los niveles de energía y también de la tasa en que x cambia en el tiempo comparada con $V_{\uparrow\downarrow}$. Así, el “parámetro de adiabaticidad”, $2\pi |V_{\uparrow\downarrow}|^2 / (\hbar dE/dt)$, describe una transición completamente adiabática si es mucho mayor a la unidad, dando como resultado $P_{\downarrow\uparrow} \lesssim 1$, mientras que el límite opuesto es un proceso diabático donde $P_{\downarrow\uparrow} \gtrsim 0$.

Vamos a considerar un paquete de ondas con $\varepsilon_F \gg \Delta_0$ y $v_F(x) \simeq 2aV/\hbar$. Luego, el tiempo de tránsito a través de la pared es $\tau_W = 2W/v_F$. El cruce del paquete de ondas a través de la barrera puede ser identificado con el problema de Landau Zener identificando

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{dE}{dx} \frac{dx}{dt} \\ &\simeq \frac{2\Delta_0}{W} v_F, \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $E(x)$ se calcula como en la fórmula de Landau-Zener, con E_{\uparrow} y E_{\downarrow} obtenidos de la ecuación 2.5. Entonces, el parámetro de adiabaticidad resulta $\pi (a/W) |V_{\uparrow\downarrow}|^2 / (\Delta_0 V)$, donde $V_{\uparrow\downarrow} = \alpha \Delta_0$. Elegiremos controlar la adiabaticidad del cruce a través del semi-ancho de la pared, W .

2.5.1. Resultados numéricos del transporte de estado estacionario.

Vamos a utilizar la fórmula de Fisher-Lee 2.14 para evaluar la transmitancia dependiente de espín, $T_{\downarrow\uparrow}$, que describe los procesos de inversión de espín. En la figura 2.5 se compara $T_{\downarrow\uparrow}$ con la probabilidad de transmisión de inversión de espín del problema de Landau-Zener en función del parámetro W . Se muestran cuatro diferentes paredes de dominio caracterizadas por modulaciones del campo magnético $\alpha = 0,5, 1, 3$ y 5 . En todos los casos consideramos $\Delta_0 = 0,1$ y $V = 1$.

Los dos paneles superiores de la figura 2.5 pueden ser asociados al régimen $\alpha \leq 1$. En el centro de la pared de dominio consideramos los casos $V_{\uparrow\downarrow}(x)|_{x=0} = V_{\uparrow\downarrow}^{\text{máx}} = 0,5\Delta_0$ y $V_{\uparrow\downarrow}^{\text{máx}} = 1\Delta_0$. Si la pared es abrupta, $W \simeq 0$, los electrones mantienen su orientación de espín inicial, por lo que $T_{\downarrow\uparrow} \simeq 0$. Como veremos en el capítulo posterior, esta situación coincide con el régimen donde surge la magnetorresistencia gigante en los dispositivos de válvula de espín.[Fer08] Por otro lado, si la pared es suficientemente ancha, los electrones tienden

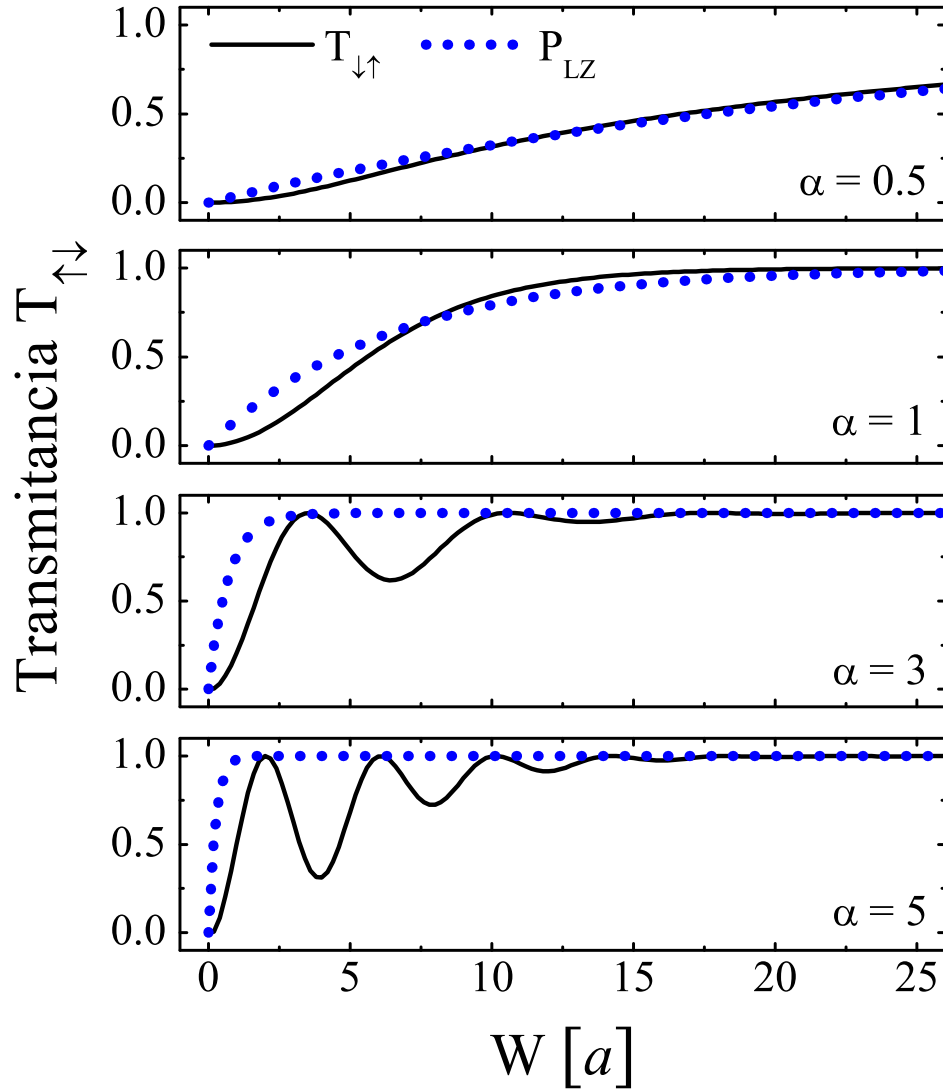


Figura 2.5: La transmitancia $T_{\uparrow\downarrow}$ en función del semiancho de la pared, W , para $\alpha = 0,5, 1, 3$ y 5 . La energía se mide en unidades de V , el desdoblamiento Zeeman es $2\Delta_0 = 0,2V$ y $V_{\uparrow\downarrow} = \alpha\Delta_0$. Las probabilidades de transición de Landau-Zener P_{LZ} se muestran con líneas de guiones.

a invertir su orientación de espín, por lo que $T_{\downarrow\uparrow} \simeq 1$. Considerando la dependencia general en W para el régimen $\alpha \leq 1$, se aprecia que hay una razonable correspondencia entre la transmitancia y la probabilidad de Landau-Zener que mejora cuanto menor se vuelve α . Aún cuando hay pequeñas discrepancias, estas pueden ser atribuidas a la complejidad inherente a nuestro problema. En particular, el término de mezcla de espín $V_{\uparrow\downarrow}$ se activa gradualmente mientras los niveles se vuelven degenerados en el centro de la pared, lo que excede la simplicidad del modelo de Landau-Zener.

Los paneles inferiores de la figura 2.5 corresponden al régimen $\alpha > 1$, con $V_{\uparrow\downarrow}^{\text{máx}} = 3\Delta_0$ y $V_{\uparrow\downarrow}^{\text{máx}} = 5\Delta_0$. En ambos casos las transmitancias muestran oscilaciones en función del ancho de la barrera. Podría pensarse que interferencias del tipo Fabry-Pérot toman relevancia en este problema, como en el caso de la ref. [GWJS04]. Sin embargo, allí se consideran paredes de dominio modeladas con potenciales de derivadas discontinuas, por lo que las interferencias de Fabry-Perot que reportan estarían justificadas. Sin embargo, aquí consideramos un problema de alta energía con barreras de potencial suaves, por lo que siempre resulta $T_{\downarrow\uparrow} + T_{\uparrow\downarrow} \lesssim 1$ y las reflectancias son aproximadamente cero. Es por eso que aquí descartamos las interferencias de Fabry-Pérot como el mecanismo responsable de las oscilaciones observadas. En su lugar, el término $V_{\uparrow\downarrow}$ debería causar oscilaciones entre los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ mientras el electrón se mueve a través de la pared, lo cual resultaría consistente con el hecho de que el espín de los electrones experimenta una precesión alrededor del campo local. Esto es conocido como precesión de Larmor en el contexto de espines semiclásicos y como oscilación de Rabi para un espín 1/2.¹

Este régimen $\pi(a/W)|V_{\uparrow\downarrow}|^2/(\Delta_0V) \lesssim 1$, contrasta con la transición adiabática donde el espín del electrón simplemente permanece alineado con el campo magnético local mientras cruza la pared. Sin embargo, ya que ambas paredes son suaves, la frecuencia de oscilación varía continuamente y por lo tanto no es obvio que oscilaciones de Rabi bien definidas puedan aparecer.

2.6. Transporte a través de una modulación fuerte: interferencias como oscilaciones de Rabi

Dentro de la pared, las energías Zeeman en el sistema de referencia de laboratorio se encuentran degeneradas mientras el acople $V_{\uparrow\downarrow}(x)$ toma su máximo valor $V_{\uparrow\downarrow} = V_{\uparrow\downarrow}(x)|_{x=0} = \alpha\Delta_0$. Localmente, esto podría ser visto como un sistema de dos niveles que experimenta

¹En el libro de C. Cohen-Tannoudji, G. Grynberg, and J. Dupont-Roc, *Atom-Photon Interactions: Basic Processes and Applications* (Wiley, New York, 1992), en el capítulo I se definen las oscilaciones de Rabi como aquellas que ocurren entre dos estados degenerados bajo la acción de una perturbación constante que los acopla. En óptica cuántica, ahora es usual llamar “oscilaciones de Rabi” a aquellas que aparecen cuando dos niveles no degenerados son irradiados en resonancia. Esto se debe a que este último caso se reduce al primero. Sin embargo, con “oscilaciones de Rabi” nosotros nos referiremos al primer caso.

2.6 Transporte a través de una modulación fuerte: interferencias como oscilaciones de Rabi

su dinámica típica, las oscilaciones de Rabi, caracterizadas por un período

$$\tau_R = \frac{\pi\hbar}{V_{\uparrow\downarrow}}. \quad (2.17)$$

Por esto, la distancia que el electrón avanza durante el ciclo de Rabi es

$$L_R = \tau_R v_F = 2 \frac{\pi a V}{\alpha \Delta_0}, \quad (2.18)$$

donde la velocidad de Fermi es $v_F \simeq 2aV/\hbar$.

Vamos a analizar las transmitancias de inversión de espín en términos de las escalas de longitud estimadas anteriormente. En el caso de los dos paneles superiores de la figura 2.5, $\alpha = 0,5$ y $\alpha = 1$, las oscilaciones de Rabi tendrían, de acuerdo a la ecuación 2.18, longitudes características de $L_R \simeq 125,6a$ y $L_R \simeq 62,8a$ respectivamente. Estas resultan mucho más largas que el ancho de la pared necesario para una inversión de espín adiabática. Luego, resulta razonable la ausencia de oscilaciones y así la validez de la fórmula de Landau-Zener.

En contraste, en los casos $\alpha = 3$ y $\alpha = 5$, mostrados en los paneles inferiores, las transmitancias de inversión de espín presentan oscilaciones con longitudes características $L_N \simeq 8a$ y $L_N \simeq 4a$, respectivamente. De acuerdo a nuestra hipótesis de transmitancias moduladas por oscilaciones de Rabi, el espaciamiento entre dos mínimos locales consecutivos debe ser $L \simeq 10,5a$ y $L \simeq 6,3a$, respectivamente. La discrepancia entre nuestra estimación preliminar y los resultados numéricos podría ser justificada por el hecho de que la longitud recorrida durante un ciclo de Rabi no es una magnitud perfectamente definida en nuestro modelo de paredes de dominio suaves. Esto ocurre porque $V_{\uparrow\downarrow}$, y por consiguiente los períodos involucrados, cambian acorde a la posición del electrón dentro de la barrera. Esta dificultad en la identificación de los parámetros efectivos del sistema no nos permite confirmar la hipótesis de las oscilaciones de Rabi. A los efectos de obtener una inequívoca verificación de las mismas, analizaremos explícitamente la dinámica de los electrones en este problema.

2.6.1. Resultados de la dinámica

Para confirmar la hipótesis de las oscilaciones de Rabi, analizamos la evolución dinámica del espín del electrón implementando un algoritmo unitario basado en la aproximación de Trotter (ver Apéndice B).[DR96] Consideramos un paquete de ondas inicial Gaussiano con espín $|\uparrow\rangle$ y un momento bien definido en el centro de banda. Esta última condición evita efectos no deseados de difusión o ensanchamiento del paquete de ondas. Esta condición está garantizada por la linealidad de la relación de dispersión 2.9 alrededor del centro de banda, $k \simeq \pi/(2a)$, donde a diferentes energías del paquete de onda corresponden velocidades de grupo similares.

Durante el tránsito del electrón a través de la pared, la proyección de espín intenta seguir el campo magnético y por lo tanto, la proyección final depende de W . En la figura

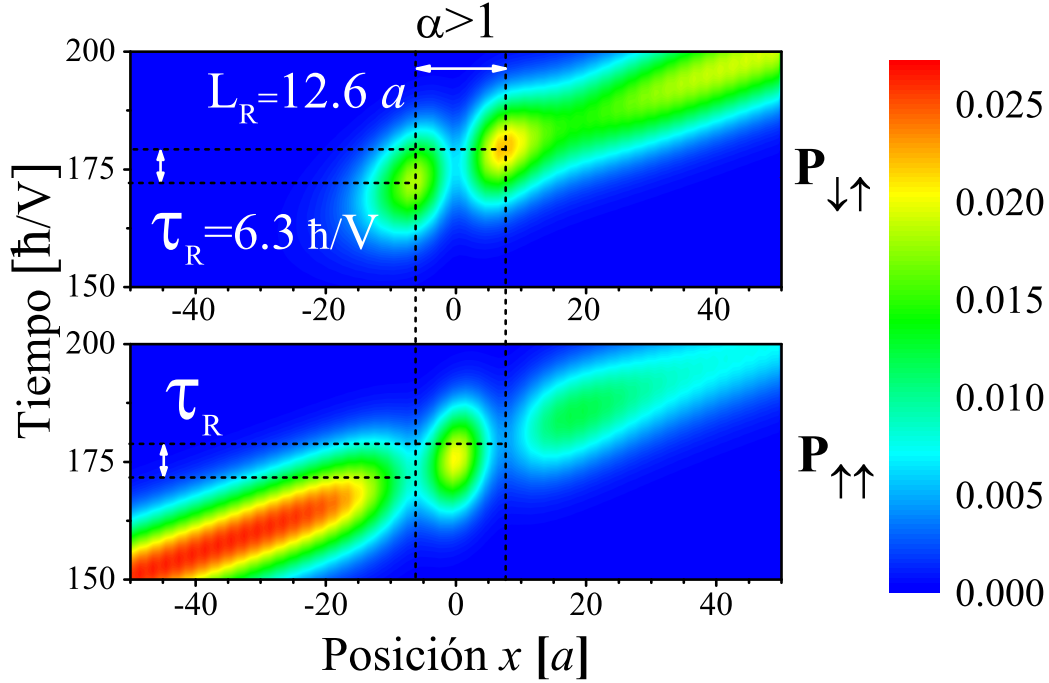


Figura 2.6: Probabilidad (en escala de color) para (panel superior) una orientación de espín \downarrow , (panel inferior) una orientación \uparrow en función del tiempo y de la posición, dado que inicialmente el electrón parte desde la izquierda con espín \uparrow y se mueve con velocidad de Fermi $v_F = 2aV/\hbar$. Aquí, $\Delta_0 = 0,1V$, $W = 8a$ y $\alpha = 5$. El punto medio de la pared se ubica en $x = 0a$. La oscilación en la probabilidad confirma que se desarrollan las oscilaciones de Rabi entre ambos estados de espín. Las líneas vertical y horizontal punteadas se cortan en los máximos y los mínimos de las oscilaciones, a partir de los cuales se infieren las magnitudes del período y la longitud característica de las oscilaciones. Estos coinciden con lo predicho por las ecuaciones 2.17 y 2.18, $\tau_R = 6,3\hbar/V$ y $L_R = 12,6a$ como se muestra por las flechas blancas.

2.6 se muestran las densidades de probabilidad $P_{\downarrow\uparrow}(x, t)$ y $P_{\uparrow\uparrow}(x, t)$ para $\alpha = 5$. Aquí, el segundo subíndice representa el espín inicial mientras que el primero indica la proyección final. El panel superior muestra la probabilidad de que el paquete se encuentre con la proyección de espín $|\uparrow\rangle$ mientras que el panel inferior, para espín $|\downarrow\rangle$. El desdoblamiento Zeeman en los dominios es $2\Delta_0$, donde $\Delta_0 = 0,1V$. El centro de la pared se ubica en $x = 0a$ y su ancho es $2W = 16a$, lo que implica que su parámetro de adiabaticidad es de aproximadamente 1. De acuerdo con la figura 2.5, este valor de W asegura algunas oscilaciones en la transmitancia. El gráfico de intensidad es consistente con el hecho de que a medida que el electrón se mueve en la región de la pared, la probabilidad de encontrar al electrón con espín $|\uparrow\rangle$ decrece en la medida en que el espín complementario, $|\downarrow\rangle$, se incrementa. Posteriormente, se produce un incremento en la probabilidad del espín $|\uparrow\rangle$ mientras que decrece la probabilidad del espín $|\downarrow\rangle$. Este ciclo se repite hasta

2.6 Transporte a través de una modulación fuerte: interferencias como oscilaciones de Rabi

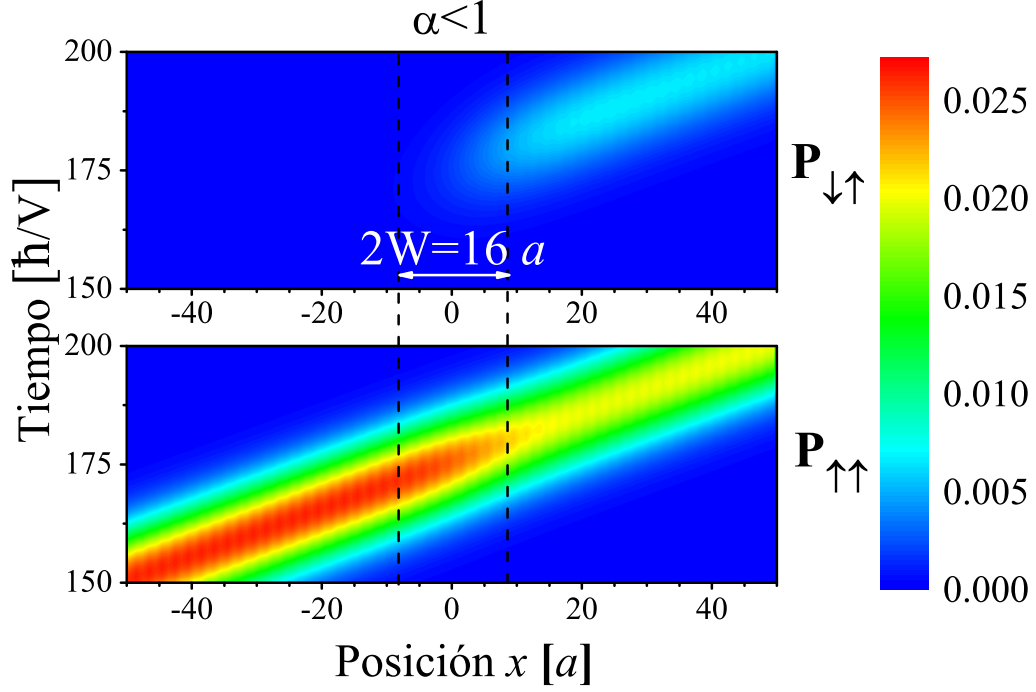


Figura 2.7: Probabilidad (en escala de color) para (panel superior) una orientación de espín \downarrow , (panel inferior) una orientación \uparrow en función del tiempo y de la posición, para $\Delta_0 = 0,1V$, $W = 8a$ y $\alpha = 0,5$. Las líneas punteadas indican el ancho efectivo de la pared, $2W$. Las oscilaciones de Rabi no se desarrollan.

que el paquete alcanza el final de la pared de dominio. Las longitudes características y períodos observados para esta oscilación están en completo acuerdo con los dados por las ecuaciones 2.17 y 2.18, $\tau_R = 6,3\hbar/V$ y $L_R = 12,6a$ respectivamente. Estas se muestran en la figura 2.6. Por tanto, verificamos que esta oscilación entre las proyecciones de espín corresponde a las oscilaciones de Rabi.

El mismo análisis dinámico se realiza para una pared de $\alpha = 0,5$, como se muestra en la figura 2.7. Este valor de α , junto con $2W = 16a$, implica un parámetro de adiabaticidad de alrededor de 0,01. Nuevamente, el estado final $|\varphi_R\rangle$ del lado derecho, después de atravesar la pared de dominio, es una superposición de las dos proyecciones de espín. La probabilidad de encontrar el estado $|\downarrow\rangle$ es consistente con la transmitancia mostrada en la figura 2.5 y la predicción de Landau-Zener: $T_{\downarrow\uparrow} \equiv |\langle\downarrow|\varphi_R\rangle|^2 = P_{\downarrow\uparrow}$ y $T_{\uparrow\uparrow} = |\langle\uparrow|\varphi_R\rangle|^2 = P_{\uparrow\uparrow} \simeq 1 - T_{\downarrow\uparrow}$. Como consecuencia de la suavidad de la pared no hay reflexiones significativas. A diferencia del caso $\alpha = 5$ las oscilaciones no se desarrollan.

Mientras aquí hemos analizado simplemente un único vector de estado, considerar un cable metálico nos llevaría a involucrar una integral hasta la energía de Fermi sobre canales transversales equivalentes a aquellos descritos aquí. Esto podría difuminar el efecto de las oscilaciones de Rabi y se necesitaría un diseño apropiado para superar tal dificultad. Sin embargo, en guías de onda magnéticas semiconductoras[SDR12] el rol relevante de la

cuantización lateral hace que nuestro modelo pueda ser considerado como una descripción realista.

2.7. Rol de la decoherencia

Aquí vamos a usar el modelo D'Amato-Pastawski para verificar la estabilidad de los efectos de interferencia ya discutidos frente a decoherencia. Consideraremos que los procesos decoherentes afectan a los electrones sin preferencia por alguna proyección del espín. En consecuencia, resolveremos el problema de transporte en una región finita que contiene la pared de dominio, considerando que los electrones sufren la misma tasa (*rate*) de decoherencia $1/\tau_\phi = 2\Gamma_\phi/\hbar$.

Los cálculos son realizados mediante un modelo de enlace fuerte, como se introdujo en la Sección 2.4. Las energías propias (*self-energies*) imaginarias,

$$\hat{\Sigma}_\phi = \sum_{n,s} -i\Gamma_\phi |n, s\rangle \langle n, s|, \quad (2.19)$$

que se encuentran en el Hamiltoniano efectivo, describen procesos (canales) decoherentes asociados a cada espín-orbital. Luego, las transmitancias $T_{i,j}$ entre cada par de canales decoherentes se obtienen a partir de la fórmula de Fisher-Lee 2.14, donde $i = (n, s)$ y $j = (n', s')$ son índices espín-orbital asociados con cada canal decoherente. Adaptando la estrategia del modelo DP multiterminal a este Hamiltoniano dependiente del espín, se evalúan las transmitancias efectivas $\tilde{T}_{\downarrow\uparrow}$. Para ello es necesario definir la matriz de transmitancias de la ecuación 1.21:

$$\mathbb{W} = -\mathbb{T} = \begin{pmatrix} 1 - R_{1,1} & -T_{1,2} & \cdots & -T_{1,2N} \\ -T_{2,1} & 1 - R_{2,2} & \cdots & -T_{2,2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -T_{2N,1} & -T_{2N,2} & \cdots & 1 - R_{2N,2N} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Como hemos discutido, el término diagonal i -ésimo de \mathbb{W} suma todas las posibles transmitancias. En nuestro problema, estas transmitancias comprenden los canales de espín a la izquierda y derecha, quedando $2N - 1$ canales internos de decoherencia, es decir,

$$1 - R_{i,i} = T_{L\uparrow,i} + T_{L\downarrow,i} + T_{R\uparrow,i} + T_{R\downarrow,i} + \sum_{j(\neq i)}^{2N} T_{j,i}. \quad (2.21)$$

Luego, la conductancia adimensional resulta:

$$\tilde{T}_{\downarrow\uparrow} = T_{\downarrow\uparrow} + \sum_i^{2N} \sum_j^{2N} T_{\downarrow,i} [\mathbb{W}^{-1}]_{i,j} T_{j,\uparrow}. \quad (2.22)$$

Esta transmitancia efectiva incluye, en el primer término, la contribución de los electrones que no han experimentado ningún proceso decoherente, mientras que el segundo

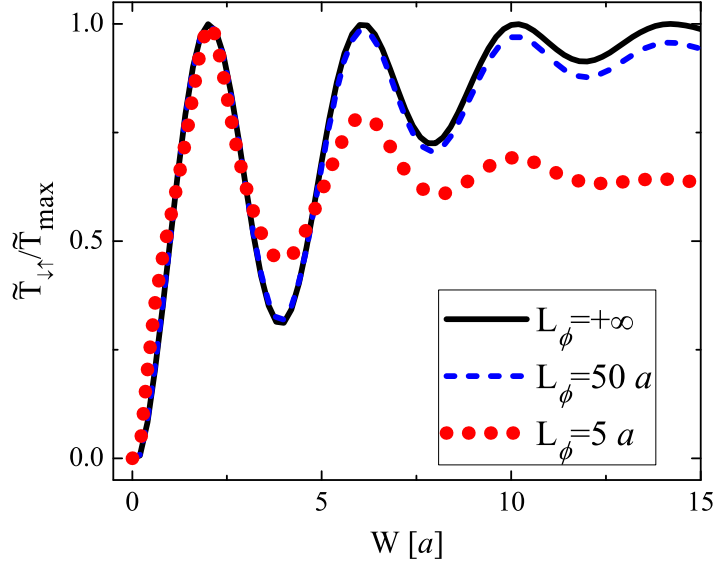


Figura 2.8: Transmitancia normalizada $\tilde{T}_{\downarrow\uparrow}/\tilde{T}_{\max}$ en función del semi-ancho de la pared, W , para diferentes tasas de decoherencia, caracterizadas por el camino libre medio $L_{\phi} = 5a, 50a$ y ∞ , con $T_{\max} = 0,15, 0,66$ y $1,0$, respectivamente. El sistema considerado aquí se caracteriza por una longitud de $500a$, $\Delta_0 = 0,1V$, $\alpha = 5$ y $\varepsilon = \varepsilon_F$.

término comprende todos aquellos caminos que han experimentado al menos un proceso decoherente, donde el primero ocurrió en el sitio (espín-orbital) j .

En la figura 2.8 se muestran las transmitancias de inversión de espín, $\tilde{T}_{\downarrow\uparrow}$, en función del semi-ancho W de la pared normalizado respecto a \tilde{T}_{\max} , la amplitud del primer pico. En la figura 2.8 se superponen diferentes valores del camino libre medio, $L_{\phi} = v_F\tau_{\phi}$. Aún cuando no consideramos procesos decoherentes de mayor intensidad, para $L_{\phi} = 5a$ el primer pico de transmitancia efectiva toma un valor tan bajo como $\tilde{T}_{\downarrow\uparrow} = 0,15$. Luego, la normalización con el máximo de la transmitancia hace más fácil la visualización del contraste, que relaciona los máximos y mínimos de una oscilación como $1 - \tilde{T}_{\min}/\tilde{T}_{\max}$. Un buen contraste en las oscilaciones sería un requerimiento natural para el diseño de dispositivos de interferencia que aprovechen estos mecanismos.

Una condición favorable para el régimen estudiado es que el período de la oscilación no depende apreciablemente de la intensidad de los procesos decoherentes. Sin embargo, este resultado no se aplica a otras situaciones, como ocurre en sistemas oscilatorios,[Pas07] donde la frecuencia de oscilación colapsa críticamente cuando la decoherencia se incrementa. Tales situaciones requieren que el tiempo de decoherencia τ_{ϕ} sea menor que el período de la oscilación de Rabi τ_R . En el capítulo siguiente explotaremos este régimen para suprimir las oscilaciones coherentes.

Un resultado notable es que el contraste permanece sólo débilmente afectado por el incremento de decoherencia. Esto se mantiene, al menos hasta que el camino libre medio es del orden de la longitud recorrida por el electrón en un período de la oscilación de

Rabi. Un electrón que sufre un proceso decoherente mientras tiene una proyección de espín determinada ($P_{\sigma,\sigma'} \simeq 1$, $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$) retoma la oscilación de Rabi principalmente en fase con el haz coherente. Esto se debe a que si la probabilidad se encuentra localizada en espín, un proceso decoherente actúa como una fase global, por lo que en realidad no lo afecta. Esta idea se discute en mayor detalle en el capítulo 4. Luego, la mayoría de los electrones que cruzan la pared pueden contribuir a la oscilación general.

2.8. Conclusión

En este capítulo exploramos los fenómenos cuánticos asociados al transporte dependiente del espín en presencia de una inhomogeneidad magnética suave, tal como una pared de dominio en un hilo ferromagnético. Para este propósito, extendimos el modelo de Cabrera-Falicov al considerar modulaciones en la intensidad del campo magnético en la pared de dominio. Sin embargo, la física que se presenta aquí no está restringida sólo a este caso. En efecto, nuestros resultados y estrategias son aun válidas para otras situaciones, tal como estructuras semiconductoras moduladas magnéticamente. [BDS⁺12] En este caso, las modulaciones espectrales son descritas por variantes de la ecuación 2.4. En la ref. [SDR12] se presenta una situación que podemos identificar con nuestro régimen $\alpha < 1$ para un transistor de espín basado en campos magnéticos modulados en forma helicoidal.

Mostramos que, para $\alpha \leq 1$, el transporte dependiente de espín a través de la región de la modulación magnética es razonablemente descrito por la fórmula de Landau-Zener cuando la perturbación satisface $\alpha \ll 1$. Esta se aplica al régimen dinámico completo, desde los cruces diabáticos hasta los completamente adiabáticos. El problema de Landau-Zener fue originalmente resuelto para un sistema de dos niveles que experimenta una variación lineal en sus energías en función del tiempo de modo que presenta un cruce evitado. Con nuestro modelo hemos demostrado que es posible establecer una asociación directa entre el problema de Landau-Zener y el problema de transporte de estado estacionario, donde el espín juega el rol de los dos niveles. La dinámica de los electrones queda plasmada en variables como la velocidad de Fermi, mientras que la adiabaticidad del cruce, en el ancho de la pared de dominio.

Para $\alpha > 1$, encontramos que la conductancia tiene interferencias cuánticas que se manifiestan como oscilaciones en función del ancho de la pared, las cuales no pueden ser interpretadas como interferencias de Fabry-Perot. Al realizar un estudio dinámico de los procesos de cruce, mostramos que un paquete de ondas polarizado en espín que se propaga a través de la pared puede ser visto como un sistema de dos niveles experimentando oscilaciones de Rabi. Además, verificamos que las oscilaciones de Rabi no son particularmente sensibles a una intensidad razonable de decoherencia, que es cuantificada mediante la longitud de decoherencia L_ϕ . Para este propósito adaptamos el modelo D'Amato-Pastawski [DP90] para tratar con procesos decoherentes dependientes del espín.

Esto sienta las bases para generalizar el modelo con el objetivo de realizar cálculos más realistas para la magneto-conductancia que incluyan la decoherencia dependiente del

espín. Las corrientes y caídas de potencial locales dependientes del espín a través de la región afectada por decoherencia son cantidades de interés que podrían ser obtenidas en la misma operación. [Cat12, Pas92] En esta línea, uno debería ser capaz de recuperar la descripción para el fenómeno de la magnetorresistencia propuesta por Fert y colaboradores al alcanzar un límite semiclásico.[Fer08] Más aún, uno podría extender tal descripción para abarcar situaciones donde las interferencias cuánticas no son completamente suprimidas sino que juegan un papel relevante.

Un esquema experimental posible para probar nuestros resultados en todos los regímenes podría ser las guías de onda semiconductoras lineales en presencia de un campo magnético modulado espacialmente.[BDS⁺12] En tal caso, unos pocos canales de conducción se habilitan por una compuerta de voltaje que además controlaría la longitud de onda de los portadores.

Finalmente, la descripción dinámica del problema de transporte como se presenta aquí puede resultar útil para el problema inverso, es decir, evaluar la dinámica de una pared de dominio frente a corrientes eléctricas pulsadas. Esto puede extender el interés de nuestra estrategia al estudio de un problema de actual interés, memorias basadas en el movimiento de paredes de dominio magnéticas trasladadas por corrientes eléctricas en hilos magnéticos en una dimensión.[THJ⁺07]

En resumen, para el régimen perturbativo ($\alpha < 1$), probamos una conexión definida entre transporte dependiente del espín en el estado estacionario a través de una modulación magnética y el problema dinámico de Landau-Zener. En el régimen de perturbación fuerte ($\alpha > 1$), mostramos que la conductancia en el estado estacionario presenta interferencias. Recurriendo a cálculos de dinámica de paquetes de onda, mostramos que estas surgen del fenómeno de las oscilaciones de Rabi que se dan entre los estados de espín. demostramos, a través del modelo DP que estas son bastante robustas frente a eventos decoherentes independientes de la proyección de espín.

Capítulo 3

Transición cuántica-clásica en un modelo para magnetorresistencia gigante

3.1. Introducción

En este capítulo, vamos a tratar uno de los fenómenos paradigmáticos de la espintrónica, la magnetorresistencia gigante (GMR por sus siglas en inglés).[Fer08] Este fenómeno se refiere al cambio drástico en la resistencia eléctrica al aplicar un campo magnético que altera la configuración magnética de un material multicapa. Estos se forman alternando capas de materiales ferromagnéticos y no magnéticos. El origen de la GMR se basa en la dependencia de la conductancia a través de los materiales ferromagnéticos con la proyección de espín de los electrones. Esto se debe, según el modelo de dos bandas de Mott, a que los procesos de dispersión (*scattering*) que experimentan los electrones de conducción dependen de su orientación de espín. [Mot35, Mot36]

El enfoque tradicional para abordar el transporte de electrones dependiente del espín en materiales ferromagnéticos es usando el modelo de las dos corrientes.[FC68] Allí, los procesos que invierten el espín se consideran despreciables y la conducción se realiza por canales de espín paralelos. Por ello, estos modelos son válidos en situaciones en que la longitud de difusión de espín, L_{sd} , es mucho mayor que el tamaño de las capas magnéticas. Con el fin de estudiar la magnetorresistencia en este régimen, se han desarrollado descripciones tanto clásicas como cuánticas. [Bau92, BB94, BBK06] Entre las primeras, la más prominente es el modelo clásico de las dos resistencias. [Fer08] Sin embargo, al considerar el rol de una longitud de difusión de espín L_{sd} finita en el transporte, la mayoría de las descripciones anteriores falla.

Valet y Fert lograron superar esta dificultad utilizando cálculos basados en la ecuación semiclásica de Boltzmann, [VF93] donde en consecuencia, las interferencias cuánticas se dejan de lado desde el principio. No obstante, en la nanoescala, éstas pueden volverse importantes y muy interesantes de estudiar, como hemos mostrado en el capítulo anterior.

Aún así, la conducción de electrones en materiales ferromagnéticos presenta altas probabilidades de que ocurran eventos de dispersión, los cuales pueden ser representados, en una buena aproximación, como eventos decoherentes que ocasionan pérdida de la memoria de fase de los electrones. Esto, vuelve al tratamiento puramente cuántico poco realista. En esta situación, un modelo Hamiltoniano que capture las interferencias cuánticas y sea capaz de incluir procesos decoherentes resulta clave para describir el límite semiclásico.

Para ello usaremos una descripción cuántica estacionaria basada en el modelo D'Amato-Pastawski (DP) dentro del formalismo de Keldysh. Describiremos el efecto de la GMR incluyendo una dispersión decoherente dependiente de espín, así como procesos de reversión de espín que dan lugar a una L_{sd} finita. Utilizando el modelo DP, mostraremos que es posible ir desde un régimen puramente cuántico, descrito por un Hamiltoniano efectivo, hasta los límites clásico y semiclásico de la GMR variando un único parámetro, la tasa de dispersión de los procesos decoherentes.

Adicionalmente, en espintrónica frecuentemente se requiere distinguir cómo contribuye cada proyección del espín a la corriente total e identificar los perfiles de potencial a lo largo del sistema, es decir los potenciales químicos $\delta\mu(x)$. La información de estas magnitudes locales no era accesible desde la solución original del modelo DP que solamente puede calcular la corriente total. Aquí proveemos ecuaciones que permiten hallar los perfiles de corriente y de potenciales químicos locales, y compararlos con aquellos que son característicos de los modelos clásico y semiclásico.

3.2. Transporte en materiales magnéticos

En esta sección vamos a revisar los conceptos básicos que intervienen en el transporte electrónico en materiales ferromagnéticos enfocándonos en aquellos que permiten explicar el fenómeno de la GMR.

3.2.1. Dispersión dependiente de espín: Modelo de dos bandas de Mott

El modelo de dos bandas fue introducido hace tiempo por Mott [Mot35, Mot36] como una simplificación práctica de la estructura de bandas de los metales de transición para explicar su resistencia eléctrica. Este modelo es aún ampliamente utilizado para el estudio de propiedades del transporte en materiales ferromagnéticos.

En este modelo, la compleja estructura de bandas de los materiales ferromagnéticos es reducida a dos bandas de forma semi-elíptica, la tipo s y la d . Los electrones que se encuentran en la banda d no contribuyen directamente a la conductancia ya que su masa efectiva es grande y por ello tienen una pobre movilidad. Por el contrario, los electrones de la banda s están casi libres, y por ende, son los responsables del transporte de corriente.

Debido a la magnetización local, \vec{B} , las bandas sufren un desdoblamiento de acuerdo al espín, dado que la energía de los electrones se modifica por una interacción

$$\hat{H}_Z = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (3.1)$$

donde $\vec{\mu} = -\mu_B \vec{\sigma}_P$ es el momento magnético del espín electrónico, μ_B es el magnetón de Bohr y $\vec{\sigma}_P$ es el vector de las matrices de Pauli. En consecuencia, las sub-bandas de electrones con orientación de espín \uparrow y \downarrow difieren en el número de estados ocupados, lo cual define direcciones de espín mayoritarias y minoritarias, que corresponden a proyecciones de espín antialineado y alineado con \vec{B} , respectivamente, como se esquematiza en la figura 3.1.

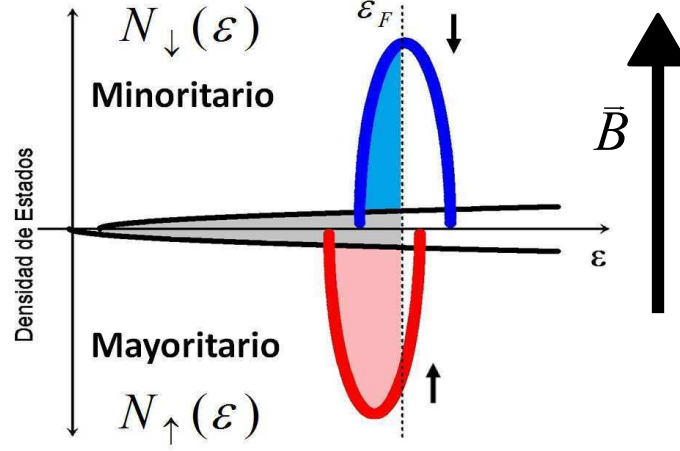


Figura 3.1: Representación de la densidad de estados de un material ferromagnético. La banda s (gris) es responsable de la conducción eléctrica y la banda d (rojo y azul), del magnetismo. Las bandas se desdoblaron de acuerdo a su momento magnético de espín debido a la interacción con el campo magnético local. En consecuencia, el número de estados ocupados hasta la energía de Fermi ε_F , representado por el área sombreada bajo las curvas, es diferente para cada proyección de espín. Esta asimetría origina una resistencia eléctrica que depende de la orientación del momento magnético de espín. En este esquema, la magnetización local \vec{B} apunta hacia arriba.

El punto central en el modelo de Mott para la resistencia es la presencia de interacciones de intercambio entre los electrones de la banda s y los electrones localizados de la banda d . Esto resulta en un mecanismo de dispersión cuya tasa de interacción, $1/\tau_{0,\sigma}$, puede determinarse por la Regla de Oro de Fermi (FGR) (ver Apéndice A.3):

$$\frac{1}{\tau_{0,\sigma}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_x|^2 N_{d,\sigma}(\varepsilon_F), \quad (3.2)$$

donde σ representa la proyección de espín de los electrones de la banda de conducción s y $N_{d,\sigma}$ es la densidad de estados de la sub-banda de espín σ correspondiente a la banda d . Aquí, V_x representa un acople efectivo que caracteriza la interacción de intercambio. Dado que las densidades de estados en las sub-bandas $N_{d,\sigma}$ dependen del espín y satisfacen $N_{d,\uparrow}(\varepsilon_F) < N_{d,\downarrow}(\varepsilon_F)$, luego

$$\frac{1}{\tau_{0,\uparrow}} < \frac{1}{\tau_{0,\downarrow}}. \quad (3.3)$$

En una descripción basada en el modelo de Drude, $\tau_{0,\sigma}$ representa el tiempo medio entre “colisiones” sucesivas que conservan el espín. Así mismo, determina el camino libre medio de los electrones, $\ell_{0,\sigma} = v_F \tau_{0,\sigma}$, y por ende, el valor de la resistencia por unidad de área, R_σ , tal que

$$\frac{1}{R_\sigma} = \frac{e^2 v_{F,\sigma} \tau_{0,\sigma}}{h L} = \frac{e^2 \ell_{0,\sigma}}{h L}, \quad (3.4)$$

donde L es la longitud del sistema. A partir de esta ecuación y de 3.3 sabemos que $R_\uparrow < R_\downarrow$. Esto implica que los electrones con su momento magnético alineado con el campo local (\uparrow) sufren menos eventos de dispersión que aquellos con la dirección opuesta (\downarrow). La tasa $(\tau_{0,\sigma})^{-1}$ puede asociarse con una relajación tal que, aunque conserva el espín, lleva a la decoherencia de los electrones de conducción. Finalmente, la interacción entre electrones s y d determina la resistencia.

3.2.2. Magnetorresistencia: Modelo de las dos resistencias

El efecto básico de la magnetorresistencia puede entenderse fácilmente al considerar una estructura de dos capas ferromagnéticas de magnetización constante (o dominios magnéticos), donde la corriente las atraviesa de forma perpendicular a su interfaz. Consideraremos dos posibles configuraciones donde las magnetizaciones de las capas pueden encontrarse de forma paralela alineada (P) o anti-alineada (AP), tal como se muestra en la figura 3.2. Un campo magnético externo permite cambiar la magnetización de una de sus capas, la cual posee una pequeña coercitividad magnética. Debido a esta capacidad de alternar entre configuraciones, este dispositivo es conocido como válvula de espín.

La resistencia de cada configuración puede ser calculada fácilmente utilizando el modelo de las dos resistencias (MDR), inicialmente propuesto por Fert para explicar la GMR. [FC68] En ausencia de procesos que invierten la orientación del espín, cada proyección se comporta como un canal independiente a lo largo de todo el sistema. Luego, cada una de estas se modela como una rama de un circuito en paralelo, donde cada rama tiene dos resistores que representan la resistencia de cada capa de material ferromagnético para ese espín, como se muestra en la figura 3.2.

Los canales de conducción \uparrow y \downarrow tienen resistencias dependientes de espín: R_\uparrow , para un momento magnético de espín paralelo a la magnetización de la capa y R_\downarrow , en el caso antiparalelo. Del modelo de dos bandas sabemos que $R_\uparrow < R_\downarrow$. Luego, la resistencia de la configuración paralela es $R_P = 2R_\downarrow R_\uparrow / (R_\downarrow + R_\uparrow)$, mientras que la de la configuración antiparalela, $R_{AP} = \frac{1}{2} (R_\downarrow + R_\uparrow)$. Luego, la GMR puede cuantificarse como

$$MR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}, \quad (3.5)$$

que corresponde a la diferencia normalizada de la resistencia que presenta cada configuración, P y AP . En el límite en que $R_\uparrow \ll R_\downarrow$, tenemos que $R_P = 2R_\uparrow \ll \frac{1}{2}R_\downarrow = R_{AP}$, y por lo tanto, la GMR se puede calcular como $MR \approx R_{AP}/R_P$.

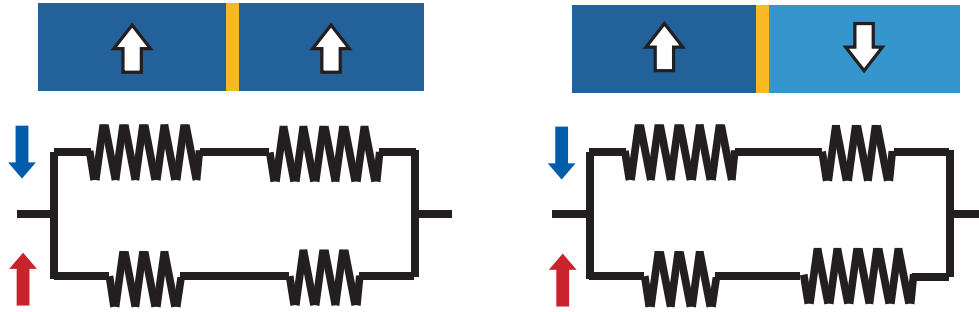


Figura 3.2: Los paneles superiores representan la configuración magnética del material bicapa para una configuración (a) paralela (P) y (b) anti-paralela (AP). Los paneles inferiores en (a) y (b) representan un esquema de transporte en la versión simplificada provista por el modelo de dos resistencias. Allí, cada espín experimenta una resistencia que depende de su orientación con la magnetización local. (c) Esquema de la caída de potencial local en función de la posición para cada orientación de espín para la configuración AP en una región de longitud $2L_{sd}$ alrededor de la interfaz. Las caídas de potencial son lineales dentro de cada región magnética, de acuerdo a la ley de Ohm, y generan un gráfico tipo diamante que puede asociarse a un único valor de la GMR.

Para el modelo de las dos resistencias en la configuración P en la figura 3.2-a), las caídas de potencial para ambas proyecciones de espín van desde V_L a V_R , que corresponden a los potenciales en los contactos a la izquierda y derecha respectivamente, con caída uniforme sin dependencia del espín. Sin embargo, la corriente, dada por la ley de Ohm, sí depende del espín. Esto produce un canal con alta conductancia $1/(2R_{\uparrow})$, para el momento magnético de espín \uparrow , y un otro, \downarrow , de conductancia más pequeña, $1/(2R_{\downarrow})$, y por lo tanto, de menor corriente.

Por otro lado, para la configuración AP de la figura 3.2-b), ambas proyecciones de espín tienen la misma resistencia total, y en consecuencia, la misma corriente atraviesa cada rama del circuito. No obstante, las caídas de potencial presentan una dependencia espacial acorde al espín. Como puede observarse en la figura 3.2-c) para el caso de la configuración AP, los electrones con espín \uparrow primero ingresan a una capa con magnetización paralela a su momento magnético de espín, por lo que la capa presenta baja resistencia y, por ende, se ocasiona una caída de potencial pequeña, $(\delta\mu_L - \delta\mu_1)/e$. Pero cuando los electrones cruzan la interfaz, la magnetización local cambia su dirección, lo que ocasiona una alta resistencia y una mayor caída de potencial $(\delta\mu_1 - \delta\mu_R)/e$. Para el espín \downarrow ocurre el mismo fenómeno pero en orden inverso. En el gráfico de las caídas de potencial local en función de la posición, esto se visualiza como una figura en forma de diamante. Este tipo de gráficos son de nuestro interés ya que permiten obtener información acerca de las caídas de potenciales locales así como evaluar el valor de la magnetorresistencia. Si bien estos gráficos son típicos en los modelos clásicos de dos resistencias y semiclásicos de Valet y Fert, aún no hay analogías a regímenes donde se esperen comportamientos cuánticos.

3.3. Descripción de la magnetorresistencia a partir de un Hamiltoniano

Consideremos un sistema unidimensional compuesto de dos “capas” o “porciones” adyacentes de un material ferromagnético de un único dominio, es decir, su magnetización es uniforme en toda la capa. Elegiremos que las magnetizaciones relativas de las capas se encuentren en una configuración AP (ver figura 3.3-a). Este sistema se conecta a dos contactos no magnéticos a cada lado, etiquetados como L y R . Luego, la corriente atraviesa el sistema de forma **perpendicular a la interfaz magnética**. Cada espín representa un canal independiente en los contactos, por lo que cada proyección de espín se caracteriza por potenciales químicos $\mu_{L\uparrow}$, $\mu_{L\downarrow}$, $\mu_{R\uparrow}$ y $\mu_{R\downarrow}$. Al considerar contactos que no son ferromagnéticos, los potenciales químicos de los reservorios no dependen del espín, y por lo tanto $\mu_{L\uparrow} = \mu_{L\downarrow}$ y $\mu_{R\uparrow} = \mu_{R\downarrow}$.

Dentro del sistema, los electrones experimentan procesos de dispersión que son responsables de producir la resistencia eléctrica que, como vimos, depende del espín. Podemos usar la equivalencia entre impurezas tipo delta de Dirac y los procesos de dispersión local decoherente.[FJWS06] Al igual que en el límite Ohmico del modelo DP, [DP90, Pas91] tales procesos se pueden caracterizar por el parámetro $\Gamma_\sigma = \hbar/(2\tau_{0,\sigma})$, donde $\tau_{0,\sigma}$ es el tiempo característico entre procesos decoherentes para el espín σ . Por lo tanto, la conductancia es proporcional al camino libre medio, que resulta $\ell_{0,\sigma} = v_{F,\sigma}\tau_{0,\sigma}$. Nótese que Γ_σ depende de la orientación relativa entre el espín y la magnetización local. Luego, el espín \uparrow tiene una tasa de dispersión $2\Gamma_{\phi_1}/\hbar$ en la primera capa y otra distinta, $2\Gamma_{\phi_2}/\hbar$, en la segunda, mientras que para el espín \downarrow , las tasas se invierten.

Como en el capítulo anterior, el Hamiltoniano del sistema \hat{H}_S se describe usando un modelo de enlaces fuertes (*tight-binding*) que incluye interacciones $V_{\downarrow\uparrow}$ que pueden revertir el espín:

$$\hat{H}_S = \sum_{i=-N}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[E_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + V \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1\sigma} + \text{c.c.} \right) \right] + \sum_{i=-N}^N V_{\downarrow\uparrow} \left[\hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow} + \text{c.c.} \right]. \quad (3.6)$$

El índice i indica sitios en una red con celda unidad a , $E_{i,\sigma}$ es la energía local en el sitio i con espín σ , el operador $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i,\sigma}$) crea (aniquila) una partícula en el sitio i con espín σ . Los primeros dos términos de \hat{H} dan cuenta de las energías de sitio y del parámetro de salto (*hopping*) que conserva espín, V , entre sitios adyacentes. V se elige como la unidad de energía. Cuando los electrones ingresan al material ferromagnético interactúan con la magnetización local, y luego, la energía de sitio es $E_{i,\uparrow(\downarrow)} = E_0 \pm \Delta E_Z$, donde i es un sitio de la primera capa.

En una representación gráfica del modelo de enlace fuerte cada orientación de espín se representa por una cadena de sitios interconectados por V . Por tanto, dos cadenas de sitios son necesarias para representar el transporte dependiente de espín a lo largo de este sistema ferromagnético (ver figuras 2.3 y 3.3-a)).

El último término de \hat{H} modela los procesos que pueden invertir la dirección del espín. Estos pueden ser procesos cuánticos, como por ejemplo las oscilaciones de Rabi debido

a la presencia de una pared de dominio, tal como vimos en el capítulo anterior. En este capítulo, vamos a considerar paredes de dominio abruptas por lo que esos procesos no van a ser tenidos en cuenta pero pueden ser incluidos sin mucho esfuerzo. En su lugar, consideraremos procesos decoherentes, tal como dispersión debido a impurezas magnéticas o magnones. $V_{\downarrow\uparrow}$ es el parámetro de salto local de mezcla de espín o de reversión de espín. Esto está relacionado a la escala de longitud característica de difusión de espín,

$$L_{sd} = \frac{\hbar v_F}{2|V_{\downarrow\uparrow}|}, \quad (3.7)$$

que representa la escala de longitud en la que los procesos que revierten el espín se vuelven efectivos. En distancias a la interfaz menores que L_{sd} , ambas proyecciones pueden considerarse independientes y una descripción basada en un modelo de dos resistencias sería válida.

L_{sd} es típicamente mucho mayor que el camino libre medio de cualquiera de los espines. Así mismo, el tiempo característico de inversión de espín, que en nuestro modelo está dado por $\pi\hbar/V_{\downarrow\uparrow}$, es mucho mayor que el tiempo de coherencia dado por $\tau_{0,\sigma}$. Es por ello que, cuando un evento de reversión de espín ocurre, este no tiene posibilidad de ser revertido coherentemente. En consecuencia, las oscilaciones de Rabi que reportamos anteriormente, con período $\pi\hbar/V_{\downarrow\uparrow}$ son completamente suprimidas por los procesos decoherentes causados por las colisiones.

El Hamiltoniano efectivo incorpora los cables y los procesos de dispersión a través de las energías propias apropiadas (ver Apéndice A.2), $\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S + \hat{\Sigma}_L + \hat{\Sigma}_R$. En este caso, $\hat{\Sigma}_{L(R)} = \hat{\Sigma}_{L(R)\uparrow} + \hat{\Sigma}_{L(R)\downarrow}$ es el operador de energía propia que describe el escape al cable izquierdo o derecho, donde todos sus parámetros de salto son iguales a V . Los canales decoherentes que dan cuenta de la dispersión resistiva se asocian a cada sitio y se incluyen en \hat{H} a través del operador $\hat{\Sigma}_\phi$. Luego, $\hat{\Sigma}_\phi$ es un operador diagonal en una representación matricial. En el límite de banda ancha, sus elementos son puramente imaginarios, con lo cual $(\hat{\Sigma}_\phi)_{ii} = -i\Gamma_{\phi i}$. En nuestro modelo para la válvula de espín, en cada una de las capas magnéticas los sitios i con espín σ tienen igual tasa de sufrir eventos decoherentes $\Gamma_{\phi,\sigma}$. Luego, el camino libre medio, $\ell_{0,\sigma} = v_F\tau_{0,\sigma}$, resulta

$$\ell_{0,\sigma} = \frac{\hbar v_F}{2\Gamma_{\phi,\sigma}}, \quad (3.8)$$

y depende de la orientación de espín relativo a la capa magnética.

3.4. Obtención de corrientes y potenciales químicos locales a partir de las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker

En el transporte electrónico, y en particular en espintrónica, frecuentemente es necesario distinguir las contribuciones de cada proyección de espín a la corriente total. En

particular, en algunas situaciones es deseable identificar los perfiles de corrientes locales y caídas de potencial a lo largo del sistema, es decir los potenciales químicos $\delta\mu$. Estos últimos pueden ser obtenidos desde la formulación multiterminal del modelo DP, a partir de la ecuación 1.22, es decir:

$$\boxed{\vec{\delta\mu}_\phi = [-\mathbb{T}_{\phi\phi}]^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \vec{\delta\mu}_\lambda.} \quad (3.9)$$

No obstante, el perfil de las corrientes locales no es accesible desde la solución del modelo DP, por lo que recurriremos a herramientas más fundamentales.

De acuerdo al formalismo de Keldysh, las corrientes entre cada par de sitios acoplados pueden ser calculadas de acuerdo a la ecuación [Pas92, KW08]

$$I_{i,j} = -e \int [V_{ij} G_{ij}^<(\varepsilon) - V_{ji} G_{ji}^<(\varepsilon)] d\varepsilon. \quad (3.10)$$

donde $V_{ij} = V_{ji}$ es el parámetro de salto y la función densidad de Green se define a través del teorema óptico, $\mathbb{G}^< = \mathbb{G}^R \hat{\Sigma}^< \mathbb{G}^A$. Aquí, en nuestro modelo $\hat{\Sigma}^<$ es diagonal, [PM01]

$$\Sigma_{ss}^< = \left(\sum_l f_l (\hat{\Sigma}^\dagger - \hat{\Sigma}) \right)_{ss} = 2if_s \Gamma_s, \quad (3.11)$$

donde f_s representa la función de Fermi del canal s . Asumiendo temperatura nula, en el régimen de respuesta lineal donde el sesgo de potencial es infinitesimal, obtenemos finalmente para las corrientes

$$\boxed{I_{i,j} = -eV_{ij} \sum_s 2i [G_{is}^R G_{sj}^A - G_{js}^R G_{si}^A] \Gamma_s \delta\mu_s.} \quad (3.12)$$

Nótese, en primer lugar, que las corrientes $I_{i,j}$ son cantidades reales, ya que el término entre corchetes en 3.12 es una cantidad imaginaria pura. Adicionalmente, la corriente que fluye entre los sitios i y j no sólo está dada por las corrientes inyectadas en esos sitios sino que contiene las contribuciones de los otros canales s . Sin embargo, si los sitios no están acoplados, es decir $V_{ij} = 0$, trivialmente la corriente se anula.

Las ecuaciones 3.9 y 3.12 proveen un método para calcular los perfiles de potencial químico y corrientes locales. Con este método tenemos acceso a información local en el interior de la muestra, lo que resulta valioso al considerar regímenes lejos del semiclásico, es decir, cuando los procesos decoherentes no suprimen por completo las interferencias cuánticas.

3.5. De la cuántica a la clásica

En esta sección mostraremos cómo nuestro modelo puede describir a la magnetorresistencia gigante tanto en el régimen clásico como en el semiclásico. Para ello usaremos el modelo DP y mostraremos que variando la tasa de dispersión de los procesos decoherentes podremos movernos desde el régimen cuántico hacia el (semi)clásico.

3.5.1. Régimen clásico de la magnetorresistencia: el modelo de las dos resistencias

En el régimen clásico, la longitud del sistema es mucho más corta que L_{sd} , lo que implica que, en el Hamiltoniano de la ecuación 3.6 de nuestro modelo, $V_{\downarrow\uparrow} \approx 0$. Cuando los electrones entran en una capa ferromagnética experimentan una resistencia eléctrica que se manifiesta como una caída de potencial “lineal” que puede visualizarse en una disminución del valor de los potenciales químicos $\delta\mu$ que depende de la resistencia de cada capa de acuerdo al espín. Luego, en una configuración *AP*, esperamos que los potenciales químicos se desdoblen de acuerdo a su espín formando el diagrama en forma de diamante que discutimos más arriba.

Al calcular el perfil de los potenciales químicos locales en función de la posición usando la ecuación 3.9, recuperamos precisamente el gráfico tipo diamante del modelo de las dos resistencias en el caso de que los caminos libres medios son ambos más cortos que la longitud del sistema (ver figura 3.3-*b*). Esto resulta consistente con la ley de Ohm que predice una caída lineal del potencial de cada corriente en cada capa. En contraste, para el límite cuántico, es decir, caminos libres medios largos, las interferencias cuánticas se evidencian como oscilaciones en los potenciales químicos cerca de la interfaz y de los contactos. Estas se originan debido a la oscilación en la densidad electrónica debido a las interferencias entre los portadores que inciden sobre la interfaz y los que son reflejados por ésta. Estas oscilaciones son conocidas como “de Friedel” y ya estaban presentes en la formulación original del modelo DP. [DP90] Dado que pueden observarse dentro de una escala limitada por el camino libre medio, éstas son suavizadas al incrementar la tasa de probabilidad de sufrir eventos decoherentes Γ_ϕ hasta que el gráfico alcanza la forma característica del diamante (figura 3.3-*b*) Las figuras 3.3-*b* hasta 3.3-*d* muestran esta transición al incrementar el camino libre medio.

3.5.2. Régimen semiclásico de la magnetorresistencia: Teoría de Valet y Fert

Al considerar valores finitos para la longitud de difusión de espín, L_{sd} , Valet y Fert [VF93] mostraron que la diferencia de los potenciales químicos locales decae exponencialmente con la distancia a la interfaz magnética con una escala de longitud dada por L_{sd} . Ellos también mostraron que las corrientes que dependen del espín se invierten dentro de la misma escala.

En la figura 3.4 mostramos que el modelo DP multiterminal es capaz también de reproducir esos comportamientos cuando habilitamos el término de reversión de espín en la ecuación 3.6 al elegir $V_{\downarrow\uparrow} \neq 0$. En la figura superior, mostramos los potenciales químicos para cada espín en función del índice de sitio. Puede observarse que en regiones lejos de la interfaz, es decir distancias mucho mayores que L_{sd} , los potenciales químicos son aproximadamente los mismos. En regiones cerca de la interfaz, las caídas de los potenciales químicos forman una figura tipo diamante que muestra las contribuciones exponenciales esperadas montadas sobre la caída de potencial media que trivialmente es lineal. Este

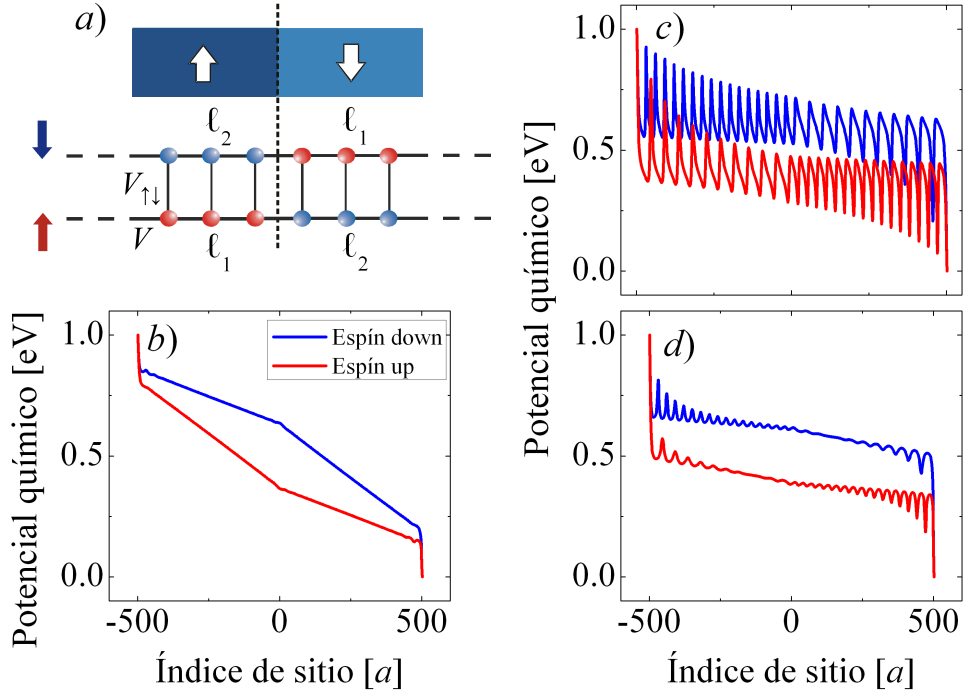


Figura 3.3: *a)* Arriba, se presenta un esquema que muestra la magnetización de las capas en el modelo de las dos resistencias para GMR. Debajo, la correspondiente representación de enlace fuerte discriminando la proyección de espín. Las longitudes de coherencia de los electrones en la primera capa son ℓ_1 y ℓ_2 para electrones con momento magnético de espín \uparrow y \downarrow , respectivamente. Note que las longitudes de coherencia se invierten en la capa adyacente. $\ell_1/\ell_2 = 1/2$ para todos los casos. *Fig. b) a d)* Potenciales químicos en función del índice de sitio con para $\ell_1 = 15 a$ en *fig. b)*, $\ell_1 = 1500 a$ en la *fig. c)*, y $\ell_1 = 150 a$ en la *fig. d)*. La longitud del sistema es $1000a$ y $V_{\downarrow\uparrow} = 0$ ($L_{sd} \rightarrow \infty$). Los potenciales químicos en los cables son $\mu_L = eV$ y $\mu_R = 0$. Las longitudes de onda de Fermi en el lado izquierdo son $\lambda_F = 45a$, para el momento magnético de espín \uparrow , y $\lambda_F = 30a$, para el \downarrow . En el ferromagneto derecho se cumple lo opuesto. Los parámetros elegidos no representan un esquema experimental específico.

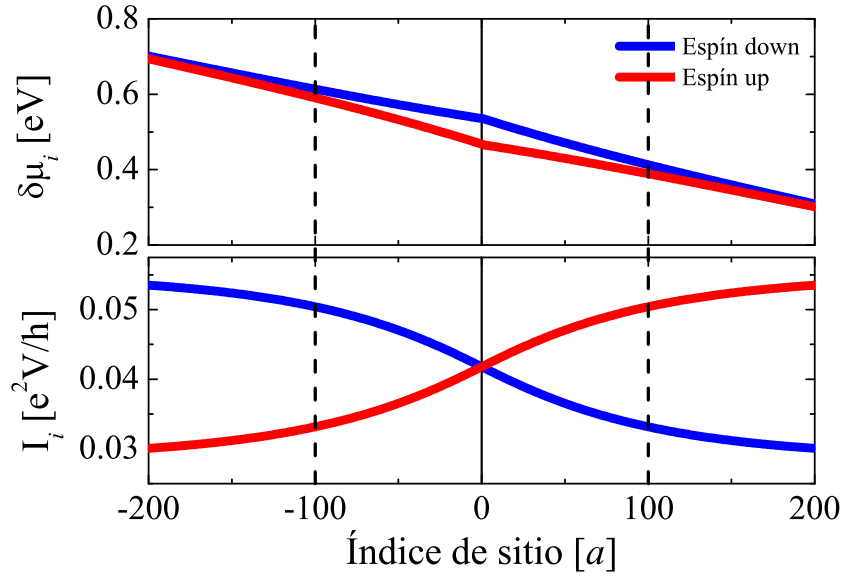


Figura 3.4: *Figura superior, perfil de los potenciales químicos en función de la posición $\delta\mu_i$ para el modelo semiclásico de la GMR con una longitud de difusión de espín finita, $L_{sd} = 100 a$. Figura inferior, se muestra el perfil de corrientes locales I_i para los electrones con espín \uparrow y \downarrow . El tamaño del sistema es $1000a$, y se cumple $\ell_1/\ell_2 = 1/2$ y $\ell_1 = 15a$.*

fenómeno es conocido como acumulación de espín, debido al desbalance en las ocupaciones de cada espín que se da en una escala del orden de L_{sd} alrededor de la interfaz. [VF93] En la figura inferior puede observarse cómo la inversión de las corrientes también se produce dentro de la escala de longitud L_{sd} . Para distancias mayores, las corrientes alcanzan un valor asintótico.

Los comportamientos descritos aquí están en acuerdo con la teoría semiclásica. [VF93] Esta situación refuerza el valor descriptivo y conceptual del modelo DP y de su versatilidad para adaptarse a diferentes regímenes, desde el puramente cuántico hasta el (semi)clásico.

3.6. Conclusión

Hemos resuelto un modelo simple que es representativo del fenómeno de la magnetorresistencia gigante (GMR) usando el modelo D'Amato-Pastawski multiterminal. En este modelo, cada orientación de espín es un canal de conducción diferente en donde el transporte electrónico dependiente de espín es intrínsecamente multiterminal. Mostramos que las principales características de la GMR pueden ser reproducidas utilizando este simple modelo.

Aprovechamos la capacidad de construir un modelo microscópico para diseñar la topografía de los procesos decoherentes. En este caso, se diseñaron las capas magnéticas al

alternar las tasas de probabilidad de los eventos decoherentes locales $\Gamma_{\phi,i}$ acorde al espín σ .

Proveemos expresiones que permiten calcular los perfiles de potenciales químicos y corrientes locales al aplicar técnicas basadas en el formalismo de Keldysh para las funciones de Green. Al depender solo de propiedades microscópicas, nuestro modelo es capaz de obtener información acerca de estos procesos que ocurren en el interior de la muestra.

Mientras se conserva una descripción que parte de un Hamiltoniano efectivo, el modelo es capaz de alcanzar los regímenes clásico y semiclassical, usualmente descriptos por otros formalismos como la ecuación de Boltzmann, solamente incrementando un único parámetro: la razón de probabilidad de los eventos decoherentes locales $\Gamma_{\phi,i}$.

Al contener el régimen donde los comportamientos cuánticos no son completamente suprimidos, como en las figuras 3.3-*c* y *d*, nuestro enfoque permitiría describir situaciones donde las interferencias cuánticas se vuelvan relevantes. [FAP14, SDR12]

Capítulo 4

Transporte dependiente del tiempo más allá de la formulación de Landauer-Büttiker

4.1. Introducción

La última década ha visto una necesidad imperiosa en describir la dinámica cuántica en una variedad de sistemas complejos en presencia de un ambiente. Entre estos se cuentan los sistemas atómicos en redes ópticas, [Blo04, CZ04] redes de espines interactuantes [CRC07] y dinámica de carga y magnetización de dispositivos nanoscópicos. [LJP⁺03, SKV⁺14, PJT⁺05]

El modo más común de tratar con decoherencia inducida por el ambiente en sistemas cerrados pequeños es mediante la ecuación maestra para la matriz densidad en la forma de Lindblad. [Lin76, Kos72] A los efectos de abordar sistemas de mayor tamaño, la estrategia usual es implementar la teoría de Redfield para un superoperador relajación, la cual no asegura la unitariedad estricta de la forma de Lindblad. [Red65, Sli96] Alternativamente, algunos trabajos apuntan a estrategias basadas en la dinámica estocástica de vectores de estado que sufre saltos cuánticos instantáneos (QJ, por *quantum jumps*). [DCM92, MCD93, TM92, CSV89, Car93] En efecto, para sistemas grandes, se ha mostrado que la solución numérica del método estocástico es de hecho más rápida que la implementación de la matriz densidad [BHP97].

Respecto al transporte de estado estacionario con decoherencia, la evaluación tradicional en términos del formalismo de Kubo [AA85, Tho74] fue progresivamente reemplazada por el formalismo de Landauer. [IL99] Este se implementa en la formulación de dispersión de Landauer-Büttiker (LB) donde los procesos decoherentes son introducidos mediante los voltímetros que conservan corrientes a través del modelo D’Amato-Pastawski (DP).

Posteriormente, se desarrolló la formulación dinámica, llamada “ecuación generalizada de Landauer-Büttiker” (GLBE) la cual está basada en la teoría de campos cuántica

de Kadanoff-Baym-Keldysh (KBK) para procesos fuera del equilibrio. [Pas92] La GLBE busca hallar la función densidad de Keldysh fuera del equilibrio en respuesta lineal, que es proporcional a la matriz densidad. En años recientes ha habido una explosión en el uso de la formulación KBK de dinámica de no-equilibrio en un marco consistente con cálculos de primeros principios. [MSSvL09, KUS⁺12] No obstante, las soluciones numéricas de este método se vuelven excesivamente demandantes, en particular, porque involucran integrales temporales de núcleos de memoria autoconsistentes. [MSSvL09, KUS⁺12, Pas92] Adicionalmente, en sistemas de muchos cuerpos fuertemente interactuantes, que están más allá de una descripción de campo medio tales como sistemas de espines, la formulación KBK podría involucrar costosos promedios sobre las configuraciones que intervengan.

Las limitaciones anteriores podrían ser superadas recurriendo a dos estrategias. Una es el uso de la evolución paso-a-paso del algoritmo Trotter-Suzuki para hacer prácticos algunos de los cálculos de la función densidad de Keldysh. [ADLP07, DALP07] Otra podría ser evitar el promedio sobre un ensamble mediante la estrategia conocida como “paralelismo cuántico”. Esta, usa una única función de onda pero que se construye como una superposición de todos los estados que participan en el ensamble estadístico. [ADLP08] El problema con estas propuestas es que están limitadas solo a dinámicas coherentes.

Aquí proponemos un modelo estocástico que extiende las ideas de Büttiker, D’Amato y Pastawski para evaluar problemas con decoherencia y dependencia temporal. Tal modelo, que llamamos modelo de “corrimientos cuánticos” (QD, por *quantum drift*), se basa en la dinámica estocástica de una función de onda. Utilizando un esquema de evolución temporal discreto paso-a-paso, imponemos una reinyección incoherente pero que asegura la conservación de la densidad. Luego, en semejanza al paralelismo cuántico, proponemos que la función de onda debe sumar una parte coherente y otra incoherente. Por tanto, cada realización se vuelve representativa de un conjunto de historias de interacción estocásticas, por lo que la función de onda no presenta saltos en la densidad pero sí en su derivada. Posteriormente, se realizan promedios sobre realizaciones en una cantidad necesaria, que varía de acuerdo al observable.

Antes de describir el desarrollo de nuestra propuesta, en la sección 4.2 haremos una revisión de las ideas fundamentales de los modelos de Büttiker y D’Amato y Pastawski, ya que sientan las bases de nuestro método. Luego, en la sección 4.3 presentaremos los fundamentos del modelo de corrimientos cuánticos (QD). Posteriormente mostraremos diversas aplicaciones que permiten evaluar el desempeño del método. Realizando una dinámica de un paquete de ondas a través de un dispositivo de tuneleo resonante de doble barrera (DBRTD por *double barrier resonant tunneling device*), en la sección 4.4.1 mostramos que el QD recupera las transmitancias decoherentes de estado estacionario de la formulación de Büttiker. En la sección 4.4.2 comparamos la dinámica del QD con la solución de Keldysh en un sistema cerrado decoherente donde ocurre una situación simple pero no-trivial: un sistema de dos niveles experimenta una transición de fase en su dinámica cuántica (QDPT). [ADLP06] En la sección 4.4.3, utilizamos el modelo QD para evaluar la decoherencia a través del eco de Loschmidt (LE) en el sistema de dos niveles. Por último, en la sección 4.4.4, realizamos un cálculo para muchos espines, donde se muestra el acuerdo de los modelos de QD y QJs y comparamos su desempeño numérico.

Realizamos una discusión final en la sección 4.5.

4.2. Transporte cuántico decoherente: reinyección, paralelismo, atenuación e incerteza en la energía

El primer modelo fenomenológico para decoherencia fue desarrollado en el contexto de transporte electrónico en sistemas mesoscópicos coherentes en fase por Büttiker. Como hemos mencionado anteriormente, él se dió cuenta de que un voltímetro es capaz de introducir decoherencia. En un circuito de tres terminales (la fuente, L , el sumidero, R , y el voltímetro, ϕ), los electrones que provienen de L y de R entran en ϕ donde sufren un proceso decoherente, y un potencial químico apropiado en ϕ garantiza una corriente nula en ese terminal. Es decir, cada electrón que ingresa al voltímetro se compensa por otro electrón **reinyectado** hacia el sistema. Es por ello que, este electrón, al provenir desde el voltímetro, no conserva ninguna memoria de fase o correlación respecto de los electrones en la muestra.

Consideremos que T_{ij} representa la transmitancia cuántica desde el terminal j al i , donde $i(\neq j)$ toma los valores L, R o ϕ . La aplicación de las ecuaciones de Landauer-Büttiker para un sistema con un único voltímetro resultan en una transmitancia a través del sistema dada por

$$\tilde{T}_{RL} = \underbrace{T_{RL}}_{\text{coherente}} + \underbrace{\frac{T_{R\phi}T_{\phi L}}{T_{R\phi} + T_{\phi L}}}_{\text{decoherente}}. \quad (4.1)$$

El primer término es la probabilidad de que la partícula se desplace desde L a R , sin sufrir ningún proceso decoherente en el voltímetro ϕ . El segundo término representa a aquellos electrones que sí han interactuado con el ambiente en ϕ . Uno puede reconocer esta fórmula como la conductancia de dos **camino**s **paralelos**. Uno de ellos con una conductancia $(2e/h)T_{RL}$, mientras el otro contiene la suma de dos conductancias en serie $(2e/h)T_{R\phi}$ y $(2e/h)T_{\phi L}$.

Estas ideas se vuelven más concretas al analizarlas mediante un ejemplo particular. Consideremos un sistema, por ejemplo un punto cuántico caracterizado por un único nivel de energía relevante E_0 . Sea \bar{E}_0 la energía local apropiadamente corregida por la presencia de los contactos, cuya energía de Fermi es ε y Γ_L y Γ_R son las incertezas en la energía producidas por el escape hacia los terminales a la izquierda y derecha, respectivamente. La función de Green retardada del sistema se define en términos del Hamiltoniano efectivo:

$$G^R(\varepsilon) = \frac{1}{(\varepsilon - \bar{E}_0) + i(\Gamma_0 + \Gamma_\phi)}, \quad (4.2)$$

donde $\Gamma_0 = \Gamma_L + \Gamma_R$ es el ancho natural de la resonancia debido a la presencia de los cables. [PM01, Pas92] Luego, cada una de las transmitancias mencionadas anteriormente puede ser escrita explícitamente en términos de $G^R(\varepsilon)$ usando la fórmula de Fisher y Lee

$$T_{ij}(\varepsilon) = 2\Gamma_i |G(\varepsilon)|^2 2\Gamma_j, \quad (4.3)$$

con $i \neq j$. Si $T_{RL}^{(0)}$ es la transmitancia para los electrones que van desde L hasta R en el sistema análogo en ausencia del voltímetro, es decir $\Gamma_\phi = 0$, la parte coherente T_{RL} en la ecuación 4.1 puede ser escrita como el producto de $T_{RL}^{(0)}$ y un factor de **atenuación** $(1 - \Lambda(\varepsilon))$. Por ello, la transmitancia efectiva puede escribirse en términos de una parte coherente atenuada más una incoherente.

El modelo de D'Amato y Pastawski (DP) generaliza estas ideas. En este caso, el sistema aislado se describe por un Hamiltoniano H_0 . A través del modelo DP, consideramos que la decoherencia se induce por un proceso local (por ejemplo, un voltímetro, un baño de fonones local) en la aproximación de la regla de oro de Fermi (FGR, ver A.3). Estas interacciones producen una incerteza en la energía dada por Γ_ϕ para cada estado local con una tasa de interacción sistema-ambiente, $1/\tau_{SE} = 2\Gamma_\phi/\hbar$, la cual posee un carácter irreversible. [DP90, Pas92, PM01]

Un ejemplo de cómo afecta la decoherencia en cantidades observables es la densidad local de estados (LDoS, por *local density of states*), que se calcula a partir de la función de Green según

$$N_0(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G^{(0)}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_0}{(\varepsilon - \bar{E}_0)^2 + \Gamma_0^2}. \quad (4.4)$$

Incluyendo la interacción sistema-ambiente, la LDoS adquiere una incerteza extra en la energía, o un **ensanchamiento** Γ_ϕ . Luego, la LDoS en presencia de decoherencia, $\tilde{N}_0(\varepsilon)$, se obtiene de $N_0(\varepsilon)$ reemplazando el ancho característico Γ_0 por $\Gamma_0 + \Gamma_\phi$. Alternativamente, \tilde{N}_0 puede ser obtenido considerando que los procesos decoherentes individuales corrigen las resonancias con energía \bar{E}_0 en una cantidad ΔE . Luego, al tomar un promedio sobre todas las posibles correcciones ΔE , la densidad de estados se modifica en la forma

$$\tilde{N}_0(\varepsilon) = \int N_0(\varepsilon - \Delta E) P(\Delta E) d\Delta E, \quad (4.5)$$

$$\text{con } P(\Delta E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_\phi}{(\Delta E)^2 + \Gamma_\phi^2}, \quad (4.6)$$

donde, $P(\Delta E)$ es una distribución de probabilidad Lorentziana para los corrimientos ΔE . Ensanchamientos similares ocurren en otros observables, tal como las funciones de correlación.

4.3. El método “Quantum Drift”

Utilizando la expansión de Trotter-Suzuki (ver Apéndice B) la dinámica cuántica (coherente) se obtiene de la aplicación secuencial de operadores de evolución unitarios que transforman el estado inicial en pequeños pasos temporales de duración dt . Si la interacción sistema-ambiente tiene una tasa $1/\tau_{SE}$, durante cada intervalo dt la partícula tiene una probabilidad $p = dt/\tau_{SE}$ de experimentar un proceso decoherente y una probabilidad $(1-p)$ de sobrevivir. [Pas91, Pas92] Consideremos un único estado $|0\rangle$ que puede sufrir un proceso decoherente. Así, después de un tiempo dt , la amplitud coherente se reduce en un

factor $\sqrt{1-p}$ debido a los procesos decoherentes. A los efectos de conservar la densidad, y en concordancia con la idea de Büttiker, la función de onda debe incluir un término que tenga en cuenta la reinyección decoherente. Luego, esta debe poseer una fase aleatoria θ tomada de alguna distribución de probabilidad P_θ . Tanto la contribución coherente como la incoherente pueden ser representados en la misma función de onda,

$$\tilde{\psi}_0 = \psi_0^{\text{coh.}} + \psi_0^{\text{incoh.}} \quad (4.7)$$

$$= \left(\sqrt{1-p} + \lambda_\theta e^{i\theta} \right) \psi_0 \quad (4.8)$$

donde $\tilde{\psi}_0 = \langle 0 | \tilde{\psi} \rangle$ y $|\tilde{\psi}\rangle$ es la función de onda decoherente definida en todo el sistema. Nótese que al incluir el término de reinyección aleatoria se recurre a la estrategia del paralelismo cuántico.

La cancelación de los términos cruzados en el promedio sobre ensamble se asegura por la condición $\int P_\theta \sqrt{1-p} \lambda_\theta e^{i\theta} d\theta = 0$. En cualquier caso, el coeficiente λ_θ debe ser elegido tal que asegure la conservación de la densidad $|\sqrt{1-p} + \lambda_\theta e^{i\theta}| \equiv 1$. Es por ello que se cumple que

$$\tilde{\psi}_0 = e^{i\beta_0} \psi_0, \quad (4.9)$$

para alguna fase aleatoria β_0 .

Es importante notar que en la evolución de Trotter-Suzuki el factor $e^{i\beta_0}$ representa sólo un corrimiento de la fase en una cantidad β_0 . Dado que en la evolución unitaria durante dt , la fase está dada por la energía, en realidad el proceso puede asociarse con una corrección $\Delta E_0 = \hbar\beta_0/dt$ a la energía del estado $|0\rangle$. La ecuación 4.5 muestra que un nivel aislado que se acopla a un ambiente adquiere una incerteza en la energía Γ_ϕ , que en la aproximación de la FGR, se caracteriza por una forma Lorentziana. Esto, en efecto, se asocia a una distribución de corrimientos instantáneos en la energía ΔE_0 tomados de la distribución Lorentziana. En nuestro modelo, la corrección ΔE_0 , es un número aleatorio que varía paso a paso para representar la incerteza introducida por el ambiente a modo de un ruido clásico. Luego, la distribución de probabilidad asociada a la fase aleatoria P_{β_0} es

$$P(\beta_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_\phi dt / \hbar}{\beta_0^2 + (\Gamma_\phi dt / \hbar)^2}. \quad (4.10)$$

Tomar esta distribución implica que los procesos decoherentes clave son aquellos que involucran los procesos altamente improbables de gran energía ΔE_0 , es decir, las colas de la Lorentziana. Esto ocurre ya que los corrimientos que resultan de fases aleatorias en el centro de la distribución modifican la fase levemente en comparación con las fases tomadas de las colas de la Lorentziana. Estos últimos producen cambios sustanciales en la fase local y por ende son claves en la degradación de la coherencia.

Esta propuesta puede extenderse a todos los niveles E_n de un Hamiltoniano en una base arbitraria. En particular, en una base de un modelo de enlace fuerte, cada energía de sitio E_n adquiere una incerteza en su energía $\Gamma_{\phi,n}$ y éstas son perturbadas con una energía aleatoria ΔE_n con forma Lorentziana. Más formalmente, podemos definir el operador $\hat{\Sigma}$ que es diagonal donde $\Sigma_{n,n'} = \Delta E_n \delta_{n,n'}$. Para un Hamiltoniano matricial H_0 de

dimensiones $N \times N$ consideramos un Hamiltoniano efectivo instantáneo $\widehat{H}_{\text{ef.}} = \widehat{H}_0 + \widehat{\Sigma}$. Luego, obtendremos el operador de evolución unitario en la expansión de Trotter-Suzuki,

$$\widehat{U}(dt) = e^{-i\widehat{H}_{\text{ef.}}dt/\hbar}, \quad (4.11)$$

$$\simeq e^{-i\widehat{\Sigma}dt/\hbar} e^{-i\widehat{H}_0dt/\hbar} = \widehat{U}_{\Sigma}(dt)\widehat{U}_0(dt). \quad (4.12)$$

De esta forma definimos el operador decoherencia como $\widehat{U}_{\Sigma} = \exp[-i\widehat{\Sigma}dt/\hbar]$. Al ser este operador unitario, la densidad de probabilidad se conserva en el tiempo y, en consecuencia, no presenta discontinuidades ("saltos") entre los pasos del algoritmo. Sin embargo, otros observables que involucran correlaciones entre dos o más sitios, como la corriente o el momento, presentan saltos debidos a los corrimientos de fase aleatorios. No obstante, al tomar el promedio en ensamble éstos son suavizados.

En resumen, la prescripción para incluir decoherencia en la dinámica cuántica es incluir, en cada paso temporal, una corrección aleatoria β_n a la fase de cada estado local. Tal corrección tendrá una distribución de probabilidad dada por P_{β_n} de la ecuación 4.10, es decir, una Lorentziana cuyo ancho se asocia a la incerteza en la energía local $\Gamma_{\phi,n}$. Finalmente, la evolución de una función de onda se realiza paso a paso,

$$|\widetilde{\psi}(t)\rangle = \prod_{j=1}^{N_t} e^{-i\widehat{\Sigma}dt/\hbar} e^{-i\widehat{H}_0dt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (4.13)$$

donde $N_t = t/dt$.

4.3.1. Ejemplo: dinámica decoherente de un paquete de ondas

Para ilustrar el método QD, vamos a considerar la dinámica de un paquete de ondas Gaussiano que se mueve a lo largo de una cadena uniforme con un vector de onda $k = \pi/2a$, lo que evita que el paquete se ensanche durante la evolución. El Hamiltoniano de enlace fuerte que describe a la cadena está dado por

$$\widehat{H}_{\text{cad.}} = \sum_{n=1}^{N-1} V(\widehat{c}_{n+1}^{\dagger}\widehat{c}_n + \widehat{c}_n^{\dagger}\widehat{c}_{n+1}), \quad (4.14)$$

donde \widehat{c}_n^{\dagger} y \widehat{c}_n son los operadores creación y aniquilación de la partícula en el sitio n . El paquete está definido inicialmente por el estado

$$|\psi_k(0)\rangle = A \sum_{n=1}^N e^{-\left(\frac{(n-n_0)a}{2\lambda}\right)^2} e^{ikna} |n\rangle, \quad (4.15)$$

donde $A \simeq 1/\sqrt[4]{2\pi\lambda^2}$ es el factor de normalización, n_0 es la posición inicial del centro del paquete y λ es el ancho del mismo. Consideraremos que,

$$\widehat{\Sigma} = -2i\Gamma_{\phi} \sum_{n=1}^N \widehat{c}_n^{\dagger}\widehat{c}_n, \quad (4.16)$$

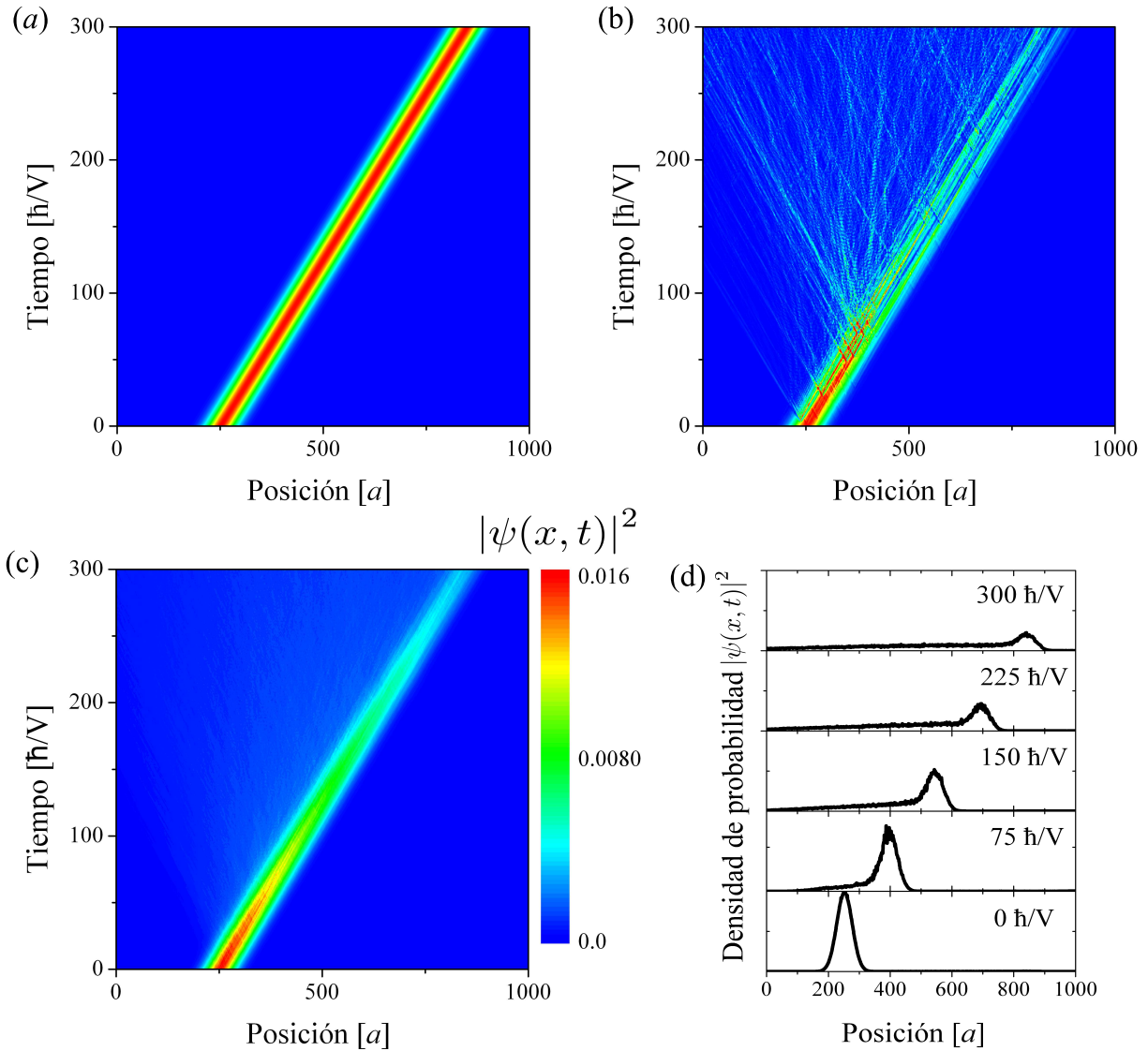


Figura 4.1: Densidad de probabilidad $|\psi(x, t)|^2$ en función de la posición y el tiempo para un paquete de ondas Gaussiano que se mueve a lo largo de la cadena uniforme. a) Dinámica coherente, donde el paquete no experimenta eventos de perturbación de su fase. El paquete tiene un $k = \pi/(2a)$ por lo que se desplaza hacia la derecha a medida que transcurre el tiempo (hacia arriba). b) Una realización del método de corrientes cuánticas. Se observan pequeños paquetes de onda con otro momento, visualizados como filamentos, que se desprenden del paquete coherente debido a los procesos de dispersión. c) Dinámica decoherente promedio sobre 100 realizaciones. Se puede observar la reducción del haz coherente. En b) y en c) los eventos decoherentes se caracterizan por un tiempo de decoherencia $\tau_{SE} = 150\hbar/V$. d) Cortes de la densidad de probabilidad mostrada en c) a diferentes tiempos. En todos los casos, los valores mínimo y máximo del eje vertical son 0 y 0.016 respectivamente. A medida que el paquete se propaga hacia la derecha, se conforma una "estela" debido a la fracción de la densidad que se dispersa y queda atrás.

por lo que todos los sitios experimentan decoherencia de forma tal que adquieren la misma incerteza en energía Γ_ϕ .

En la figura 4.1 se muestran la dinámica coherente (no perturbada) en *a*), una realización o implementación de la dinámica que experimenta los procesos de reinyección en *b*) y la dinámica decoherente en *c*), para la cual es necesario realizar un promedio sobre un ensamble de realizaciones. Se observa que en la realización decoherente aparecen “filamentos” o pequeños paquetes de onda que se desprenden del haz coherente debido a efectos de retrodispersión (*back-scattering*). Esto se genera como consecuencia de los procesos de reinyección, donde al inducir una fase local aleatoria, eventualmente se produce una relación de fases en un conjunto de sitios vecinos que da lugar a un “nuevo momento local”. Luego, esa fracción se desprende del haz coherente con otro momento, que incluso puede tener dirección opuesta. Este efecto se vuelve más importante cuando las fases aleatorias caen en las regiones de las colas de la Lorentziana, es decir cuando la perturbación a la fase β_n es muy grande. Las velocidades de estos paquetes de onda, que se relacionan con las pendientes observadas en su trayectoria, son diversas, lo que indica la inelasticidad de los procesos que toman lugar. Como puede observarse, estos desprendimientos llevan a una reducción en la intensidad del haz coherente.

La trayectoria decoherente puede pensarse como una superposición de historias individuales, cada una representando el movimiento de una partícula en una caminata aleatoria. La ocurrencia de un evento decoherente se comporta como un proceso estocástico de Poisson. Cada partícula tiene una probabilidad $p = dt/\tau_{SE}$ de experimentar un proceso decoherente y una probabilidad $(1-p)$ de sobrevivir durante el lapso de tiempo dt , donde

$$(\tau_{SE})^{-1} = 2\Gamma_\phi/\hbar. \quad (4.17)$$

Luego, la probabilidad de supervivencia $P(t)$ a los eventos decoherentes decae exponencialmente en el tiempo con una tasa dada por 4.17. Una superposición de estas historias mostraría que la densidad de probabilidad en el haz principal de la figura 4.1 decae exponencialmente.

4.4. Aplicaciones

4.4.1. Transporte decoherente

Vamos a comprobar nuestro modelo usando un sistema que lo inspiró: el transporte decoherente a través de un dispositivo de tuneo resonante de doble barrera (double barrier resonant tunneling device: DBRTD). En un esquema de enlace fuerte, el DBRTD se representa por un sitio de energía resonante $E_0 = 0$ acoplado a dos cables semi-infinitos, L y R , que actúan como fuente y sumidero y tienen un ancho de banda $4V$ (donde V se toma como la unidad de energía). Las amplitudes de tuneo a través de las barreras son

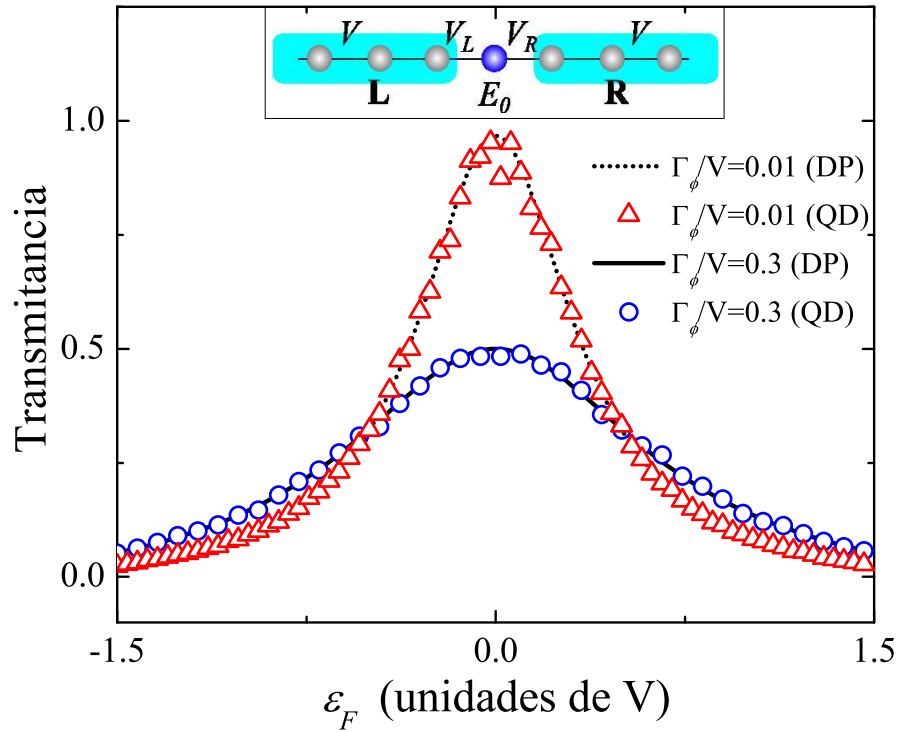


Figura 4.2: Transmitancia en presencia de decoherencia a través del dispositivo de tunelamiento resonante de doble barrera (DBRTD), cuyo Hamiltoniano de enlaces fuertes se esquematiza en la parte superior de la figura. La transmitancia se obtiene mediante los modelos de D'amato y Pastawski (DP) y corrimientos cuánticos (QD) para dos valores de intensidad de decoherencia Γ_ϕ/V . Para $\Gamma_\phi/V = 0,01$, se muestra la transmitancia del modelo DP con la línea de puntos y la del QD con triángulos rojos usando un número de realizaciones $N_S = 5$ en el promedio. Para $\Gamma_\phi/V = 0,3$, la transmitancia usando DP se muestra con la línea sólida y el resultado del QD con círculos azules usando $N_S = 50$ realizaciones. Los otros parámetros son: $V = 1$, $E_0 = 0$, $V_L = V_R = 0,15$, $E_r = 0$

V_L y V_R . Luego, el Hamiltoniano de enlace fuerte es

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & E_0 \hat{c}_0^+ \hat{c}_0 - V_L (\hat{c}_{-1}^+ \hat{c}_0 + \hat{c}_0^+ \hat{c}_{-1}) - V_R (\hat{c}_1^+ \hat{c}_0 + \hat{c}_0^+ \hat{c}_1) \\ & - \sum_{n=1}^{\infty} V (\hat{c}_{n+1}^+ \hat{c}_n + \hat{c}_n^+ \hat{c}_{n+1}) - \sum_{n=-1}^{-\infty} V (\hat{c}_{n+1}^+ \hat{c}_n + \hat{c}_n^+ \hat{c}_{n+1}). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Para evaluar la transmitancia usando un cálculo basado en dinámica, construimos un paquete de ondas Gaussiano con momento $\hbar k$ situado dentro del cable izquierdo y lejos de la barrera. Un paquete de ondas ancho asegura una energía bien definida. El coeficiente de transmisión se obtiene al integrar la densidad en el lado derecho después de que el paquete se haya transmitido o reflejado, es decir después de que haya abandonado la región central. Esta transmitancia es equivalente al resultado analítico de estado estacionario de la fórmula de Fisher-Lee.[PM01]

La decoherencia se introduce sólo en el nivel resonante durante toda la evolución siguiendo la prescripción de la sección anterior. En la figura 4.2 comparamos los resultados del QD con aquellos que resultan de la solución de Büttiker dada por la ecuación 4.1 y usando la fórmula de Fisher y Lee 4.3. Mostramos estas cantidades para diferentes intensidades de decoherencia Γ_ϕ . Podemos observar que se tiene una gran coincidencia entre las curvas y, lo que hace más valioso aún al método, el número de realizaciones en el promedio fue del orden de 10. Esto ocurre porque el observable “densidad transmitida” involucra una integración espacial y por lo tanto podemos aprovechar un efecto de auto-promedio. Esta tendencia se mantendría en observables globales, o colectivos, como por ejemplo la conductancia decoherente en alambres largos.

El método QD ajusta los valores teóricos hasta la precisión deseada. La única diferencia que uno podría notar en algunos casos específicos, tal como picos angostos, surgiría del hecho que los paquetes de onda se construyen a partir de estados que están definidos con un cierto rango de energía, como consecuencia del principio de incertidumbre. Por otro lado, la teoría de dispersión (*scattering*) o el transporte de estado estacionario, al usar ondas planas asintóticas, no posee tal incerteza en la energía. Este ejemplo es representativo de una amplia variedad de problemas de estado estacionario que pueden ser resueltos con el método QD, con el único costo de recursos computacionales. Encontramos que en el QD, así como en el paralelismo cuántico, [ADLP07] los observables colectivos tienen una tendencia a auto-promediarse. Esto hace a nuestro modelo una herramienta muy prometedora para evaluar dinámicas decoherentes en sistemas extendidos así como también en problemas de muchos cuerpos. Sin embargo, la verdadera ventaja del QD empieza a ser apreciada al abordar problemas con dependencia temporal, como mostramos en la siguiente sección.

4.4.2. Transición de fase en la dinámica cuántica en un sistema de dos niveles

Consideremos un sistema de dos niveles (TLS, por *two level system*) que describe la dinámica de una carga o un espín, [DALP07, SKV⁺14] donde los estados son $|0\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle = \hat{c}_0^\dagger |vacuum\rangle$ y $|1\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\rangle = \hat{c}_1^\dagger |vacuum\rangle$, con energía degenerada E_0 y una interacción V que los mezcla. Este sistema tan simple presenta una dinámica no trivial cuando uno de sus niveles interactúa con un ambiente de espines: aparece una transición de fase en la dinámica cuántica (QDPT, *quantum dynamical phase transition*). [ADLP06]

En la QDPT ciertos observables presentan un comportamiento no analítico en función de la intensidad de la interacción sistema-ambiente. La QDPT se omite en la solución de la matriz densidad en la aproximación secular usual de la teoría de Redfield [MKBE74] pero se muestra en una variante del modelo de QJ. [ADLP06]

El Hamiltoniano del TLS es

$$\hat{H}_{TLS} = E_0(\hat{c}_0^\dagger\hat{c}_0 + \hat{c}_1^\dagger\hat{c}_1) - V(\hat{c}_1^\dagger\hat{c}_0 + \hat{c}_0^\dagger\hat{c}_1). \quad (4.19)$$

Si este sistema no se encuentra perturbado por un ambiente, los autovalores son $E_0 \pm V$ y corresponden a los estados superposición $(|0\rangle \mp |1\rangle) / \sqrt{2}$. La probabilidad de supervivencia

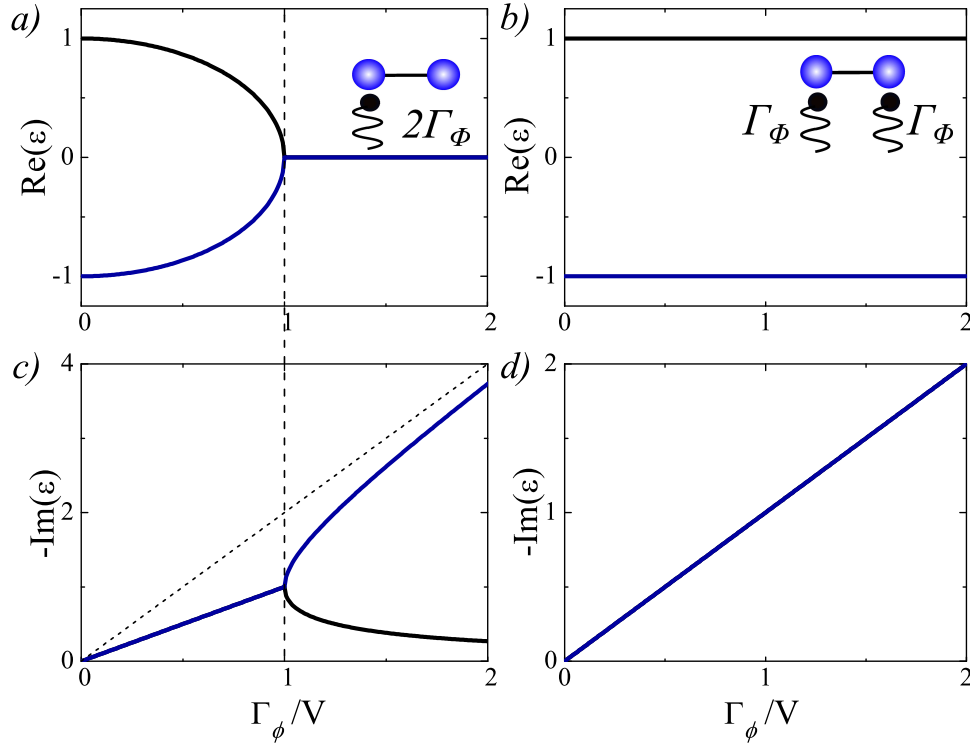


Figura 4.3: Partes real (arriba) e imaginaria (abajo) de los polos de la función de Green de un sistema de dos niveles en función de la intensidad de interacción con el ambiente. En (a) y (c) la interacción con el ambiente es asimétrica, es decir sólo uno de los estados experimenta el efecto del ambiente, por lo que se produce una bifurcación no-analítica en los polos de la función de Green. En (b) y (d) ambos estados experimentan una interacción simétrica con el ambiente, y los polos simplemente se desplazan al plano complejo.

de una excitación con un estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$, es decir, el elemento diagonal de la matriz densidad, es

$$P_{00}(t) = \left| \langle 0 | e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | 0 \rangle \right|^2, \quad (4.20)$$

$$= 1/2 + 1/2 \cos \omega_0 t. \quad (4.21)$$

Podemos observar que $P_{00}(t)$ presenta oscilaciones de Rabi [CTGDR92] con frecuencia $\omega_0 = 2V/\hbar$ y período $T = \pi\hbar/V$.

Cuando el sistema de dos niveles sufre la interacción asimétrica de un ambiente, como se muestra en el esquema de la figura 4.3 a), la QDPT ya aparece en el espectro del Hamiltoniano efectivo no-Hermítico. [Rot09] Esto puede observarse al incluir en el Hamiltoniano efectivo un término de interacción del ambiente con uno de los sitios,

$$\hat{\Sigma} = -i2\Gamma_\phi \hat{c}_0^+ \hat{c}_0, \quad (4.22)$$

donde $2\Gamma_\phi$ es la incerteza en energía que adquiere el nivel. Por simplicidad consideraremos $E_0 = 0$. En este caso, las energías toman la forma

$$\varepsilon_\pm = i\Gamma_\phi \pm \sqrt{V^2 - \Gamma_\phi^2}, \quad (4.23)$$

donde podemos notar la existencia de un punto excepcional cuando $V^2 - \Gamma_\phi^2$ cambia de signo. Cuando tal situación toma lugar, se evidencia el comportamiento no analítico en la QDPT al producirse un colapso de $\text{Re}(\varepsilon_\pm)$ y una bifurcación en $\text{Im}(\varepsilon_\pm)$, como se muestra en las figuras 4.3 (a) y (c).

Sin embargo, si la interacción del sistema con el ambiente es simétrica, como se muestra en el esquema incrustado en la figura 4.3 b), el Hamiltoniano se corrige adicionando el término

$$\hat{\Sigma} = -i\Gamma_\phi (\hat{c}_0^+ \hat{c}_0 + \hat{c}_1^+ \hat{c}_1). \quad (4.24)$$

Por tanto, las energías simplemente se desplazan al plano complejo,

$$\varepsilon_\pm = i\Gamma_\phi \pm |V_{AB}| \quad (4.25)$$

y las bifurcaciones no se producen al nivel del Hamiltoniano. No obstante, la QDPT ocurre pero sólo en la matriz densidad si la positividad es asegurada. [Pas07] Luego, obtener la QDPT en un modelo con interacción simétrica de ambos estados con el ambiente constituye una prueba definitiva para el método QD.

Consideremos un ambiente que interactúa independientemente con cada estado con una tasa descrita por la regla de oro de Fermi $1/\tau_{SE} = 2\Gamma_\phi/\hbar$. Las implicaciones físicas de este modelo se discuten en la siguiente sección en el contexto de un sistemas de espines. La evolución numérica del TLS se realiza eligiendo a Γ_ϕ como el ancho de la distribución Lorentziana.

Compararemos nuestro método QD, donde la probabilidad de supervivencia decoherente es

$$\tilde{P}_{00}(t) = \left| \langle 0 | \prod_{n=1}^{N_t} e^{-i\hat{\Sigma}_n dt/\hbar} e^{-i\hat{H}_0 dt/\hbar} | 0 \rangle \right|^2, \quad (4.26)$$

con la solución analítica de la GLBE. Esta última fue resuelta exactamente para este problema en las referencias [Pas91, ADLP06, Pas07], en las cuales se obtiene, para la probabilidad de supervivencia,

$$\tilde{P}_{00}(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} e^{-\Gamma_\phi t/\hbar} \left[\cos(\omega t) + \frac{\Gamma_\phi}{2\omega} \sin(\omega t) \right]. \quad (4.27)$$

Luego, las oscilaciones de los elementos diagonales y no diagonales de la matriz densidad oscilan con una frecuencia ω , que es menor que la frecuencia de Rabi ω_0 :

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - (\Gamma_\phi/\hbar)^2}. \quad (4.28)$$

Esta ecuación evidencia que la frecuencia de oscilación del TLS exhibe un comportamiento no analítico. La frecuencia ω toma valores reales cuando $\Gamma_\phi/\hbar < \omega_o$ (régimen amortiguado). Más allá de este valor, es decir $\Gamma_\phi/\hbar > \omega_o$ (régimen sobreamortiguado), $Re(\omega) \equiv 0$, y luego las oscilaciones son suprimidas por completo. Consecuentemente, $\tilde{P}_{00}(t)$ es la suma de dos decaimientos exponenciales:

$$\tilde{P}_{00}(t) = \frac{1}{2} - \frac{\gamma_2}{2(\gamma_1 - \gamma_2)} e^{-\gamma_1 t} + \frac{\gamma_1}{2(\gamma_1 - \gamma_2)} e^{-\gamma_2 t}, \quad (4.29)$$

donde la tasa de decaimiento $\gamma_{1(2)}$ es

$$\gamma_{1(2)} = \frac{1}{\hbar} \left(\Gamma_\phi \pm \sqrt{\Gamma_\phi^2 - (\hbar\omega_o)^2} \right). \quad (4.30)$$

Note que, a tiempos cortos, $\tilde{P}_{00}(t)$ es siempre de la forma $1 - \omega_o^2 t^2/4 = 1 - V^2 t^2/\hbar^2$, que es característico de una evolución cuántica sin perturbaciones. Esto ocurre porque, a tiempos cortos, la interacción con el ambiente tiene un efecto acumulado muy pequeño sobre la probabilidad de supervivencia, y así este observable aún puede ser determinado por la dinámica cuántica no perturbada. En un régimen fuertemente decoherente, $\Gamma_\phi/\hbar \gg \omega_o$, las tasas de decaimiento tienden a $\gamma_1 \simeq 2\Gamma_\phi/\hbar$, $\gamma_2 \simeq \hbar\omega_o^2/2\Gamma_\phi$, lo que define una tasa de decaimiento a tiempos cortos, γ_1 , y una tasa, γ_2 , que domina a tiempos largos de la forma $\tilde{P}_{00}(t) \propto e^{-\gamma_2 t}$. Ambos términos exponenciales son necesarios para obtener la evolución completa, en particular para representar el comportamiento cuadrático a tiempos cortos.

En la figura 4.4(a) se muestran las tasas de decaimiento de la ecuación 4.30. La QDPT se manifiesta como la bifurcación de estas tasas. Las tasas obtenidas de un ajuste se muestran como puntos superpuestos a la curva teórica. En la figura 4.4(b), se muestran las oscilaciones de Rabi de la probabilidad de supervivencia promedio, $\tilde{P}_{00}(t)$, que es atenuada exponencialmente con $\tau^{-1} \simeq \Gamma_\phi/\hbar = 1/2(\tau_{SE})^{-1}$. Este es el ejemplo más común de decoherencia en sistemas de dos niveles. La $\tilde{P}_{00}(t)$ y las razones de decaimiento ajustadas coinciden perfectamente con la solución de las GLBE. También se muestra una única realización del método QD. Nótese que no hay saltos en la probabilidad de supervivencia, y que el comportamiento oscilatorio domina la evolución. En la figura 4.4(c) se muestra la $\tilde{P}_{00}(t)$ en el régimen subamortiguado para un valor de $\Gamma_\phi = 1V$, donde el comportamiento oscilatorio es pequeño. En la figura 4.4(d) mostramos $\tilde{P}_{00}(t)$ en el régimen sobreamortiguado, para $\Gamma_\phi = 2,1V$. Podemos identificar el comportamiento inicial cuadrático y, a tiempos largos, el decaimiento exponencial con la tasa $\gamma_2 \propto 1/\Gamma_\phi$. Mientras mayor es Γ_ϕ , más lento decae $\tilde{P}_{00}(t)$. Esto es una característica del *efecto Zenón cuántico* en que el sistema es continuamente perturbado, lo que ocasiona que la evolución se “congele” en un estado próximo a la condición inicial. Al incrementar Γ_ϕ , cada realización se asemeja a un proceso estocástico que conserva el inicio de forma cuadrática. Las realizaciones no presentan discontinuidades o saltos en la densidad, sin embargo lo hacen en sus correlaciones, lo que se ve como cambios abruptos en las pendientes locales.

La dinámica de los observables emerge luego de realizar un promedio sobre ensamble. Mientras la probabilidad de supervivencia no se encuentre muy cerca de su valor asintótico

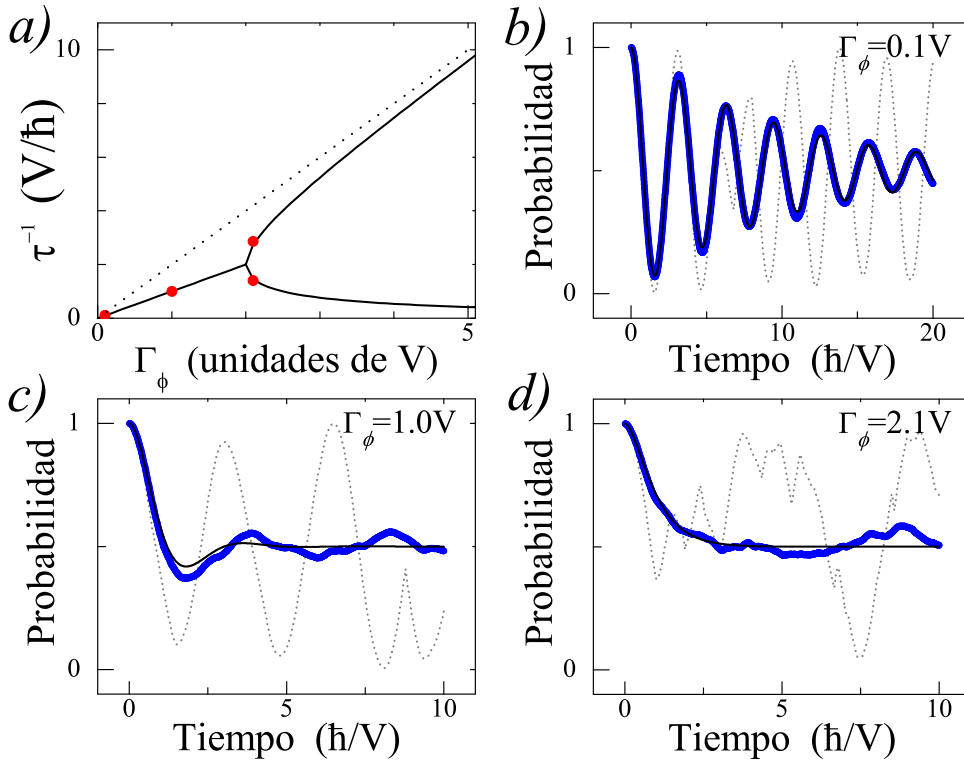


Figura 4.4: (a) Tasas de decaimiento predichas por las ecuaciones 4.27 y 4.30 para la probabilidad de supervivencia de un electrón en el estado $|0\rangle$ del sistema de dos niveles (TLS). Los puntos rojos indican las tasas de la solución de la GLBE para las evoluciones dinámicas mostradas en las figuras (b) – (d). La transición de fase en la dinámica cuántica (QDPT) ocurre como una bifurcación en las tasas para el valor crítico $\Gamma_\phi/V = 2$. La línea punteada representa el valor asintótico $2\Gamma_\phi/\hbar$. En (b) – (d), mostramos las probabilidades de supervivencia $\tilde{P}_{00}(t)$ (línea gruesa azul), las soluciones de las GLBE (línea delgada negra), y las realizaciones individuales (línea de guiones gris) en el régimen subamortiguado, en (b) con $\Gamma_\phi/V = 0,1$ y (c) con $\Gamma_\phi/V = 1$, y en el régimen sobreamortiguado, (d) con $\Gamma_\phi/V = 2,1$. Las realizaciones individuales tienden a preservar las oscilaciones. Además, no presentan saltos en las densidades sino en las pendientes. El promedio en ensamble fue tomado sobre $N_S = 100$ realizaciones. Para $\tilde{P}_{00}(t) \simeq 1/2$ se observan las fluctuaciones típicas del orden de $1/\sqrt{N_S}$. El promedio $\tilde{P}_{00}(t)$ tiende a la solución de la GLBE al incrementar N_S .

$1/2$, una representación razonable de $\tilde{P}_{00}(t)$ puede ser obtenida con un promedio sobre alrededor de $N = 100$ realizaciones, como se muestra en la figura 4.4. En casos que presentan amortiguamiento más intenso o que sea necesario describir parte del comportamiento asintótico, se evidencian fluctuaciones típicas de los números aleatorios, donde los observables tienen una precisión que varía con el número de implementaciones en el promedio, N , de la forma $1/\sqrt{N}$. Luego, para obtener coincidencia con los valores teóricos exactos con precisión razonable (1%) se necesitan alrededor de $N = 10\,000$ realizaciones.¹

4.4.3. Eco de Loschmidt

Siguiendo la lógica de las secciones previas, uno estaría tentado de asignar el significado de la decoherencia al decaimiento de las oscilaciones. Sin embargo, para caracterizar el efecto de la decoherencia en un observable sería necesario filtrar la dinámica intrínseca de este observable. Un modo de realizar este procedimiento es a través del eco de Loschmidt (LE). [JP01] Este representa la cantidad de excitación recuperada después de un procedimiento de reversión temporal implementado en presencia de un ambiente. La ventaja es que el LE codifica en un observable local las pérdidas de las correlaciones no locales. Tal como en experimentos de resonancia magnética nuclear (NMR), esto es consistente con cambiar el signo del Hamiltoniano actuante, $\hat{H}_0 \rightarrow -\hat{H}_0$. Al usar la expansión de Trotter-Suzuki, el LE puede definirse como:

$$M_{00}(2t) = \left| \langle 0 | \prod_{m=N_t+1}^{2N_t} e^{+i\hat{H}_0 dt/\hbar} e^{-i\hat{\Sigma}_m dt/\hbar} \times \prod_{n=1}^{N_t} e^{-i\hat{\Sigma}_n dt/\hbar} e^{-i\hat{H}_0 dt/\hbar} | 0 \rangle \right|^2 \quad (4.31)$$

donde $N_t = t/dt$, y $\hat{\Sigma}_n$ es el Hamiltoniano de la perturbación. Nótese que, mientras el signo del Hamiltoniano cambia, la perturbación permanece con el mismo signo. Esto se debe a que si bien uno tiene control sobre el sistema, por lo cual podemos revertir el signo del Hamiltoniano, no es posible realizar la misma operación sobre el ambiente. Por ende, el signo de la perturbación $\hat{\Sigma}_n$ no cambia al efectuar el procedimiento de reversión temporal.

En esta subsección vamos a analizar la dinámica decoherente de un sistema de dos niveles (TLS), cuyo estado inicial es el $|0\rangle$ y el efecto de la decoherencia será evaluado a través del eco de Loschmidt. Consideraremos $\hat{\Sigma}_n$ como un operador diagonal en la base de sitios que produce corrimientos estocásticos de las fases locales. En la figura 4.5(a), mostramos la probabilidad de supervivencia $\tilde{P}_{00}(t)$ y el eco de Loschmidt $M_{00}(t)$ en el régimen amortiguado del TLS, en función del tiempo de interacción con el ambiente, t . Sorprendentemente, en el régimen amortiguado, M_{00} no es una simple exponencial sino que presenta “plateaus” siempre que la reversión comienza cuando el sistema está en

¹ Nosotros comprobamos que, usando distribuciones de probabilidad P_{β_0} de forma Gaussiana y binaria, las fluctuaciones y así también su influencia en la precisión del promedio en ensamble persisten. Sin embargo, esto no representa una limitación si uno está lejos de los valores asintóticos o cuando se abordan observables globales.

los estados $|0\rangle$ ó $|1\rangle$. Por el contrario, M_{00} sufre un decaimiento máximo si la reversión empieza en un estado superposición $[|0\rangle \pm |1\rangle]/\sqrt{2}$. Este fenómeno puede ser entendido recurriendo al siguiente esquema:

estado del TLS	0	s	1	s	0	s	1	s
efecto de la decoherencia	d	f	d	f	d	f	d	f
decaimiento de M_{00}	l		r		l		r	

tiempo de evolución (tiempo de interacción con el ambiente) \rightarrow

La partícula en el TLS alterna entre los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ pasando por estados de superposición, etiquetados como s . El impacto de la decoherencia sobre el sistema puede ser fuerte (f) o débil (d), según el estado en que se encuentre. En efecto, durante la oscilación de Rabi, cuando la densidad se ubica en uno de los sitios, digamos el $|1\rangle$, las interacciones decoherentes modifican al estado del sistema $c_1(t)|1\rangle$ de modo que se produce un corrimiento en la fase, $e^{i\beta_1}c_1(t)|1\rangle$, donde $c_1(t)$ es un coeficiente. Así, cuando la probabilidad de supervivencia es máxima en cualquiera de los estados $|0\rangle$ ó $|1\rangle$ el efecto del ambiente es débil, ya que los procesos decoherentes actúan como un cambio en la fase global, lo cual no destruye las correlaciones de fase entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$. No obstante, para los estados de superposición, la fase relativa entre los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ se ve modificada, y por consiguiente, el efecto de la decoherencia es fuerte. Note que esto ocurre porque la decoherencia actúa en la base local o de sitios. De este modo, si se comienza la reversión temporal cuando el sistema está en un estado de superposición s en un tiempo de evolución t , el eco de Loschmidt M_{00} presentará un rápido decaimiento (r), que se mostrará cuando el sistema, en un tiempo $2t$, se encuentre aproximadamente en el estado $|1\rangle = \tilde{P}_{00}(2t)$. Sin embargo, el decaimiento del eco de Loschmidt M_{00} será lento (l) si la reversión temporal comienza en $|0\rangle$ o en $|1\rangle$, lo cual se muestra en la figura 4.5 como *plateaus* sobre los máximos de la probabilidad de supervivencia en el estado $|0\rangle$.

En la figura 4.5(a), el decaimiento exponencial homogéneo de la probabilidad de supervivencia no discrimina por el estado inicial mientras que el LE lo hace. En cualquier caso, si uno define una tasa general de decaimiento para el LE $\gamma_{\phi LE} \equiv 1/\tau_{\phi LE}$, esta coincidiría con la observada en el decaimiento de la oscilación, es decir, $\gamma_{\phi LE} \simeq \Gamma_{\phi}/\hbar = 1/2(\tau_{SE})^{-1}$. Luego, el LE da una razón fundamental para este factor 1/2: los procesos decoherentes son efectivos durante la mitad del ciclo dinámico, es decir, cuando el sistema se encuentra en un estado de superposición.

El régimen sobreamortiguado se muestra en la figura 4.5(b) y en escala logarítmica en figura 4.5(c). Esta última aclara las tasas de decaimiento diferentes para la probabilidad de supervivencia $\tilde{P}_{00}(t)$ y el eco de Loschmidt $M_{00}(t)$ y las dificultades de obtener probabilidades de alrededor de 1/2 con un número limitado de realizaciones. El LE a tiempos cortos presenta un inicio con pendiente próxima a cero que es más ancho que en la probabilidad de supervivencia. Para el mismo intervalo de acción de los procesos decoherentes, la señal del LE es mayor que la probabilidad de supervivencia. Este hecho es consistente con que, a los efectos de que los procesos decoherentes sean efectivos, la dinámica primero debe formar un estado de superposición. Es decir, como vimos antes en el caso amortiguado, los procesos de interacción con el ambiente son particularmente

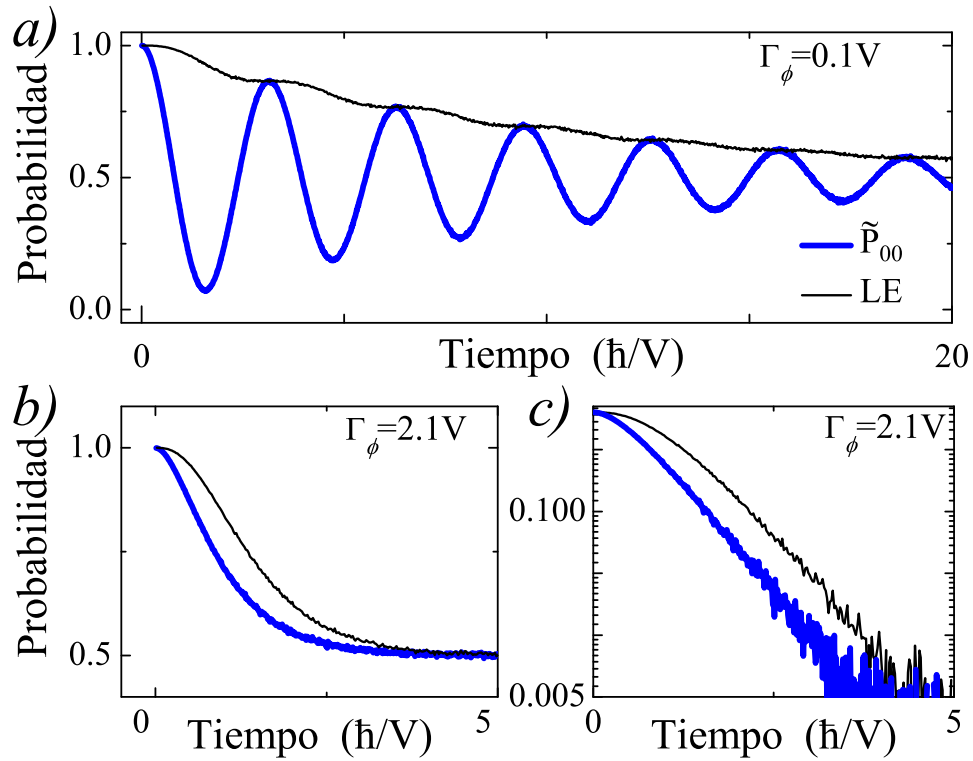


Figura 4.5: Probabilidad de supervivencia de una partícula en el estado inicial $|0\rangle$ del sistema de dos niveles (TLS) (línea azul gruesa) y el eco de Loschmidt (línea negra delgada) en función del tiempo de acción del ambiente para: (a) $\Gamma_\phi/V = 0,1$ y (b) $\Gamma_\phi/V = 2,1$, promediado sobre $N_S = 10000$ realizaciones. (c): Idem a (b) pero en escala logarítmica. La tasa de decaimiento del LE, $1/\tau_{SE} = 1,12V/\hbar$, es más pequeño que la mínima tasa de decaimiento de la \tilde{P}_{00} , $1/\tau_2 = 1,46V/\hbar$.

eficientes para degradar la coherencia cuando el sistema se halla en un estado superposición de los estados locales. Sin embargo, a tiempos cortos el estado de superposición no ha logrado formarse, y por tanto, el eco de Loschmidt es capaz de revertir casi toda la dinámica del TLS.

La tasa de decaimiento del LE no puede ser ajustada con la ecuación 4.30. Al usar una única exponencial, la tasa de decaimiento es $1/\tau_{\phi LE} = 1,12V/\hbar$, que es levemente más pequeña que la menor de las tasas de \tilde{P}_{00} , es decir $\gamma_2 = \Gamma_\phi - \sqrt{\Gamma_\phi^2 - (\hbar\omega_o)^2} = 1,46V$. Esto indica que el LE da un mayor peso a los procesos de tiempo corto menos correlacionados donde la interacción fuerte con el ambiente no nos permite crear las correlaciones y por ello, debería haber un decaimiento menor.

4.4.4. Saltos cuánticos y corrimientos cuánticos en una dinámica de muchos espines

El modelo de saltos cuánticos (QJ, *quantum jumps*), ha sido usado exitosamente en óptica cuántica para representar las trayectorias cuánticas individuales de sistemas capaces de realizar procesos de emisión espontánea. [DCM92, MCD93, TM92, CSVR89, Car93] Un ejemplo típico consiste en un átomo con dos niveles relevantes, $|0\rangle$ y $|1\rangle$, irradiado por un LASER, de modo que su dinámica cuántica coherente corresponde a las oscilaciones de Rabi. Simultáneamente, el sistema se encuentra acoplado a los modos del vacío del campo electromagnético por lo que puede emitir fotones. El QJ captura el proceso de emisión como un colapso en la función de onda ψ , cuya probabilidad de ocurrencia está caracterizada por una tasa Γ . Así, en un paso de evolución temporal dt , la probabilidad de sufrir un colapso de la función de onda en el estado $|1\rangle$ es $dp = |\alpha_1(t)|^2 \Gamma dt$, donde $|\alpha_1(t)|^2 = |\langle 1 | \psi(t) \rangle|^2$. En un esquema numérico, [DCM92] la aleatoriedad del proceso de emisión resulta equivalente al sorteo de un número aleatorio, δ , tal que si $\delta \geq dp$ entonces el sistema evoluciona coherentemente, es decir $\psi(t + dt) = U(dt)\psi(t)$. Sin embargo, si $\delta < dp$, se produce la emisión, y consecuentemente la medición, del fotón ocasionando el colapso de la función de onda al estado fundamental, $\psi(t + dt) = |0\rangle$. Debido a la naturaleza incoherente de los procesos de emisión, al realizar un promedio sobre un ensamble de realizaciones del QJ se obtiene una dinámica decoherente.

En esta sección vamos a abordar las diferencias entre los modelos QD y QJ, en una situación de relevancia experimental donde el formalismo de la matriz densidad es claramente restrictivo: se trata de la dinámica de muchos espines. Vamos a abordar el problema de la dinámica decoherente que no es trivial en términos de la matriz densidad. En particular, estamos interesados en la dinámica de una excitación de espín local en un sistema de M espines $1/2$ interactuantes. Digamos que el estado inicial a $t = 0$ está dado por la matriz densidad

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2^M}(\hat{\mathbf{I}} + 2\hat{S}_1^z), \quad (4.32)$$

que describe que el espín 1 está polarizado hacia arriba. A temperaturas muy altas, los otros espines no están polarizados, es decir $tr[\hat{S}_1^z \hat{\rho}_0] = \frac{1}{2}$ y $tr[\hat{S}_i^z \hat{\rho}_0] = 0 \forall i \neq 1$. A los

efectos de ser más específicos, consideremos el caso particular de una cadena lineal con $M = 5$. Este problema fue abordado teóricamente y experimentalmente usando técnicas de resonancia magnética nuclear, pero aún faltan cálculos que representen la dinámica decoherente. [MBSH⁺97, PUL96, PLU95]

En el caso de la cadena lineal de 5 espines, el Hamiltoniano efectivo se reduce a interacciones planares (o XY) a primeros vecinos. Usando los operadores de espín \hat{S}_i^- y \hat{S}_i^+ , este resulta:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{cad.}} = & \sum_{i=1}^{M-1} J_{i,i+1} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_{i+1}^+ \hat{S}_i^-) \\ & + \sum_{i=1}^M \hbar \Omega_i (\hat{S}_i^+ \hat{S}_i^- - \frac{1}{2}). \end{aligned} \quad (4.33)$$

El primer término es el Hamiltoniano XY, que da cuenta de los acoples a primeros vecinos. Tomaremos $J_{i,i+1} = J$ como la unidad de energía. El segundo, es el Hamiltoniano Zeeman, donde las frecuencias de precesión son $\Omega_i = \omega_0$, y ω_0 es la frecuencia de Larmor en el campo magnético externo. En una dinámica coherente, se observa que una excitación local $\hat{\rho}_0$ se propaga como una onda de espín a través de la cadena molecular y regresa al sitio inicial en la forma de un eco mesoscópico (ME). Este es precisamente el comportamiento de paquete de ondas que hace a este tipo de sistemas prometedores para usarse como canales cuánticos. [CRC07, Bos03, CDEL04, ZASO11] Sin embargo, los experimentos [MBSH⁺97] muestran que estas ondas de espín experimentan decoherencia y se atenúan mientras el tiempo transcurre. Aquí consideraremos que cada espín es perturbado por un ambiente local que actúa como un campo Zeeman fluctuante. Luego, $\Omega_i = \omega_0 + \delta\omega_i$, donde $\delta\omega_i$ fluctúa en el tiempo.

Vamos a resolver este problema al recurrir a la transformación de Jordan-Wigner [DPL02] que en este caso se muestra como $\hat{S}_i^+ \longleftrightarrow \hat{c}_i^\dagger$, $\hat{S}_i^- \longleftrightarrow \hat{c}_i$ y $\hat{S}_i^z \longleftrightarrow \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - 1/2$. Luego, este sistema de muchos espines puede ser reducido a un problema de un cuerpo. La transformación se mantiene con validez si consideramos las fluctuaciones aleatorias en el campo Zeeman. Es claro que estas producen perturbaciones en la energía local $\hbar\delta\omega_i$ que se muestran como decoherencia en la dinámica de los espines. Note que las fluctuaciones son naturalmente descritas dentro de la prescripción del QD y, a la inversa, las fases aleatorias del QD tienen un significado físico directo en este problema.

En las figuras 4.6(a) y 4.6(b) comparamos las evoluciones coherente y decoherente de la onda de espín. La excitación local viaja del sitio 1 hacia el borde de la cadena, donde es reflejado y regresa al espín inicial como un eco mesoscópico. Usamos un tiempo de decoherencia de $3\hbar/J$, consistente con la observación experimental. [MBSH⁺97] En las figuras 4.6(c) y 4.6(d) mostramos la densidad local para una única realización, para ambos métodos, el QD y el QJ. El método QD presenta un perfil más suave mientras que en el QJ la evolución se asemeja a la coherente hasta que se produce el salto.

En problemas similares, la ecuación maestra para la matriz densidad podría ser usada para obtener la dinámica decoherente. [ŽH13] Sin embargo, con respecto a los cálculos

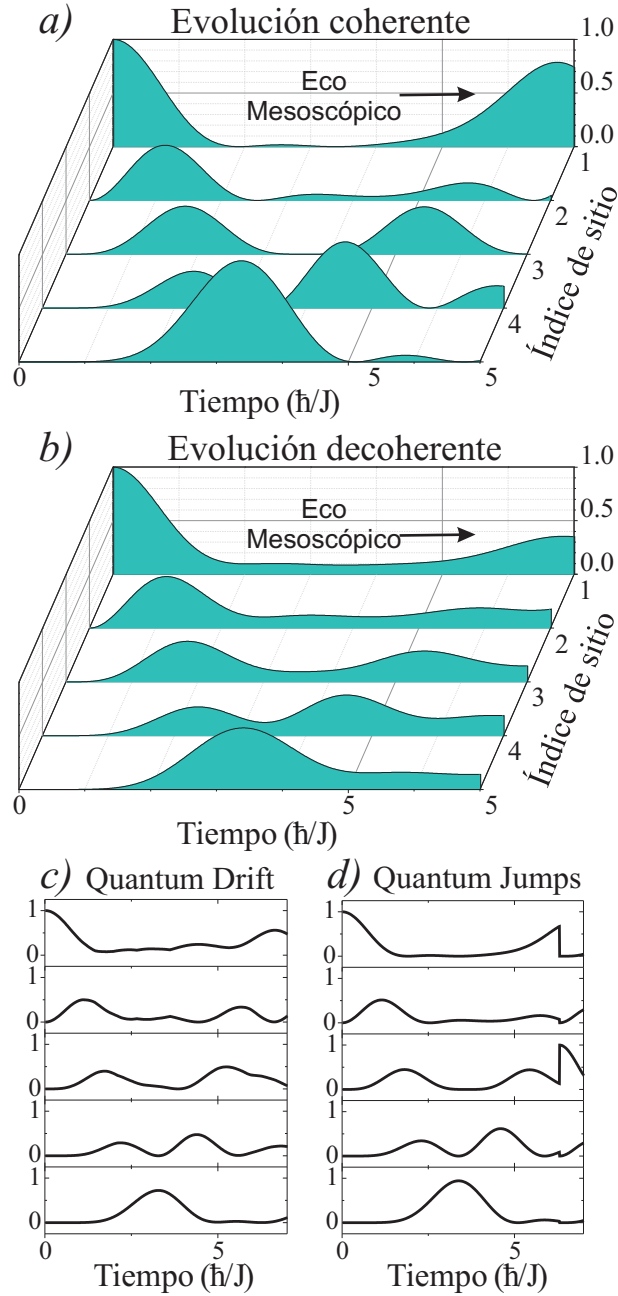


Figura 4.6: Densidad de probabilidad de la excitación en cada espín de una cadena lineal de 5 sitios en función del tiempo para (a) la evolución coherente, (b) una evolución promedio con un tiempo de coherencia finito $T_{coh} = 3\hbar/J$, (c) una única realización del modelo QD, y (d) una única realización del modelo QJ. Cuando la onda de espín alcanza el borde de la cadena se refleja constituyendo el eco mesoscópico. Note que las curvas para el QD son continuas mientras que las que corresponden al QJ presentan un salto abrupto en la densidad.

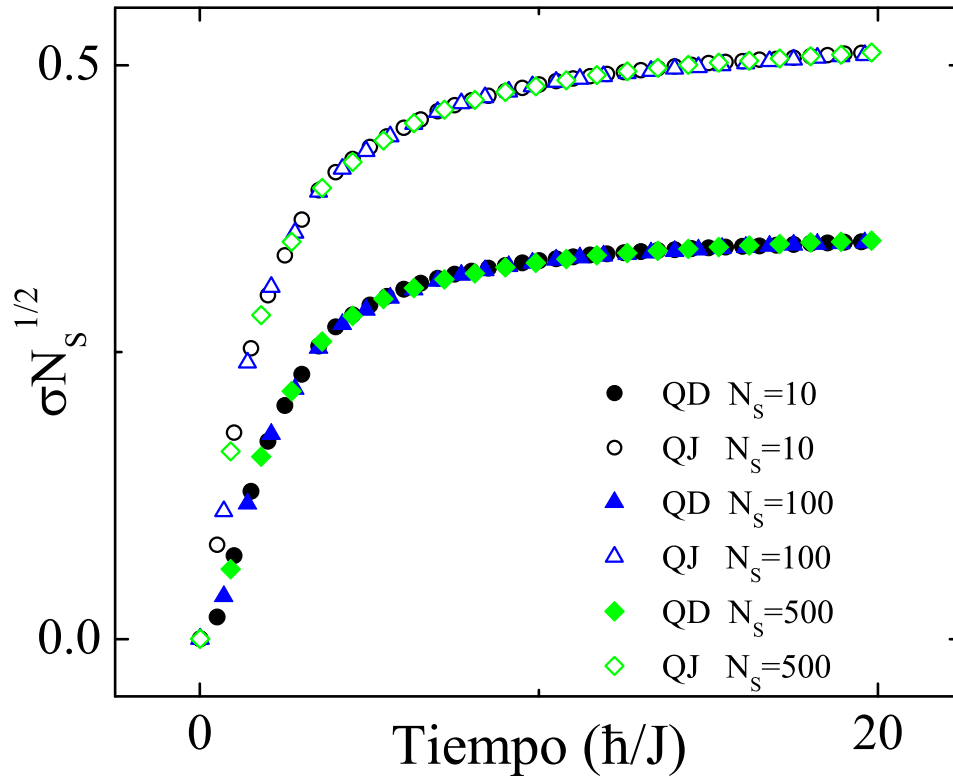


Figura 4.7: El error estándar σ por $\sqrt{N_s}$ como función del tiempo de evolución, para $N_s = 10, 100$, y 500 . Note que $\sigma N_s^{1/2}$ no depende de N_s sino del método QD o QJ. Para un mismo N_s , $\sigma^{QJ}/\sigma^{QD} \approx 2$.

numéricos, ésta resulta muy demandante. El método QJ, basado en una función de ondas estocástica, ya ha probado ser más conveniente para abordar sistemas grandes, lo cual puede ser visto en la referencia [BHP97]. En efecto, a partir de cierto tamaño del sistema es más rápido y menos demandante realizar un promedio sobre muchas realizaciones de un modelo QJ que calcular la matriz densidad completa. Ya que nuestro método QD también se basa en una función de ondas estocástica, para sistemas suficientemente grandes el método QD se volverá más conveniente que la matriz densidad. Luego, debemos comparar el desempeño del QD con el del QJ.

Observaremos la convergencia a una dinámica decoherente promedio para ambos métodos, el QD y el QJ. Debido a la naturaleza discontinua del QJ, esperamos que la diferencia con la dinámica promedio sea mayor para el QJ que para el QD (ver figuras 4.6(c) y 4.6(d)). Esto puede ser cuantificado en términos del promedio en el tiempo del error estándar,

$$\sigma^{(QD,QJ)} = \sqrt{\frac{1}{N_s T} \int_0^T dt \sum_{i=1}^{N_s} \left(\rho_{i,i}^{(QD,QJ)}(t) - \bar{\rho}_{i,i}(t) \right)^2}. \quad (4.34)$$

Aquí, T es el tiempo de evolución y $\bar{\rho}_{ii}(t) = \overline{|i\rangle\langle i|}$ es la densidad media al tiempo t

en el sitio i obtenida de un promedio sobre $N_s = 10^5$ realizaciones, donde tanto el QJ como el QD convergen a la misma dinámica promedio con error despreciable. En la figura 4.7 mostramos la cantidad $\sigma N_s^{1/2}$ para diferentes valores de N_s en función del tiempo de evolución T . Luego, este resultado evidencia la tendencia general del método QD a presentar una desviación de la media menor que el QJ. En efecto, para cada N_s , el σ^{QJ} es mayor que el σ^{QD} por un factor de casi 2. Luego, para converger con un dado σ , el QD necesita realizar aproximadamente la mitad de las realizaciones que el QJ.

4.5. Conclusión

Desarrollamos e implementamos un modelo estocástico para incluir procesos decoherentes en la dinámica cuántica. Inspirados en la descripción de Büttiker, y D’Amato y Pastawski del transporte decoherente de estado estacionario, extrapolamos sus bases a una función de onda que experimenta corrimientos estocásticos suaves en una base local. Por esto, lo denominamos modelo de “corrimientos cuánticos” (QD, por *quantum drift*)

A diferencia del método de los saltos cuánticos (QJ), no ocurren colapsos de la función de onda y los corrimientos de fases son introducidos en una dinámica unitaria. Luego, en el QD, los saltos solo pueden aparecer en las funciones correlación, no en la densidad local. Al poseer un significado físico claro, el método QD presenta un marco conceptual atractivo y particularmente adaptable para hacer frente a sistemas extendidos. Además, admite posteriores extensiones que van desde la evaluación de corrientes en esquemas de transporte hasta la representación de interacciones específicas de muchos cuerpos.

Usando cálculos numéricos, demostramos que los resultados del método dinámico QD se encuentran en completo acuerdo con las conductancias de estado estacionario a través de un modelo de dispositivo resonante de doble barrera con decoherencia, aún cuando se recurre a un promedio en ensamble bastante acotado. Para el transporte de estado estacionario en sistemas extendidos, una evaluación de la función de onda del QD es, por construcción, más eficiente que la matriz densidad. [BHP97]

En sistemas de espines, los fundamentos físicos del modelo QD se vuelven evidentes. La decoherencia asociada a la fluctuación de la energía local es un ingrediente natural asociado con las fluctuaciones rápidas de campos Zeeman locales. Luego, verificamos el modelo aplicándolo a dos sistemas espines en presencia de decoherencia. El primero es un sistema de dos niveles que oscila entre $|0\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle$ y $|1\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\rangle$, el cual tiene la particularidad de mostrar una transición de fase en la dinámica cuántica. Esta transición fue observada en experimentos de NMR y obtenida a partir de la solución de las ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker. [ADLP07, DALP07] No sólo recuperamos el decaimiento exponencial de las oscilaciones a bajas tasas de interacción con el ambiente, sino también la bifurcación no-analítica de las tasas de decoherencia a un valor crítico de la intensidad de interacción. Evaluamos la dinámica decoherente de un sistema de cinco espines, con conexión con experimentos de NMR. [MBSH⁺97]. Al usar tasas de decaimiento consistentes con el experimento, mostramos que el eco mesoscópico es robusto ante decoherencia. También mostramos que, para un dado error de tolerancia de los

observables, el método QD demanda alrededor de la mitad de realizaciones que el QJ.

Al evaluar la decoherencia del sistema de dos niveles a través del eco de Loschmidt, encontramos que los estados puros $|0\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle$ y $|1\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\rangle$ son bastante robustos ante perturbaciones locales del ambiente. En contraste, el eco de Loschmidt, y por ende la coherencia, decae más rápido cuando el sistema está en un estado de superposición $(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$. Estos resultados están de acuerdo con la tendencia general recientemente observada con NMR en sistemas de espines. [SAL⁺14]

En resumen, se propone un método, QD, que provee una dinámica unitaria estocástica de la función de onda. La evaluación de los observables usando métodos como el QD y el QJ son naturalmente paralelizables, por lo que resultan más escaleables que los métodos basados en la matriz densidad, [BHP97] sin embargo, el QD requiere menos realizaciones que el QJ para converger. Estas características, que se suman al significado físico intrínseco, harían al método QD una herramienta adecuada para abordar la dinámica de observables tanto en sistemas extendidos de una partícula como en sistemas de muchos cuerpos.

Capítulo 5

Decoherencia en fuerzas inducidas por corrientes: aplicación a motores cuánticos adiabáticos

5.1. Introducción

Los dispositivos nanoelectromecánicos en general, y los nanomotores en particular, han atraído mucha atención en los últimos años. [MS09, KRP⁺11] El principio de funcionamiento de la mayoría de las propuestas se basan en física clásica. Sin embargo, en la nanoescala uno puede beneficiarse de los efectos cuánticos que emergen de las interferencias cuánticas. En esta dirección, el bombeo cuántico inverso fue recientemente propuesto como el mecanismo básico por el que una corriente DC es capaz de inducir fuerzas que pueden movilizar un motor nanoscópico. Tal dispositivo se conoce como “motor cuántico adiabático” (AQM por sus siglas en inglés). [BMRvO13, BAL08, DMT09, QZ09] A pesar de la descripción clásica del movimiento del motor, es posible sacar provecho de la naturaleza cuántica de las fuerzas inducidas por corrientes. En efecto, la eficiencia del AQM puede incrementarse al explotar las interferencias presentes en el bombeo cuántico de Thouless. [BMRvO13]

Muchas preguntas surgen de manera natural al abordar el problema de las fuerzas inducidas por corrientes en dispositivos nanomecánicos. Por ejemplo, es interesante evaluar si su comportamiento cuántico sobrevivirá ante situaciones no ideales. En particular, nos preguntamos acerca de cuál es el efecto de la decoherencia inducida por un ambiente, tal como un baño de fonones, y cómo introducirla en la descripción del problema. ¿Será siempre contraproducente el efecto de la decoherencia para el desempeño de un AQM? Resolver estas preguntas ayudaría a proveer un mejor entendimiento de sus principios de funcionamiento y maneras de evaluar la factibilidad de las implementaciones experimentales.

En este capítulo extendemos la teoría de fuerzas inducidas por corrientes [BKEvO12, TKVK⁺12] para incluir eventos decoherentes. Nuestro punto de partida es el modelo

D'Amato-Pastawski [B86b, DP90, Pas92], el cual tiene que ser reformulado para considerar el movimiento de los parámetros del Hamiltoniano que se asocian a las piezas móviles. Esto nos permite evaluar los efectos de la decoherencia en fuerzas inducidas por corrientes fuera del equilibrio, en coeficientes de fricción debido a los electrones, y en las fuerzas fluctuantes pero enfocándonos en AQMs.

5.2. Fuerzas inducidas por corrientes

Un motor puede entenderse como una pieza que presenta un movimiento cíclico y que es inducido por corrientes eléctricas. La rotación puede corresponder al movimiento de una pieza mecánica [BMRvO13] o de algún otro grado de libertad. [AvO15]

Se ha propuesto un mecanismo basado en la mecánica cuántica que podría hacer funcionar a estos motores, el bombeo cuántico inverso. Mientras en el bombeo cuántico la variación de un parámetro x produce una corriente DC,¹ en estos motores, una corriente DC es capaz de ejercer una fuerza sobre esa coordenada x , que estaría asociada a grados de libertad rotacionales.

El origen de las fuerzas inducidas por corrientes es la retrodispersión de los electrones (*electron backscattering*). Cuando los electrones se reflejan debido al potencial generado por el rotor, le entregan su momento y lo aceleran. Estas fuerzas inducidas por corrientes (CIFs, por *current induced forces*) son de naturaleza cuántica. En las referencias [BKEvO12, TKVK⁺12] se dan expresiones prácticas para las CIFs basadas en matrices de dispersión, y conforman nuestro punto de partida.

En una aproximación de Born-Oppenheimer fuera del equilibrio, los grados de libertad dinámicos de un sistema son lentos comparados con la dinámica del electrón.² En este límite adiabático, podemos tratar los grados de libertad mecánicos como un campo clásico actuando sobre los electrones. Es decir, la presencia del rotor imprime un perfil de potencial sobre el sistema donde se desarrolla el transporte. Así, la rotación del motor cambia este perfil de potencial. Luego, ya que el movimiento de un motor es cíclico, sus grados de libertad pueden ser descritos por una única coordenada rotante, x . Entonces la dinámica del rotor puede describirse usando la ecuación de Langevin unidimensional,

$$M\ddot{x} + \frac{dU}{dx} = F - \gamma\dot{x} + \xi, \quad (5.1)$$

donde M es la masa del rotor (o el momento de inercia), y U es un potencial externo clásico que también puede ser considerado. El lado derecho de la ecuación 5.1 da cuenta de las fuerzas inducidas por corrientes. El primer término, F es una fuerza de reacción adiabática, independiente de la velocidad de rotación del motor. El segundo término es

¹Este parámetro controla al menos dos grados de libertad internos del sistema, ya que se garantiza que hay bombeo cuántico. En caso contrario, la variación periódica de un único parámetro no produciría bombeo. Un ejemplo trivial de esto sería considerar x como el tiempo.

²Con el término “adiabático” aquí no nos referimos a que el motor no intercambia calor con el ambiente sino al régimen del motor donde su dinámica es muy lenta frente a la dinámica de los electrones.

una fuerza de fricción (disipativa) donde γ es el coeficiente de fricción. El último término, ξ , corresponde a las fluctuaciones en la fuerza y satisface $\langle \xi(t) \rangle = 0$ y su autocorrelación D puede definirse como $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle \approx D\delta(t-t')$.

La fuerza generada por la corriente de electrones viene dada por [BKEvO12]

$$F(x) = \sum_i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} f_i \text{Tr} \left(\Pi_i S^\dagger \frac{dS}{dx} \right), \quad (5.2)$$

donde f_i es la distribución de Fermi en el cable i y Π_i es un proyector sobre los canales del cable i , donde al considerar un único canal por cada cable, $(\Pi_i)_{pq} = \delta_{ip}\delta_{iq}$. Aquí hemos introducido la matriz de dispersión (*scattering*) S , que puede ser definida en términos de la función de Green retardada, [Dat95] (ver el apéndice C)

$$S_{pq} = -\delta_{pq} + 2i\sqrt{\Gamma_p\Gamma_q}G_{pq}^R, \quad (5.3)$$

donde

$$G^R = (\varepsilon I - i\eta I - H)^{-1}, \quad (5.4)$$

y H es el Hamiltoniano del sistema, ε la energía de Fermi, I la identidad y η un corrimiento de energía infinitesimal al plano complejo que asegura condiciones de borde apropiadas para G^R . Note que los elementos diagonales S_{pp} corresponden a coeficientes de reflexión mientras que los no diagonales S_{pq} son coeficientes de transmisión, en la forma generalizada de la fórmula de Fisher-Lee [PM01, FL81], dada por la ecuación 1.17.

En un sistema fuera del equilibrio, consideramos que hay una diferencia de potencial infinitesimal entre los contactos $\delta\mu_L = \mu_L - \mu_R = eV$. Luego, podemos desdoblar la función de Fermi en dos contribuciones, $f_\alpha = f_0 + \Delta f_\alpha$, una de equilibrio y otra fuera de equilibrio. A su vez, la fuerza generada por la corriente eléctrica puede desdoblarse, acordemente, como $F = F^{eq} + \Delta F$. La fuerza de equilibrio

$$F^{eq}(x) = \sum_i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} f_0 \text{Tr} \left(\Pi_i S^\dagger \frac{dS}{dx} \right), \quad (5.5)$$

es conservativa, y por lo tanto no produce trabajo. Por otro lado, la contribución fuera del equilibrio

$$\Delta F = \sum_i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} \Delta f_i \text{Tr} \left(\Pi_i S^\dagger \frac{dS}{dx} \right). \quad (5.6)$$

es la responsable de producir un trabajo neto.

Al igual que en el movimiento Browniano, la interacción fluctuante de los electrones con el rotor origina una fuerza de reacción con escala temporal lenta, que hace que el rotor tienda al equilibrio térmico, es decir, corresponde a un mecanismo de disipación por fricción. Vamos a considerar las fuerzas hasta primer orden en eV y/o \dot{x} . Esto implica que sólo las contribuciones en el equilibrio del coeficiente de fricción y de D deben ser

tenidos en cuenta. En el equilibrio, la única contribución al coeficiente de fricción que no desaparece es la llamada “contribución simétrica” $\gamma^{s,eq}$, [TKVK⁺12, BKEvO12]

$$\gamma^{s,eq} = \frac{1}{4} \sum_{i,j} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_i + f_j) \text{Tr} \left\{ \Pi_i S^\dagger \frac{dS}{dx} \Pi_j S^\dagger \frac{dS}{dx} \right\}. \quad (5.7)$$

Por otro lado, las fluctuaciones de esa fuerza disipativa son tenidas en cuenta en la fuerza fluctuante $\xi(t)$, donde $\langle \xi(t) \rangle = 0$ y cuya autocorrelación D está definida como $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle \approx D\delta(t-t')$, es decir, se asume que es localmente correlacionada en el tiempo. Esto es razonable debido a que la escala de tiempo de los electrones es mucho menor que el período del rotor. La expresión para la autocorrelación es

$$D' = \sum_{i,j} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} f_i (1 - f_j) \text{Tr} \left\{ \Pi_i \left[S^\dagger \frac{dS}{dx} \right]^\dagger \Pi_j S^\dagger \frac{dS}{dx} \right\}. \quad (5.8)$$

Las cantidades $\gamma^{s,eq}$ y D están relacionadas por el teorema de fluctuación-disipación, es decir, satisfacen $D = 2k_B T \gamma^{s,eq}$, donde $k_B T$ es la energía térmica. La demostración puede verse en la ref. [BKEvO12].

5.3. Decoherencia en las fuerzas inducidas por corrientes.

Inicialmente, vamos a considerar un sistema al que sometemos a procesos decoherentes, los cuales estarán representados por un único voltímetro ficticio conectado al sistema, ϕ , tal como lo hace Büttiker. Este método fue usado por Brouwer y Büttiker cuando abordaron un problema bastante relacionado, el bombeo cuántico con decoherencia. [CB02, MB01] La condición del voltímetro impone $I_\phi = 0$, es decir la conservación de la carga, y por ende de la densidad electrónica. La cancelación de la corriente en ϕ es asegurada por un potencial químico apropiado, es decir, el voltaje medido $\delta\mu_\phi$, que asegura que los electrones que ingresan sean compensados por otros que vienen desde el voltímetro. La clave de este modelo de proceso decoherente es que el carácter de reservorio de los terminales de voltaje ocasiona la pérdida de memoria de fase de los electrones que son reinyectados al sistema. Estrictamente, esto también involucra eventos inelásticos que redistribuyen la energía de los electrones. Sin embargo, en respuesta lineal, $eV \rightarrow 0$, la inelasticidad se reduce sólo a un defasaje estocástico de la función de onda, es decir, decoherencia. [FAP15]

5.3.1. Conservación de la carga y potencial químico autoconsistente

La corriente total fluyendo a través de un cable i es

$$I_i = I_i^{Bias} + I_i^{Pump} + \delta I_i, \quad (5.9)$$

donde I_i^{Bias} es la corriente fuera del equilibrio causada por una diferencia de potencial infinitesimal eV , I_i^{Pump} es la corriente bombeada debido a una variación de la coordenada x , y δI_i representa las fluctuaciones en la corriente. Mientras en ciertas descripciones las fluctuaciones pueden ser ignoradas dado que su media es nula, aquí necesitamos considerarlas explícitamente. Éstas no solo afectan la dinámica del sistema sino que además son cruciales para la validez del teorema de fluctuación-disipación, como veremos posteriormente.

La corriente fuera del equilibrio que entra al sistema a través del cable $i = L, \phi$, en un límite de respuesta lineal y a bajas temperaturas, es

$$I_i^{Bias} = \frac{e}{2\pi\hbar} \left(\sum_{j \neq i} T_{ji} \delta\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij} \delta\mu_j \right). \quad (5.10)$$

Aquí, T_{ji} es la transmitancia entre los cables i y $j = L, R, \phi$; y $\delta\mu_i = \mu_i - \mu_R$ es el potencial químico de i , tomando μ_R como referencia.

La corriente bombeada I_i^{Pump} a través de un cable i es

$$I_i^{Pump} = e \frac{dn_i}{dx} \dot{x}, \quad (5.11)$$

donde e es la carga del electrón, \dot{x} la velocidad del parámetro rotacional x , y la emisividad del cable i es

$$\frac{dn_i}{dx} = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} \left(-\frac{\partial f_i}{\partial \varepsilon} \right) \text{Tr} \left\{ \Pi_i S^\dagger \frac{dS}{dx} \right\}. \quad (5.12)$$

La emisividad representa el cambio en la densidad de estados debido a una variación de los parámetros del sistema.

Las fluctuaciones en la corriente contienen tanto el *shot-noise* fuera del equilibrio como el ruido térmico. Ambos satisfacen $\langle \delta I_i \rangle = 0$, y $\sum_i \delta I_i = 0$. Sin embargo, en el equilibrio, el *shot-noise* desaparece y sólo sobrevive el ruido térmico.[BB00]

Como mencionamos antes, todos los procesos decoherentes ϕ conservan la carga dentro de la muestra, lo cual se logra al imponer la condición $I_\phi = 0$. Esto impone directamente una condición a $\delta\mu_\phi$, de forma tal que el único valor de $\delta\mu_\phi$ que posibilita la cancelación de la corriente de la ecuación 5.9 es

$$\delta\mu_\phi = \frac{1}{T_{\phi L} + T_{\phi R}} \left(T_{L\phi} \delta\mu_L - 2\pi\hbar \frac{dn_\phi}{dx} \dot{x} - \frac{2\pi\hbar}{e} \delta I_\phi \right). \quad (5.13)$$

Ya que la variación de x es lenta respecto de la dinámica electrónica, podemos considerar que $\delta\mu_\phi$ se adapta instantáneamente para satisfacer $I_\phi = 0$ en cada instante.

Mediante la integración de I_L^{Pump} obtenemos la carga bombeada por ciclo a través del cable L ,

$$Q_L = e \oint \left[\frac{dn_L}{dx} + \frac{T_{L\phi}}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \frac{dn_\phi}{dx} \right] dx. \quad (5.14)$$

Este resultado ha sido obtenido previamente en las referencias [Bro98, CB02, MB01] en el contexto del problema de bombeo cuántico y es válido a bajas temperaturas. La

primera contribución representa la carga bombeada que sale del sistema a través de los reservorios L y R sin interactuar con ϕ , mientras que el segundo término representa las cargas bombeadas que han sufrido un proceso decoherente en ϕ . Uno puede verificar que en el límite en que el sistema se desacopla del voltímetro, el segundo término desaparece y a su vez el primero tiende al valor que se obtiene en ausencia de decoherencia.[CB02]

5.3.2. Fuerzas inducidas por decoherencia y teorema de fluctuación-disipación

Al considerar una diferencia de potencial infinitesimal, $\delta\mu_L = eV$, la función de Fermi se desdobra, $f_i = f_0 + \Delta f_i$. A bajas temperaturas, se cumple que $\int(\cdot)\Delta f_i d\varepsilon \simeq (\cdot)\delta\mu_i$. Usando la ecuación 5.13, las fuerzas no conservativas ΔF a primer orden en eV y \dot{x} toman la forma

$$\begin{aligned} \Delta F = & \left[\frac{dn_L}{dx} + \frac{T_{L\phi}}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \frac{dn_\phi}{dx} \right] eV \\ & - 2\pi\hbar \frac{\dot{x}}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \left(\frac{dn_\phi}{dx} \right)^2 \\ & + \frac{2\pi\hbar}{e} \frac{\delta I_\phi}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \frac{dn_\phi}{dx}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

El primer término en el lado derecho de la ecuación 5.15 es una fuerza media fuera del equilibrio, F^{ne} , cuyo segundo término dentro del paréntesis cuadrado se identifica con la contribución de los procesos decoherentes. Esta fuerza es responsable del trabajo que el sistema realiza, que es obtenido al evaluar $W = \oint (F^{eq} + F^{ne}) dx$, y resulta en

$$W = \oint dx \left[\frac{dn_L}{dx} + \frac{T_{L\phi}}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \frac{dn_\phi}{dx} \right] eV. \quad (5.16)$$

Comparando las ecs. 5.16 y 5.14 nos damos cuenta que el trabajo es proporcional al producto de la carga bombeada por ciclo y la diferencia de potencial,

$$W = Q_L V. \quad (5.17)$$

Esta relación puede ser vista como una forma de las relaciones de reciprocidad de Onsager, [Coh03] lo que muestra que el modelo es bien comportado. Además, ya se ha demostrado que esta relación es válida para motores cuánticos coherentes. En nuestro caso, el resultado de la ecuación 5.17 es aún más valioso ya que estamos considerando la presencia de procesos decoherentes.

El segundo término del lado derecho de la expresión 5.15 es una fuerza proporcional a la velocidad. Luego, es inmediato asociarlo con una fuerza disipativa donde queda en evidencia que su origen es debido puramente a los procesos decoherentes. El coeficiente de fricción resultante es

$$\gamma^\phi = \frac{2\pi\hbar}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \left(\frac{dn_\phi}{dx} \right)^2. \quad (5.18)$$

Esto prueba que la decoherencia habilita un nuevo mecanismo para la disipación de la energía a través de una fricción adicional con los electrones.

El tercer término del lado derecho de la ecuación 5.15 da cuenta de las fluctuaciones en la fuerza inducida por decoherencia. La autocorrelación de esta nueva fuerza fluctuante ξ_ϕ puede ser definida como $\langle \xi_\phi(t)\xi_\phi(t') \rangle \approx D_\phi \delta(t - t')$. Luego,

$$D_\phi = \left(\frac{2\pi\hbar}{e} \frac{1}{T_{L\phi} + T_{\phi R}} \frac{dn_\phi}{dx} \right)^2 S_\phi, \quad (5.19)$$

donde S_ϕ , el espectro de potencias de la corriente fluctuante en ϕ , se define como $\langle \delta I_\phi(t) I_\phi(t') \rangle \approx S_\phi \delta(t - t')$. Al deducir la ecuación 5.19, hemos usado que las transmitancias y emisividades ya son valores medios. La única contribución a la fluctuación de la corriente que no desaparece en el equilibrio corresponde al ruido térmico o de Nyquist-Johnson. [BB00] S_ϕ está caracterizada por

$$S_\phi = 2K_B T \frac{e^2}{2\pi\hbar} (T_{L\phi} + T_{\phi R}). \quad (5.20)$$

Reemplazando la ecuación 5.20 en 5.19, nos queda

$$D_\phi = 2K_B T \gamma^\phi, \quad (5.21)$$

lo que demuestra que la fricción decoherente y la fluctuaciones en las fuerzas que son inducidas por decoherencia se relacionan a través del teorema de fluctuación-disipación. Esto provee un punto de control para nuestro modelo ya que cumple con las leyes de la termodinámica.

5.3.3. Eficiencia termodinámica del motor

La eficiencia termodinámica, η_{TD} , puede ser definida como la razón entre la potencia de salida útil que puede ser extraída del sistema y la potencia total entregada. La potencia de salida útil es el trabajo por cada ciclo del motor menos la energía perdida debido a fricción, todo dividido por el período τ , es decir, $QV/\tau - \int_0^\tau \gamma \dot{x}^2 dt/\tau$. La potencia de entrada total es $IV + QV/\tau$. Luego,

$$\eta_{TD} = \frac{Q - 4\pi^2 \gamma^* / (\tau V)}{\bar{g} (\tau V) + Q}. \quad (5.22)$$

Aquí, hemos introducido $I = \bar{g}V$, donde \bar{g} es la conductancia promedio, y el coeficiente de fricción corregido $\gamma^* = d^2 \bar{\gamma}$, donde $\bar{\gamma}$ es el coeficiente de fricción promedio $\bar{\gamma} = \oint \gamma \dot{x}^2 dt / \oint \dot{x}^2 dt$. La constante dinámica d esencialmente da cuenta de las desviaciones de \dot{x} respecto de su valor medio, $d = \tau / (2\pi) \sqrt{\langle \dot{x}^2 \rangle}$ donde $\langle \dot{x}^2 \rangle = \oint \dot{x}^2 dt / \tau$.

De la ecuación 5.22 se puede extraer la potencia mínima para tener una eficiencia distinta de cero, que igualmente es la mínima potencia necesaria para empezar el movimiento

del motor $QV > 4\pi^2\gamma^*/\tau$. Adicionalmente, uno puede darse cuenta de que hay un valor óptimo del período τ que maximiza la eficiencia,

$$\tau_0 = 4\pi^2 \frac{\gamma^*}{QV} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{Q^2}{4\pi^2\gamma^*\bar{g}}} \right). \quad (5.23)$$

Este valor puede ser usado para encontrar la carga máxima que puede tolerar el motor, o dada una carga, podemos averiguar el voltage óptimo a ser aplicado para maximizar la eficiencia. Sin embargo, estas consideraciones deben hacerse teniendo en cuenta los límites de adiabaticidad y bajo voltaje. Nótese que cuando la conductancia promedio va a cero, τ_0 va a infinito, lo que es consistente con el límite adiabático de la eficiencia en la propuesta de motor cuántico de la ref. [BMRvO13].

5.3.4. Límite de velocidad terminal constante, $d \approx 1$.

En el estado estacionario, toda la energía que es absorbida por el motor es completamente disipada por fricción, por lo que la energía total se conserva de acuerdo a

$$\int_0^{2\pi} \left[F(\theta) - F_{\text{load}} - \gamma\dot{\theta}(\theta) \right] d\theta = 0, \quad (5.24)$$

donde F_{load} da cuenta de una carga externa al sistema. Aquí asumimos un promedio sobre ensambles en el estado estacionario, por lo cual se pueden despreciar las fuerzas aleatorias y podemos usar $\dot{\theta}(t) = \dot{\theta}(t + \tau) = \dot{\theta}(\theta)$.

A partir de la ecuación 5.24 y usando las definiciones que dimos antes para $\bar{\gamma}$ y $\langle \dot{\theta}^2(t) \rangle$, obtenemos

$$\langle \dot{\theta}^2(t) \rangle = \frac{QV - W_{\text{load}}}{\bar{\gamma}}, \quad (5.25)$$

donde W_{load} es el trabajo hecho por las fuerzas externas en un ciclo. Usando este resultado, la energía cinética media se vuelve

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2}M \langle \dot{\theta}^2(t) \rangle = \frac{1}{2}M \frac{(QV - W_{\text{load}})}{\bar{\gamma}}, \quad (5.26)$$

donde M es el momento de inercia del rotor.

El cambio de la energía cinética debido a una rotación del parámetro θ es $\Delta K(\theta) = -\Delta U^*(\theta)$, donde $U^*(\theta) = -\int_0^\theta \left[F(\theta') - F_{\text{load}} - \gamma\dot{\theta}(\theta') \right] d\theta'$ es un pseudo-potencial definido sólo en el estado estacionario. Cuando la energía cinética del motor es mucho mayor que $\Delta U^*(\theta)$,

$$\frac{1}{2}M \frac{(QV - W_{\text{load}})}{\bar{\gamma}} \gg \Delta U^*(\theta), \quad (5.27)$$

luego $\Delta K(\theta)/\langle K \rangle \rightarrow 0$ y, por lo tanto, la velocidad rotacional del sistema se vuelve insensible a θ . Por esta razón, $\tau = \int_0^{2\pi} d\theta/\dot{\theta}(\theta) \approx 2\pi/\dot{\theta}$ y luego el factor dinámico $d =$

$$\frac{\tau}{2\pi} \sqrt{\langle \dot{\theta}^2(t) \rangle} \approx 1.$$

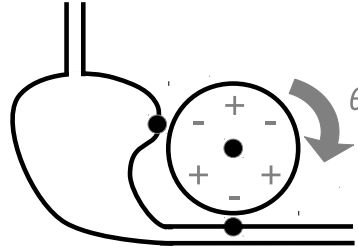


Figura 5.1: Esquema del tipo del sistema: un dispositivo que puede rotar y que interactúa con un punto cuántico. La rotación del motor cambia la energía del punto cuántico así como su acople con uno de los cables.

Nótese que la velocidad terminal es independiente de M . Luego, la condición dada en la ecuación 5.27 puede en principio ser alcanzada siempre sólo ajustando el momento de inercia del rotor.

5.4. Ejemplo: Motor cuántico adiabático basado en una bomba peristáltica

A modo de ilustrar nuestra teoría, consideraremos un ejemplo simple de un motor basado en un punto cuántico que, mientras el rotor gira cambia la energía del nivel resonante del punto, $E(\theta) = E_0 + \Delta E \cos(\theta + \theta_0)$, y el acople a uno de los reservorios, $V_R + \Delta V \sin(\theta)$. La coordenada angular es θ , donde $\theta_0 = \theta(t = 0)$. El acople al otro reservorio L y la interacción sistema-ambiente se asumen constantes. El *rate* de esta última, $2\Gamma_\phi/\hbar$, se asocia con el acople al voltímetro ficticio.

A lo largo de este problema hacemos algunas hipótesis, donde las principales son: (1) La aproximación de electrones no interactuantes es válida. (2) La interacción con los cables puede ser tomada en el límite de banda ancha (WBL). (3) La interacción entre el sistema y el rotor es perturbativa, es decir, las variaciones de ΔE y ΔV son pequeñas respecto a Γ_0 , el ancho de la resonancia del sistema sin decoherencia a $\theta = 0$, es decir el ensanchamiento debido a los cables. (4) La velocidad terminal del rotor en el régimen estacionario es aproximadamente constante, por ende $d \approx 1$.

El Hamiltoniano efectivo del sistema completo, es decir, el punto cuántico y los cables, es

$$H(\theta) = E(\theta) + \Sigma_L + \Sigma_R(\theta) + \Sigma_\phi, \quad (5.28)$$

donde Σ_i es la *self-energy* del cable $i = L, R, \phi$. Vamos a considerar a los cables como conductores unidimensionales en el límite de banda ancha (WBL), es decir, las *self-energies*

Σ_i son cantidades imaginarias puras y son independientes de la energía de Fermi ε . Luego,

$$\begin{aligned}\Sigma_L &= -i\Gamma_L, \\ \Sigma_\phi &= -i\Gamma_\phi, \\ \Sigma_R(\theta) &= -i\Gamma_R(\theta) = -i(V_R + \Delta V \sin(\theta))^2/V,\end{aligned}\tag{5.29}$$

donde $4V$ es el ancho de banda del cable.³ Aquí, las cantidades Γ_L y Γ_ϕ son constantes ya que el acople a sus correspondientes cables se asumen independientes de θ . En este punto, podemos obtener las funciones de Green retardadas definidas como $G_0 = (\varepsilon - H(\theta))^{-1}$. Así,

$$G_0 = \frac{1}{\varepsilon - (E(\theta) - i\Gamma_L - i\Gamma_R(\theta) - i\Gamma_\phi)}.\tag{5.30}$$

Luego, las transmitancias $T_{i,j}$, que podemos encontrar en los observables desde la ecuación 5.14 hasta la 5.16, pueden ser evaluadas mediante la fórmula de Fisher-Lee

$$T_{i,j} = 2\Gamma_i |G_{i,j}|^2 2\Gamma_j\tag{5.31}$$

donde $i \neq j$, y $i, j = L, R, \phi$. En este ejemplo, $|G_{i,j}| = |G_0|$, para todo i, j . Además, podemos obtener la densidad local de estados (LDoS) como $N(\varepsilon, \theta) = -(1/\pi)Im(G_0)$:

$$N(\varepsilon, \theta) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\theta)}{(\varepsilon - E(\theta))^2 + \Gamma(\theta)^2},\tag{5.32}$$

donde $\Gamma(\theta) = \Gamma_L + \Gamma_\phi + \Gamma_R(\theta)$. Para obtener las fuerzas inducidas por corrientes, necesitamos la matriz de dispersión, que en este caso es

$$\mathbb{S} = -\mathbb{I} + 2iG_0 \begin{pmatrix} \Gamma_L & \sqrt{\Gamma_L \Gamma_R(\theta)} & \sqrt{\Gamma_L \Gamma_\phi} \\ \sqrt{\Gamma_L \Gamma_R(\theta)} & \Gamma_R(\theta) & \sqrt{\Gamma_R(\theta) \Gamma_\phi} \\ \sqrt{\Gamma_L \Gamma_\phi} & \sqrt{\Gamma_R(\theta) \Gamma_\phi} & \Gamma_\phi \end{pmatrix}.\tag{5.33}$$

Luego, la matriz $S^\dagger \frac{dS}{d\theta}$ queda

$$S^\dagger \frac{dS}{d\theta} = -2i |G_0|^2 \Lambda,\tag{5.34}$$

³En este ejemplo, hemos introducido los parámetros microscópicos del sistema, donde la magnitud V caracteriza al cable ya que $4V$ es el ancho de banda del mismo. No confundir con la magnitud V que representa la diferencia de potencial entre los cables L y R .

donde los elementos del operador Λ son

$$\begin{aligned}
\Lambda_{1,1} &= \Gamma_L \frac{dE(\theta)}{d\theta}, \\
\Lambda_{1,2} &= \sqrt{\Gamma_L \Gamma_R(\theta)} \frac{dE(\theta)}{d\theta} + \\
&\quad + \sqrt{\frac{\Gamma_L}{4\Gamma_R(\theta)}} (\varepsilon - E(\theta) + i\Gamma(\theta)) \frac{d\Gamma_R(\theta)}{d\theta}, \\
\Lambda_{1,3} &= \sqrt{\Gamma_L \Gamma_\phi} \frac{dE(\theta)}{d\theta}, \\
\Lambda_{2,2} &= \Gamma_R(\theta) \frac{dE(\theta)}{d\theta} + (\varepsilon - E(\theta)) \frac{d\Gamma_R(\theta)}{d\theta}, \\
\Lambda_{2,3} &= \sqrt{\Gamma_R(\theta) \Gamma_\phi} \frac{dE(\theta)}{d\theta} + \\
&\quad + \sqrt{\frac{\Gamma_\phi}{4\Gamma_R(\theta)}} (\varepsilon - E(\theta) + i\Gamma(\theta)) \frac{d\Gamma_R(\theta)}{d\theta}, \\
\Lambda_{3,3} &= \Gamma_\phi \frac{dE(\theta)}{d\theta},
\end{aligned}$$

donde se cumple $\Lambda_{i,j} = \Lambda_{j,i}^*$ y

$$\frac{d\Gamma_R}{d\theta} = 2(V_R + \Delta V_R(\theta)) \frac{d\Delta V_R}{d\theta}. \quad (5.35)$$

Aquí, $\Delta V_R(\theta) = \Delta V \sin(\theta)$. En este punto, podemos evaluar las cantidades físicas relevantes en este problema. Vamos a comenzar con las emisividades de la ecuación 5.12. A bajas temperaturas, podemos usar $\partial f_m / \partial \varepsilon = -f_m(1 - f_m) / K_B T \simeq -\delta(\varepsilon - \mu_m)$. Luego, tenemos

$$\frac{dn_\alpha}{d\theta} = \frac{1}{2\pi i} \text{Tr} \left\{ \Pi_\alpha S^\dagger \frac{dS}{d\theta} \right\} \quad (5.36)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \left(S^\dagger \frac{dS}{d\theta} \right)_{\alpha,\alpha}, \quad (5.37)$$

donde $\alpha = L, R, \phi$. Luego

$$\begin{aligned}
\frac{dn_{L(\phi)}}{d\theta} &= -\frac{N(\varepsilon, \theta)}{\Gamma(\theta)} \frac{dE(\theta)}{d\theta} \Gamma_{L(\phi)}, \\
\frac{dn_R}{d\theta} &= -\frac{1}{\pi} \frac{N(\varepsilon, \theta)}{\Gamma(\theta)} \left(\frac{dE(\theta)}{d\theta} \Gamma_R(\theta) + \frac{d\Gamma_R(\theta)}{d\theta} (\varepsilon - E(\theta)) \right).
\end{aligned}$$

Al usar estas expresiones en la ecuación 5.14 podemos obtener la carga bombeada por ciclo o el trabajo total, $W = QV$, que puede desdoblarse en una contribución coherente y otra decoherente $W = W^{coh} + W^{dec}$. La expresión matemática del primer término se mantiene con y sin decoherencia, mientras que la del segundo, es nula en un caso puramente coherente.

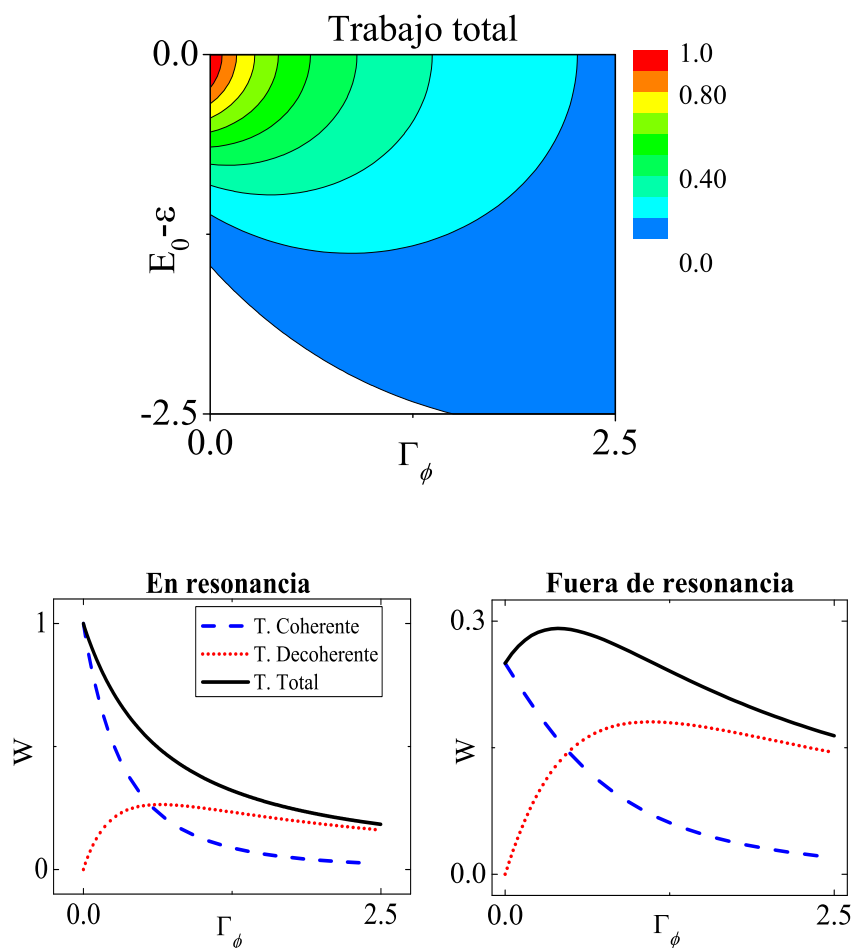


Figura 5.2: **Fig. superior-** Trabajo total del motor en función de $(E_0 - \varepsilon)$ y Γ_ϕ , ambos expresados en unidades de Γ_0 . El trabajo está normalizado por su máximo valor. **Figs. inferiores-** Trabajo del motor para las condiciones "en resonancia" y "fuera de resonancia", con $(E_0 - \varepsilon) = 0$ y -1 respectivamente. Las diferentes contribuciones se marcan en la leyenda. En todas las figuras, el trabajo está normalizado por el valor máximo del trabajo total 10^{-4} .

5.4.1. Trabajo por ciclo del motor

La expresión para el trabajo del motor de la ecuación 5.16 puede desdoblarse en dos contribuciones, la parte coherente y la incoherente. El comportamiento de W es similar a aquel descrito en la Ref. [MB01] para la carga bombeada decoherente. Al evaluar 5.16 a través del teorema de Green, [Bro98] obtenemos

$$W = -eV(\Omega_{coh} + \Omega_{dec})\Delta E\Delta V \cos(\theta_0), \quad (5.38)$$

donde

$$\Omega_{coh} = 4\Gamma_L V_R^* (\pi N(\varepsilon))^2 / \Gamma_T, \quad (5.39)$$

$$\Omega_{dec} = 2\pi \frac{\Gamma_L \Gamma_\phi V_R^*}{\Gamma_0 \Gamma_T} \left[\frac{1}{\Gamma_0} + 2\pi N(\varepsilon) \right] N(\varepsilon). \quad (5.40)$$

Aquí, hemos definido $V_R^* = V_R/V$ tal que V_R^* no tiene unidades, $\Gamma_T = \Gamma(\theta)|_{\Delta V=0, \Delta E=0}$ que no depende de θ , y $\Gamma_0 = \Gamma_L + V_R^2/V$. Estas ecuaciones están expresadas en una aproximación de orden cero, es decir, para ΔE y ΔV pequeños. Note que el factor $\Delta E\Delta V \cos(\theta_0)$ es el área paramétrica encerrada durante un ciclo del parámetro θ .

En la Fig. 5.2 se muestra el comportamiento típico del trabajo en función de la energía de Fermi y del *rate* de probabilidad de los procesos decoherentes. En el régimen en resonancia, es decir, cuando la energía de Fermi es $\varepsilon \approx E_0$, la contribución coherente al trabajo decrece monótonamente como función de Γ_ϕ , mientras el término decoherente se incrementa con Γ_ϕ hasta que alcanza su valor máximo y luego decae. El trabajo total es siempre una función decreciente con Γ_ϕ . En el régimen fuera de resonancia, las contribuciones coherentes y decoherentes se comportan cualitativamente en forma similar al régimen en resonancia. Sin embargo, aquí, el término decoherente domina y, en consecuencia el trabajo total presenta un máximo para un valor finito de Γ_ϕ . Esto implica que en el régimen fuera de resonancia una interacción sistema-ambiente adecuada puede de hecho maximizar el trabajo del motor.

5.4.2. Coeficientes de fricción: contribución coherente y decoherente

La contribución simétrica al coeficiente de fricción puede obtenerse al evaluar la integral de la ecuación 5.7 en un límite de bajas temperaturas. Además de $\gamma^{s,eq}$, hay otro término adicional a la fricción, γ_ϕ , que se origina por el efecto de la decoherencia. En nuestro ejemplo,

$$\bar{\gamma}^{s,eq} = \frac{\hbar}{8\pi^2} \oint \sum_{\alpha, \alpha'} \left| \left(S^\dagger \frac{dS}{d\theta} \right)_{\alpha, \alpha'} \right|^2 dx, \quad (5.41)$$

$$\bar{\gamma}^\phi = \hbar \frac{\Gamma_\phi}{4\Gamma_0} N(\varepsilon) \Delta E^2. \quad (5.42)$$

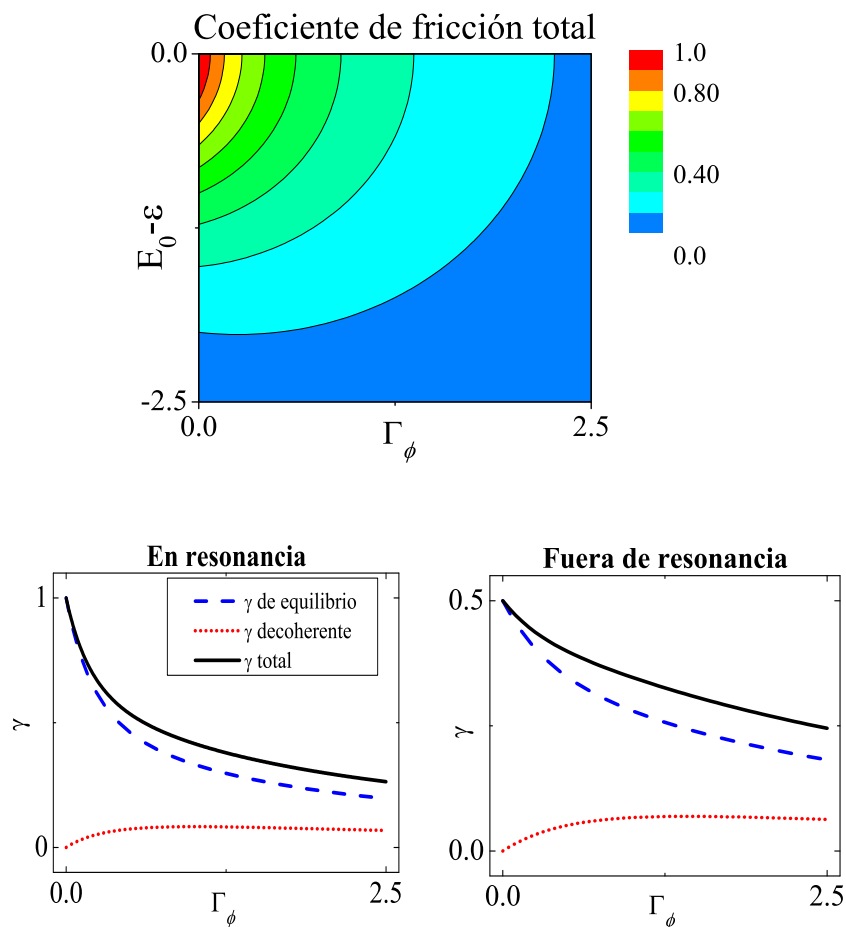


Figura 5.3: **Fig. superior-** Coeficiente de fricción total normalizado por su valor máximo en función de E_0 y Γ_ϕ , ambos expresados en unidades de Γ_0 . **Figs. inferiores-** Coeficiente de fricción del motor para los regímenes en y fuera de resonancia, que corresponden a $(E_0 - \epsilon) = 0$ y -1 respectivamente. Las diferentes contribuciones se indican en la leyenda. En todas las figuras, los valores de los coeficientes de fricción están normalizados por el valor máximo del coeficiente de fricción total $2,4 \cdot 10^{-5} \hbar$.

Nótese que ambos coeficientes son siempre positivos. En la figura 5.3 se muestra el comportamiento típico del coeficiente de fricción en función de la energía de Fermi y del *rate* de probabilidad de sufrir eventos decoherentes. Los coeficientes de fricción $\bar{\gamma}^{s,eq}$ y $\bar{\gamma}^\phi$ presentan un comportamiento similar tanto en el régimen en resonancia como fuera de resonancia en función de Γ_ϕ . La contribución $\bar{\gamma}^{s,eq}$ es una función monótonamente decreciente respecto de Γ_ϕ mientras que $\bar{\gamma}^\phi$ presenta un máximo. El coeficiente de fricción total $\gamma = \gamma^{s,eq} + \gamma^\phi$ siempre decae con Γ_ϕ , tanto en resonancia como fuera de resonancia. En principio, al mirar la ecuación 5.3 uno podría esperar que la fricción electrónica se incrementa debido al término extra de fricción. Sin embargo, la fricción es en realidad mitigada por el efecto de la decoherencia. Esto ocurre debido a que la decoherencia disminuye las fluctuaciones cuánticas y, en consecuencia, también el coeficiente de fricción (debido al teorema de fluctuación-disipación).

5.4.3. Eficiencia termodinámica del motor

El efecto de la decoherencia sobre la eficiencia termodinámica es complejo debido a la competencia entre el trabajo total por ciclo y la fricción. En la figura 5.4 graficamos la eficiencia en función de Γ_ϕ y el período τ . Como se predice por la ecuación 5.23, hay un valor óptimo de τ que maximiza la eficiencia. En este ejemplo particular, la eficiencia máxima es bastante baja, $1,6 \cdot 10^{-5}$. Esto es de esperarse considerando que la interacción entre el rotor y el punto cuántico es perturbativa, lo que implica una carga bombeada Q pequeña, y que el acople intenso entre el punto cuántico y los reservorios ocasiona una corriente I^{bias} alta. En el régimen en resonancia, podemos ver que la decoherencia siempre disminuye la eficiencia del motor cuántico. En el régimen fuera de resonancia, hay un máximo en la eficiencia para un valor finito de Γ_ϕ . Esto implica que, sorprendentemente, la eficiencia puede ser incrementada debido a una interacción con el ambiente ajustada apropiadamente. En efecto, hay ciertos valores de τ donde para un Γ_ϕ crítico la eficiencia pasa de ser cero a tomar valores finitos. Esto implica que el funcionamiento del motor cuántico es iniciado por su interacción con el ambiente.

Lista de parámetros. Los parámetros usados para realizar los cálculos en este ejemplo son: $eV = 10^{-4} V$, $V_R = \sqrt{0,1} V$, $\Gamma_L = 0,1 V$, $\Delta V_R = 10^{-2} V_R$, $\Delta E_0 = 2 \cdot 10^{-3} V$, y $\Gamma_0 = \Gamma_L + V_R^2 = 0,2 V$ donde hemos usado V como unidad y $4 V$ es el ancho de banda de los cables.

5.5. Generalización de la teoría de fuerzas inducidas por corrientes en presencia de decoherencia a sistemas de muchos terminales

Vamos a asumir que el Hamiltoniano de un sistema complejo depende de varios modos vibracionales o rotacionales, etiquetados por el índice ν . Cada modo es controlado por una única coordenada x_ν . Así, el Hamiltoniano del sistema depende paraméricamente de

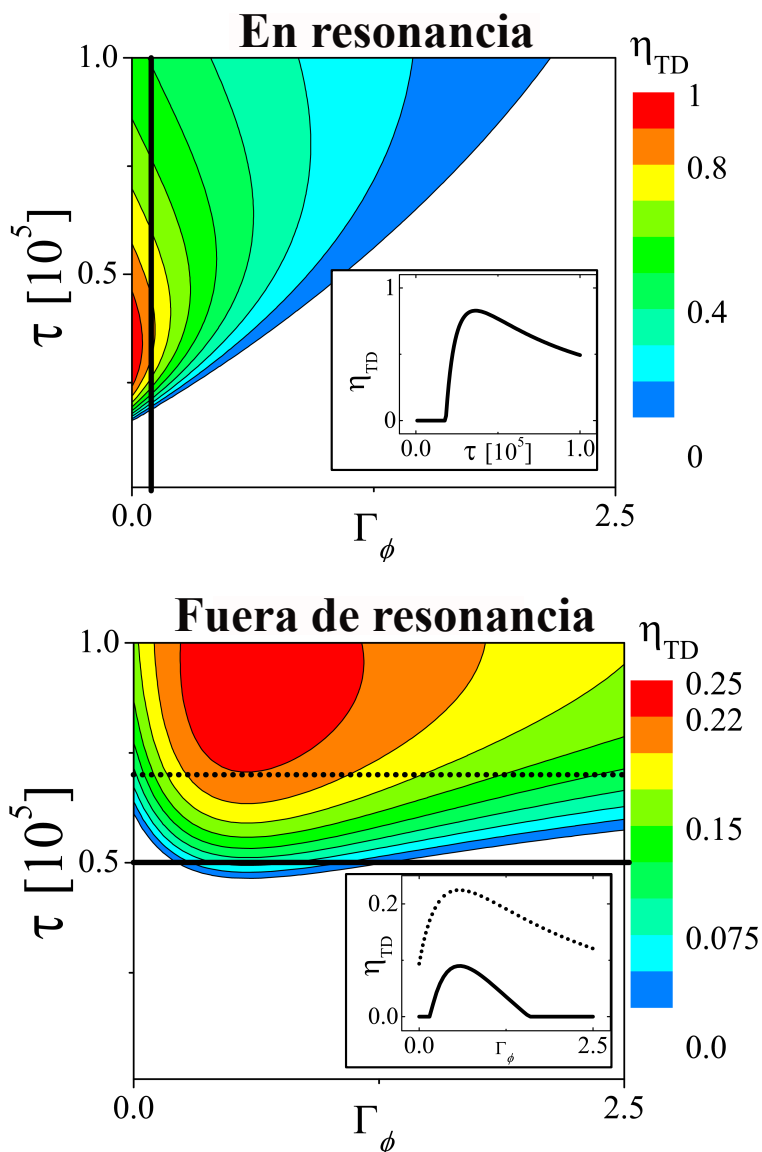


Figura 5.4: Eficiencia termodinámica del motor mostrado en la figura 5.1 en función del rate de los procesos decoherentes Γ_ϕ (en unidades de Γ_0) y el período del motor τ (en unidades de $\hbar/2\Gamma_0$). **Fig. superior-** Régimen en resonancia. **Fig. inferior-** Régimen fuera de resonancia ($E_0 - \varepsilon = -0,75\Gamma_0$). La eficiencia está normalizada por su valor máximo en todos los gráficos $1,6 \cdot 10^{-5}$. Los gráficos incrustados muestran los cortes marcados en las figuras principales como líneas continuas o punteadas.

las coordenadas x_ν como

$$H = H(x_1, \dots, x_N). \quad (5.43)$$

En consecuencia, las funciones de Green y las transmitancias dependen del conjunto de valores $\{x_1, \dots, x_N\}$ en que se encuentra el sistema. Nos enfocaremos en el régimen adiabático, es decir, cuando el período de cada modo es mucho mayor que la escala temporal en que se desarrolla el transporte electrónico. Así, los observables relevantes para el transporte, como las transmitancias, pueden ser descriptos con buena precisión a orden cero en la velocidad, es decir, serán evaluados en el estado estacionario.

Consideraremos que el sistema puede estar conectado a múltiples cables, por ello, introduciremos la decoherencia mediante el modelo DP multiterminal. Vamos a mantener nuestra notación, en que los cables se etiquetan con el índice λ y los procesos decoherentes, con ϕ . Luego, la matriz de transmitancias usando esta notación es

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \mathbb{T}_{\lambda\lambda} & \mathbb{T}_{\lambda\phi} \\ \mathbb{T}_{\phi\lambda} & \mathbb{T}_{\phi\phi} \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

donde $\mathbb{T}_{\lambda\lambda}$ conecta cables reales entre ellos; $\mathbb{T}_{\phi\phi}$, vincula procesos decoherentes; y $\mathbb{T}_{\lambda\phi} = (\mathbb{T}_{\phi\lambda})^T$ conecta cables con procesos decoherentes.

5.5.1. Decoherencia en las corrientes

Como hemos discutido, la corriente que entra al sistema a través de cada cable es la suma de tres contribuciones:

(1) las corrientes que son transportadas por cada modo debido a las diferencias de potencial entre los reservorios (*bias*), (2) el bombeo producido por la variación del parámetro de cada modo x_ν con velocidad \dot{x}_ν , y (3) las fluctuaciones propias de la corriente debido al ruido térmico y el *shot-noise*. La corriente total en el sistema es,

$$\vec{I} = \vec{I}^{Bias} + \vec{I}^{pump} + \delta\vec{I}. \quad (5.45)$$

donde las contribuciones a la corriente fuera del equilibrio son

$$\vec{I}^{Bias} = \frac{e}{h} \mathbb{T} \delta\vec{\mu}, \quad (5.46)$$

y la corriente bombeada es la suma de las contribuciones de cada modo ν ,

$$\vec{I}^{pump} = e \sum_\nu \frac{d\vec{n}}{dx_\nu} \dot{x}_\nu. \quad (5.47)$$

Finalmente, las fluctuaciones en la corriente $\delta\vec{I}$ son ocasionadas por el ruido térmico y el *shot-noise*. Como mencionamos, este último se anula en el equilibrio. Luego, las correlaciones corriente-corriente están dadas por: $\langle \delta\vec{I}_i(t-t') \delta\vec{I}_j(t') \rangle = S_{i,j} \delta(t)$, donde

$$S_{i,j} = 2K_B T \frac{e^2}{h} T_{ij}. \quad (5.48)$$

Sumando las contribuciones a la corriente de las ecuaciones anteriores, obtenemos la corriente total de la ecuación 5.45:

$$\vec{I} = \frac{e}{h} \mathbb{T} \delta \vec{\mu} + e \sum_{\nu} \frac{d\vec{n}}{dx_{\nu}} \dot{x}_{\nu} + \delta \vec{I}. \quad (5.49)$$

De acuerdo al modelo DP y a lo discutido en las secciones anteriores, todas las contribuciones a la corriente neta deben anularse para cada canal ϕ en cada instante ya que satisfacen la condición de voltímetro. Así, $\vec{I}_{\phi} \equiv 0$, y separando en bloques, tenemos que

$$\begin{pmatrix} \vec{I}_{\lambda} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \frac{e}{h} \begin{pmatrix} \mathbb{T}_{\lambda\lambda} & \mathbb{T}_{\lambda\phi} \\ \mathbb{T}_{\phi\lambda} & \mathbb{T}_{\phi\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \vec{\mu}_{\lambda} \\ \delta \vec{\mu}_{\phi} \end{pmatrix} + e \sum_{\nu} \begin{pmatrix} d\vec{n}_{\lambda}/dx_{\nu} \\ d\vec{n}_{\phi}/dx_{\nu} \end{pmatrix} \dot{x}_{\nu} + \begin{pmatrix} \delta \vec{I}_{\lambda} \\ \delta \vec{I}_{\phi} \end{pmatrix}. \quad (5.50)$$

Podemos resolver la ecuación por bloques, para lo cual, aislamos el vector de potenciales químicos en los canales decoherentes ϕ :

$$\delta \vec{\mu}_{\phi} = -\frac{h}{e} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \left\{ \frac{e}{h} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \delta \vec{\mu}_{\lambda} + e \sum_{\nu} \frac{d\vec{n}_{\phi}}{dx_{\nu}} \dot{x}_{\nu} + \delta \vec{I}_{\phi} \right\}. \quad (5.51)$$

Los valores del potencial químico arreglados dentro de $\delta \vec{\mu}_{\phi}$ aseguran la conservación de la carga dentro del sistema. Para ello, debemos considerar que $\delta \vec{\mu}_{\phi}$ se acomoda instantáneamente para compensar las fluctuaciones dadas por el último término de la ecuación 5.51. Al reemplazar $\delta \vec{\mu}_{\phi}$ en 5.50, la corriente en los cables λ resulta

$$\begin{aligned} \vec{I}_{\lambda} &= \frac{e}{h} \left\{ \mathbb{T}_{\lambda\lambda} - \mathbb{T}_{\lambda\phi} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \right\} \delta \vec{\mu}_{\lambda} \\ &+ e \sum_{\nu} \left\{ \frac{d\vec{n}_{\lambda}}{dx_{\nu}} - \mathbb{T}_{\lambda\phi} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \frac{d\vec{n}_{\phi}}{dx_{\nu}} \right\} \dot{x}_{\nu} \\ &+ \delta \vec{I}_{\lambda} - \mathbb{T}_{\lambda\phi} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \delta \vec{I}_{\phi}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

El primer término es exactamente la corriente total fuera del equilibrio que nos da el modelo DP multiterminal y el término entre llaves corresponde a la matriz de transmitancias efectivas. Esta contribución a la corriente es generada por las diferencias de potencial entre los cables, incluyendo los términos decoherentes. El segundo término de la ecuación 5.52 es la corriente de bombeo. De esta ecuación podemos obtener fácilmente la carga bombeada a través de un cable i :

$$Q_i^{pump} = e \sum_{\nu} \oint \left(\frac{d\vec{n}_{\lambda}}{dx_{\nu}} - \mathbb{T}_{\lambda\phi} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \frac{d\vec{n}_{\phi}}{dx_{\nu}} \right)_i dx_{\nu} \quad (5.53)$$

Finalmente, el tercer término de la ecuación 5.52 corresponde a la fluctuación en la corriente debido al ruido térmico.

5.5.2. Expresiones generales de las fuerzas inducidas por corrientes en presencia de decoherencia

La fuerza fuera del equilibrio que ejerce un modo ν está dada por la ecuación 5.6. En el régimen de respuesta lineal y a bajas temperaturas, esta puede reducirse a una expresión muy simple que puede escribirse como

$$\Delta F_\nu = \frac{d\vec{n}}{dx_\nu} \cdot \delta\vec{\mu}, \quad (5.54)$$

donde $\delta\vec{\mu} = (\delta\vec{\mu}_\lambda, \delta\vec{\mu}_\phi)$ es el vector de los potenciales químicos y $d\vec{n}/d\theta = (d\vec{n}_\lambda/d\theta, d\vec{n}_\phi/d\theta)$, el de las emisividades. Usando esta división por bloques, reemplazamos $\delta\vec{\mu}_\phi$ de la ecuación 5.51 en la ecuación anterior,

$$\begin{aligned} \Delta F_\nu = & \left\{ \frac{d\vec{n}_\lambda}{dx_\nu} \cdot \delta\vec{\mu}_\lambda - \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot \left((\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \delta\vec{\mu}_\lambda \right) \right\} \\ & - h \sum_{\nu'} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot \left((\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_{\nu'}} \dot{x}_{\nu'} \right) \\ & - \frac{h}{e} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot \left((\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \delta\vec{I}_\phi \right). \end{aligned} \quad (5.55)$$

En esta ecuación, los paréntesis enfatizan que las magnitudes que encierran son vectores sujetos a un producto entre vectores, por lo que la fuerza ΔF_ν es un escalar.

El primer término de la ecuación 5.55 son las fuerzas fuera del equilibrio,

$$F_\nu^{ne} = \left\{ \frac{d\vec{n}_\lambda}{dx_\nu} - \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \right\} \delta\vec{\mu}_\lambda \quad (5.56)$$

Note que esta es una fuerza de respuesta, que se obtiene a partir de los observables evaluados en el equilibrio, tal como las transmitancias o emisividades. Usando esta expresión, obtenemos para el trabajo del sistema

$$W = \sum_\nu \oint F_\nu^{ne} dx_\nu \quad (5.57)$$

$$= \sum_\nu \oint \left\{ \frac{d\vec{n}_\lambda}{dx_\nu} - \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \mathbb{T}_{\phi\lambda} \right\} \delta\vec{\mu}_\lambda dx_\nu \quad (5.58)$$

De acuerdo a las relaciones de reciprocidad de Onsager, en un sistema de dos terminales con una diferencia de potencial eV , el trabajo W y la carga bombeada Q^{pump} cumplen $W = Q^{pump}V$. Luego, es importante preguntarnos si esta, o alguna relación similar, se mantiene en situaciones que involucran muchos cables. Abordamos esta pregunta en la sección 5.5.4.

5.5.3. Cumplimiento del Teorema de fluctuación-disipación

Los términos adicionales a las fuerzas disipativas que se originan al considerar los procesos decoherentes, de acuerdo al segundo término de la ecuación 5.55, son

$$\begin{aligned} F_\nu^{dis} &= -h \sum_{\nu'} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot \left((\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_{\nu'}} \right) \dot{x}_{\nu'}, \\ &= - \sum_{\nu'} \gamma_{\nu\nu'}^\phi \dot{x}_{\nu'}, \end{aligned} \quad (5.59)$$

donde podemos identificar los coeficientes $\gamma_{\nu\nu'}$ con

$$\gamma_{\nu\nu'} = \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \cdot \left((\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_{\nu'}} \right). \quad (5.60)$$

Por un lado, están los elementos diagonales de la matriz de los coeficientes de fricción, $\gamma_{\nu\nu}^\phi$, que corresponden a procesos que disipan la energía del sistema en el baño electrónico. Por el otro lado, los términos no diagonales, $\gamma_{\nu\nu'}^\phi$, mueven la energía de un modo rotacional ν a otro, ν' , actuando a modo de un campo magnético efectivo. Por ello, en las refs. [BKEvO12, TKVK⁺12] le llaman fuerzas tipo Lorentz.

Las fuerzas fluctuantes se caracterizan por su auto-correlación, que está dada por

$$\begin{aligned} D_{\nu\nu'}^\phi \delta(t) &= \left\langle \xi_\nu^\phi(t-t') \xi_{\nu'}^\phi(t') \right\rangle, \\ &= \left\langle \left(-\frac{h}{e} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \delta \vec{I}_\phi \cdot \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \right) \left(-\frac{h}{e} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \delta \vec{I}_\phi \cdot \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_{\nu'}} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Todas las cantidades en la ecuación anterior son en realidad valores medios, salvo las fluctuaciones en las corrientes, $\delta \vec{I}_\phi$. Estas satisfacen [BB00]

$$\langle \delta I_i(t-t') \delta I_j(t') \rangle = 2K_B T \frac{e^2}{h} T_{ij} \delta(t). \quad (5.62)$$

Usando esta expresión, podemos evaluar el coeficiente de difusión llegando a la expresión

$$D_{\nu\nu'}^\phi = 2K_B T \gamma_{\nu\nu'}^\phi. \quad (5.63)$$

Esto no es ni más ni menos que lo que predice el teorema de fluctuación-disipación. Luego, este se satisface también en nuestro modelo en sistemas multiterminal.

5.5.4. Cumplimiento de las relaciones de reciprocidad de Onsager

Comenzamos dejando de lado los términos fluctuantes de las ecs. 5.49 y 5.55. Esto se puede racionalizar pensando a las magnitudes relevantes como promedios sobre ensambles

o promedios sobre distintas realizaciones del mismo experimento. Asumiendo eso, podemos ubicar los términos de las ecs. 5.49 y 5.55 en un arreglo matricial que toma la forma

$$\begin{pmatrix} -\vec{F} \\ \vec{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{L}_{11} & \mathbb{L}_{12} \\ \mathbb{L}_{21} & \mathbb{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{\delta\mu} \end{pmatrix}. \quad (5.64)$$

Aquí, los vectores \vec{F} y \vec{I} son vectores cuyas entradas dependen del modo ν así como del cable j al que están referidas. En un sentido termodinámico, podemos considerar a las fuerzas \vec{F} y las corrientes \vec{I} como flujos generalizados, mientras que las velocidades \vec{x} y los potenciales químicos $\vec{\delta\mu}$ como fuerzas generalizadas. Luego, en un régimen lineal debe cumplirse que $\mathbb{L}_{12} = -\mathbb{L}_{21}$ para cada elemento, condiciones que son conocidas como las relaciones de reciprocidad de Onsager. [Coh03, ABvO14]

En nuestro caso, en ausencia de campos magnéticos, de acuerdo a las ecs. 5.49 y 5.55,

$$\frac{F_{\nu,m}}{\delta\mu_m} = (\mathbb{L}_{12})_{\nu,m} = -(\mathbb{L}_{21})_{\nu,m} = \frac{1}{e} \frac{\partial Q_{\nu,m}^{pump}}{\partial x_\nu}, \quad (5.65)$$

$$= \left(\frac{d\vec{n}_\lambda}{dx_\nu} - \mathbb{T}_{\lambda\phi} (\mathbb{T}_{\phi\phi})^{-1} \frac{d\vec{n}_\phi}{dx_\nu} \right)_m. \quad (5.66)$$

Este resultado es más general que la expresión conocida que relaciona el trabajo total con la carga, $W = QV$. El resultado que obtenemos en esta ecuación relaciona directamente las fuerzas, la carga bombeada y el potencial químico discriminando las contribuciones de cada modo y cada cable. Además, no sólo se cumple para un ciclo completo del motor, sino que es válida en cada instante.

Si realizamos una integral por ciclo del motor, obtenemos

$$W = \frac{1}{e} \delta\vec{Q} \cdot \delta\vec{\mu}, \quad (5.67)$$

que puede ser visto como la generalización a sistemas multiterminal de la ecuación $W = Q^{pump}V$.

El cumplimiento de las relaciones de Onsager, en adición al cumplimiento del teorema de fluctuación-disipación, muestra que nuestro modelo es consistente con los requerimientos de la termodinámica.

5.6. Conclusión

En conclusión, hemos extendido la teoría de fuerzas inducidas por corrientes a sistemas generales que admiten conexión a múltiples eventos decoherentes y la aplicamos al estudio de motores cuánticos adiabáticos (AQMs). Hemos mostrado que la decoherencia no sólo modifica las fuerzas inducidas por corrientes sino también los mecanismos de disipación de energía al baño electrónico y, en consecuencia, a las fluctuaciones en la fuerza.

Mostramos que la teoría es consistente con el teorema de fluctuación disipación y con las relaciones de reciprocidad de Onsager. En particular, para el caso de un sistema de

dos terminales, mostramos que la relación entre el trabajo total y la carga bombeada, $W = Q^{pump}V$, [BMRvO13] se mantiene cuando incluimos decoherencia. En sistemas con múltiples terminales, esta relación toma una forma distinta, $W = \delta\vec{Q} \cdot \delta\vec{\mu}/e$, que permite incluir los diferentes potenciales químicos en cada cable.

Hemos ejemplificado nuestra teoría con una situación simple de un motor basado en un punto cuántico. Mostramos que incluso allí, el papel de la decoherencia puede ser no trivial. De hecho, un acople adecuado con el ambiente puede incluso aumentar la eficiencia del motor. Más aún, en condiciones no óptimas, la decoherencia es capaz de activar el funcionamiento del motor.

Capítulo 6

Conclusión

6.1. Conclusión general

El transporte cuántico de electrones representan una parte esencial de la física de la materia condensada de nuestros días. Tanto en la nanoescala como en la escala mesoscópica, los electrones están inevitablemente sujetos a interacciones con el ambiente, que llevan a su decoherencia, es decir la degradación de las interferencias que caracterizan los efectos cuánticos. Por tanto, estas interacciones pueden tener consecuencias cruciales para los distintos observables que dependen de un control cuántico del flujo de electrones. En esta tesis hemos procurado concebir e implementar un tratamiento de estos fenómenos que resulte adecuado para un gran número de aplicaciones relacionados con el transporte. Al considerar sistemas abiertos que puedan ser modelados con Hamiltonianos tipo orbitales moleculares, uno de los pocos antecedentes lo constituye el modelo D'Amato-Pastawski (DP). Este recurre a Hamiltonianos no-Hermíticos como estrategia para incluir procesos decoherentes en el transporte estacionario.

A lo largo de esta tesis hemos profundizado y extendido las ideas del modelo DP para desarrollar estrategias que posibiliten incluir decoherencia en una gran diversidad de situaciones físicas. Comenzamos considerando el transporte cuántico de espín en sistemas con modulaciones magnéticas tipo paredes de dominio magnético. Para resaltar el rol de las interferencias cuánticas recurrimos a una descripción del transporte dependiente del tiempo basado en paquetes de ondas incluyendo dinámica de espines. Ya en un régimen donde las interferencias cuánticas no son importantes, verificamos que una descripción adecuada puede mostrar el origen de la magnetorresistencia gigante. Para incorporar decoherencia en una descripción donde el transporte dependa del tiempo, diseñamos el modelo de corrimientos cuánticos estocásticos de la energía. En una posterior profundización de este modelo, mostramos que esta estrategia puede extenderse a sistemas de muchos cuerpos aplicándolo a un dímero de espines y a una cadena de espines. Ambas situaciones tienen directa relevancia en experimentos de resonancia magnética nuclear. Cuando los electrones colisionan con un centro dispersor ceden parte de su impulso. Por tanto, las reflectancias deben estar asociadas con una fuerza mecánica sobre el centro dispersor. Ejemplos de esto

lo constituyen el desplazamiento de paredes de dominio, que está siendo implementado en memorias magnéticas, y la expectativa de operación de motores cuánticos adiabáticos, que ha surgido recientemente. Particularizando en esta última situación mostramos que la decoherencia juega un rol central en los nanomotores.

6.2. Principales contribuciones originales

A continuación se detallan las principales contribuciones originales de esta tesis.

- Abordamos el problema de la conductancia cuántica dependiente de espín en un alambre unidimensional afectado por un campo magnético con modulación espacial y que resulta en la rotación del estado de espín. Se identificaron dos regímenes dinámicos 1) Si la intensidad del campo en la inhomogeneidad magnética es lo suficientemente débil, el desdoblamiento de las energías locales de espín por efecto Zeeman se convierte en un cruce evitado. Por lo tanto, la probabilidad de transmisión con inversión de espín sigue la fórmula de Landau-Zener. 2) Para campos intensos, la conductancia dependiente del espín muestra oscilaciones, como función del ancho de la inhomogeneidad magnética, que pudieron ser identificadas con oscilaciones de Rabi. Para obtener una inequívoca confirmación de esta hipótesis recurrimos a la dinámica de paquetes de onda. Demostramos además, que estas interferencias son robustas frente a procesos decoherentes, es decir tanto el período como la amplitud relativa de las oscilaciones permanece aproximadamente constante. Es decir, no se observa que haya una transición de fase dinámica a un régimen sobreamortiguado. Estas metodologías y resultados son de carácter general y por lo tanto podrían utilizarse en otros sistemas que involucren estructuras magnéticas moduladas. Esto abre nuevas perspectivas para el uso de interferencias en dispositivos cuánticos basados en el transporte de espín.
- Desarrollamos un modelo sencillo para estudiar válvulas de espín. El mismo se basa en el método DP multiterminal y nos permite abordar el fenómeno de magnetoresistencia gigante (GMR) como un problema de transporte decoherente dependiente del espín. El Hamiltoniano efectivo usado se basa en el modelo de dos bandas de Mott, donde cada proyección de espín se identifica con un modo de propagación. La resistencia eléctrica producida por colisiones con centros dispersivos se representa, en una aceptable aproximación que excluye al régimen de localización débil, identificando el tiempo de vida media entre colisiones con un tiempo de coherencia. La posibilidad de incluir en una misma descripción las interferencias cuánticas y la dispersión resistiva resulta en un modelo capaz de abarcar un amplio rango de posibilidades experimentalmente relevantes. En particular, esto nos permitió movernos con continuidad desde un régimen puramente cuántico hasta un régimen capaz de recuperar la descripción semiclásica usada por Fert y colaboradores para explicar la GMR. Tal transición se logra variando un único parámetro del sistema: la razón entre la longitud del dominio magnético y la longitud de difusión. Esta última es

descrita en términos de eventos decoherentes. Mediante el cálculo de los perfiles de potenciales químicos y de corrientes locales, mostramos que en el límite de baja difusión existe un excelente acuerdo con la descripción original de dos resistencias de Fert.

- Presentamos un nuevo método que permite calcular la dinámica cuántica decoherente empleando una única función de onda. Este modelo requiere de un esquema de evolución en tiempos discretos donde hay una pérdida de la amplitud de la función de onda coherente, que es exactamente compensada por una reinyección incoherente. Este proceso resulta finalmente en una evolución unitaria estocástica, donde la decoherencia se interpreta como fluctuaciones de las energías locales. Denominamos este procedimiento modelo de “corrimientos cuánticos” (QD por “quantum drift”). Por basarse en una función de onda, el método resulta más eficiente que otros procedimientos basados en la matriz densidad.[BHP97] Mostramos que el QD no solo describe el decaimiento exponencial de las oscilaciones de Rabi ocasionado por la decoherencia, sino que también captura una “transición de fase en la dinámica cuántica” inducida por la interacción con el ambiente. Comparamos el QD con el modelo de saltos cuánticos (QJ) y los resultados mostraron que el QD es capaz de converger a una dinámica promedio usando un conjunto estadístico con un menor número de implementaciones. El modelo QD probó ser óptimo para evaluar la dinámica de paquetes de ondas y ser capaz de adaptarse adecuadamente a la medición de observables del transporte electrónico. Además, puede extenderse trivialmente para abordar la dinámica de funciones de onda de muchos cuerpos por lo que su campo de aplicabilidad es muy promisorio.
- Extendimos la teoría de las fuerzas inducidas por corrientes incluyendo eventos decoherentes en un marco general de múltiples terminales. Para ello, se extendió el modelo DP para abordar situaciones en las que una porción del sistema, el rotor, presentan un movimiento adiabático respecto de los electrones. Encontramos que la decoherencia genera no solo una esperable contribución a las fuerzas inducidas por corrientes, sino que también contribuye a la fricción intrínseca del motor y al ruido. Se demostró que nuestra descripción cumple con el teorema de fluctuación-disipación y que las fuerzas y corrientes presentes en el sistema cumplen con las relaciones de reciprocidad de Onsager. En particular, empleamos nuestro modelo para el estudio de los motores cuánticos adiabáticos. Encontramos que la decoherencia afecta de manera no trivial el desempeño de los motores cuánticos adiabáticos: Disminuye la eficiencia de sistemas que operaban en condiciones óptimas pero incrementa la eficiencia de aquellos sistemas que operan fuera del régimen óptimo. En particular hallamos que motores cuánticos adiabáticos que tendrían eficiencia nula, es decir en los que el trabajo inducido por corrientes se pierde como disipación, son capaces de proporcionar trabajo aprovechable para cierto rango bien definido de la intensidad de interacción con el ambiente.

6.3. Perspectivas

Las preguntas que iniciaron esta tesis nos han llevado a desarrollar y extender métodos y modelos que son capaces de describir una gama muy amplia de problemas. Esto naturalmente genera nuevos interrogantes y perspectivas de aplicación entre las cuales queremos destacar las siguientes:

- Dado que el modelo DP es independiente de la base usada para su formulación Hamiltoniana, resultaría particularmente interesante considerar la base de los momentos. En este caso, la reinyección al ser “local” conservaría momento. Tal descripción proveería una forma de decoherencia que al no destruir el momento de la partícula, no tendría efectos resistivos.[YKD07]
- El problema de la transición a través de un cruce evitado se puede tratar, para el caso coherente, mediante la fórmula de Landau-Zener. Sería útil evaluar la dependencia de dicho problema con la tasa de decoherencia, para lo cual, esta tesis provee dos alternativas. Por un lado, se podría usar una analogía con el problema del capítulo 2, donde la decoherencia es tratada en el estado estacionario. Por otro lado, también se podría abordar el problema dinámico usando el QD.
- Como ya se mencionó, resulta natural realizar una extensión del método QD para afrontar problemas de muchos cuerpos. En este caso hay un numerosas situaciones donde resultaría interesante estudiar la dinámica en presencia de decoherencia, por ejemplo sistemas que involucren espines interactuantes.
- El movimiento de las paredes de dominio magnético es un aspecto de sumo interés tanto teórico como tecnológico debido a su aplicación en el almacenamiento de información en memorias magnéticas tipo andarivel (*race-track*) [THJ⁺07]. Para ello se recurriría a las descripciones desarrolladas en los primeros capítulos a las que se debería sumar la teoría de fuerzas inducidas por corrientes. Esto, permitiría evaluar la dinámica de este tipo de sistemas desde “primeros principios”.

6.4. Trabajos derivados de esta tesis

- L. J. Fernández-Alcázar y H. M. Pastawski. *Magnetorresistencia en paredes de dominio de nanohilos magnéticos: Posible rol de las oscilaciones de Rabi en presencia de decoherencia*. Anales AFA **23** (2), 17 (2012).
- L. J. Fernández-Alcázar y H. M. Pastawski. *Landau-Zener and Rabi oscillations in the spin-dependent conductance*. EPL, **105**, 17005 (2014).
- C. J. Cattena, L. J. Fernández-Alcázar, R. A. Bustos-Marún, D. Nozaki, H. M. Pastawski. *Generalized multi-terminal decoherent transport: Recursive algorithms and applications to SASER and giant magnetoresistance*. J. Phys.: Condens. Matter **26**, 345304 (2014).

- L. J. Fernández-Alcázar y H. M. Pastawski. *Decoherent time-dependent transport beyond the Landauer-Büttiker formulation: A quantum-drift alternative to quantum jumps*. Phys. Rev. A **91**, 022117 (2015).
- L. J. Fernández-Alcázar, R. A. Bustos-Marín y H. M. Pastawski. *Decoherence in current induced forces: Application to adiabatic quantum motors*. Phys. Rev. B **92**, 075406 (2015).

Apéndice A

Métodos analíticos para el transporte cuántico

A.1. Procedimientos de *decimación* y Hamiltonianos efectivos

Aún los dispositivos cuánticos más simples involucran un gran número de grados de libertad por lo que su estudio no puede ser llevado a cabo sin simplificaciones adecuadas. Los procedimientos de *decimation*, inspirados en las técnicas de grupos de renormalización de la mecánica estadística [DABK83, SJ82], buscan reducir recursivamente el número de grados de libertad de un Hamiltoniano general de dimensión $N \times N$ a otro de menor rango, sin alterar las propiedades físicas.

La idea básica puede ser capturada al considerar un sistema con $N = 3$ estados cuya ecuación secular es:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon - E_1 & -V_{12} & -V_{13} \\ -V_{21} & \varepsilon - E_2 & -V_{23} \\ -V_{31} & -V_{32} & \varepsilon - E_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = [\varepsilon\mathbb{I} - \mathbb{H}_S] \vec{u} \equiv \vec{0}. \quad (\text{A.1})$$

Frecuentemente vamos a estar interesados en la transferencia de una excitación de un estado inicial a otro, digamos de 1 a 2. En lugar de diagonalizar la matriz, podemos aislar u_3 de la ecuación que deriva de la tercera fila y usarla para eliminar u_3 en la primera y segunda ecuación. De este modo, obtenemos un nuevo conjunto de ecuaciones donde la variable u_3 fue *decimada*:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon - \bar{E}_1 & -\bar{V}_{12} \\ -\bar{V}_{21} & \varepsilon - \bar{E}_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = [\varepsilon\mathbb{I} - \mathbb{H}_{\text{eff.}}] \vec{u} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Los coeficientes renormalizados ocultan su dependencia no lineal con la energía ε :

$$\begin{aligned}\bar{E}_1 &= E_1 + \Sigma_1(\varepsilon) = E_1 + V_{13} \frac{1}{\varepsilon - E_3} V_{31}, \\ \bar{E}_2 &= E_2 + \Sigma_2(\varepsilon) = E_2 + V_{23} \frac{1}{\varepsilon - E_3} V_{32}, \\ \bar{V}_{12} &= V_{12} + V_{13} \frac{1}{\varepsilon - E_3} V_{32}.\end{aligned}\tag{A.3}$$

En este caso, los términos $\Sigma_j(\varepsilon)$ ($j = 1, 2$) son las energías propias (*self-energies*) que dan cuenta de los corrimientos de las energías E_i debido al acople con el estado eliminado. Nótese que mientras uno conserve la dependencia no lineal de Σ_j con la energía ε , la ecuación secular real sigue siendo cúbica en la variable ε . Esta dependencia es la que provee el espectro **exacto** de todo el sistema.

El parámetro de interacción efectiva, \bar{V}_{12} , junto con las energías propias Σ_j , dan cuenta del transporte a través de toda la muestra. Su dependencia en ε provee toda la información necesaria para el transporte de estado estacionario así como también para la dinámica cuántica. [LPD90] Este procedimiento puede ser realizado sistemáticamente en un Hamiltoniano de cualquier tamaño $N \times N$ para terminar con un Hamiltoniano efectivo de la dimensión que uno desee, en particular uno 2×2 .

Las reglas de *decimación* para una cadena de sitios con interacciones a primeros vecinos se pueden resumir en ecuaciones recursivas para la energía propia. [PM01, Cat12] Si $i < j$, la $\Sigma_{i,j}$ para el sitio i debido a la *decimación* de los sitios entre i y j es

$$\Sigma_{i,j}(\varepsilon) = V_{i,i+1} \frac{1}{\varepsilon - E_{i+1} - \Sigma_{i+1,j}(\varepsilon)} V_{i+1,i},\tag{A.4}$$

mientras que para el sitio j ,

$$\Sigma_{j,i}(\varepsilon) = V_{j,j-1} \frac{1}{\varepsilon - E_{j-1} - \Sigma_{j-1,i}(\varepsilon)} V_{j-1,j}.\tag{A.5}$$

Entonces, si consideramos una cadena de N sitios donde todos ellos son *decimados*, obtendremos las energías corregidas

$$\bar{E}_i(\varepsilon) = E_i + \Sigma_{i,1}(\varepsilon) + \Sigma_{i,j}(\varepsilon),\tag{A.6}$$

$$\bar{E}_j(\varepsilon) = E_j + \Sigma_{j,i}(\varepsilon) + \Sigma_{j,N}(\varepsilon),\tag{A.7}$$

y también el parámetro de salto (*hopping*) efectivo

$$\bar{V}_{i,j} = V_{i,j-1} \frac{1}{\varepsilon - E_j - \Sigma_{j,i}(\varepsilon)} V_{j-1,j}.\tag{A.8}$$

Finalmente, hemos reducido la descripción del problema a un sistema de dos ecuaciones, o equivalentemente a un Hamiltoniano 2×2 , donde la dependencia no lineal en ε queda oculta dentro de las energías y parámetros de salto corregidos. Desde el punto de vista

de la teoría de perturbaciones, puede verificarse que el procedimiento de *decimación* es equivalente a una suma sobre todos los ordenes de perturbación de la serie de Wigner-Brillouin.

Finalmente resta mencionar que en la práctica, es conveniente sumar una parte imaginaria infinitesimal, $-i\eta$, a cada energía $E_j \rightarrow E_j - i\eta$. Un $\eta > 0$ finito equivale a un proceso de decaimiento, lo que asegura que uno recupera una dependencia temporal retardada de los observables a través de una transformada de Fourier bien definida.

A.2. Descripción de los alambres

Los terminales conectados al sistema se describen como alambres semi-infinitos acoplados a este. Ellos son manejados de una manera similar a la del propio sistema. La idea es eliminar todos los grados de libertad internos *decimándolos* progresivamente, renormalizando los estados del sistema que están directamente acoplados a los reservorios externos. Para mayor claridad se considera un alambre modelado como una cadena semi-infinita unidimensional,

$$\hat{H}_L = \sum_{i=0}^{-\infty} \left\{ E_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - V \left[\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i-1} + \hat{c}_{i-1}^\dagger \hat{c}_i \right] \right\}, \quad (\text{A.9})$$

lo cual lleva a una matriz tri-diagonal de dimensión infinita. Los elementos E_i y V ahora son los términos diagonal y no-diagonal de la matriz \mathbb{H}_L . Este cable se conecta a la izquierda del sistema, digamos, con el sitio 1

$$\hat{V}_{SL} = V_L \left[\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_0 + \hat{c}_0^\dagger \hat{c}_1 \right]. \quad (\text{A.10})$$

En lugar de tratar con todo el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_L + \hat{V}_{SL}, \quad (\text{A.11})$$

llevamos a cabo el procedimiento de *decimación*. Este se hace especialmente sencillo debido a la estructura de cadena del cable. La energía del i -ésimo sitio es “corregida” por la eliminación del $(i-1)$ -ésimo sitio, que a su vez se corrige por los sitios a su izquierda, [PM01] con las energías propias que resultan en una fracción continua:

$$\begin{aligned} \Sigma_i &= V_{i,i-1} \frac{1}{\varepsilon - E_{i-1} - \Sigma_{i-1}} V_{i-1,i} \\ (i &= 0, -1, -2, \dots - \infty) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

En un canal perfectamente propagante: $V_{i,i-1} \equiv V$ y $E_i = E_0$. Notando que $\Sigma_i = \Sigma_{i-1} \equiv \Sigma$, llegamos a la solución auto-consistente:

$$\begin{aligned} \Sigma(\varepsilon) &= \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \Sigma} = \Delta(\varepsilon) - i\Gamma(\varepsilon). \\ &= \frac{\varepsilon - E_0 + i\eta}{2} - \text{sgn}(\varepsilon - E_0) \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E_0 + i\eta}{2} \right)^2 - V^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

donde la raíz cuadrada generalizada en el límite $\eta \rightarrow 0^+$, da la componente imaginaria de la energía propia (*self-energy*) para ε dentro de la banda de energías permitidas. De otro modo se vuelve real.

Por lo tanto, una vez que los estados en el cable izquierdo han sido *decimados* totalmente, la energía del primer sitio se convierte en

$$\tilde{E}_1(\varepsilon) = \bar{E}_1(\varepsilon) + \Sigma_{L1}(\varepsilon) \quad (\text{A.14})$$

$$\text{con } \Sigma_{L1}(\varepsilon) = \left(\frac{V_L}{V} \right)^2 \Sigma(\varepsilon) \quad (\text{A.15})$$

$$= \Delta_{L1}(\varepsilon) - i\Gamma_{L1}(\varepsilon) \quad (\text{A.16})$$

Al igual que antes, la parte real $\Delta_{L1}(\varepsilon)$ indica cómo las energías de sitio no perturbadas se desplazan por la presencia de los cables. La diferencia importante con el ejemplo de *decimación* sencillo discutido anteriormente es que, como consecuencia de la naturaleza infinita del cable, las auto-energías pueden adquirir una componente imaginaria finita, $\Gamma_{L1}(\varepsilon)$, incluso en el límite de $\eta \rightarrow 0^+$. Esta, describe la velocidad a la que la densidad coherente en el sistema decae hacia los estados propagantes del cable.

A.3. La regla de oro de Fermi en el escape hacia cables o procesos decoherentes.

La parte imaginaria de las energías propias (*self-energies*) que describimos antes es consistente con los decaimientos exponenciales de la probabilidad de supervivencia que predice la regla de oro de Fermi (FGR). Por ejemplo, consideremos un “sistema” con un solo estado $|1\rangle$, de energía E_1 , que interactúa con un cable mediante un acople V_L . La probabilidad de supervivencia en el tiempo t en el estado $|1\rangle$ es,

$$P_{1,1} = \left| \langle 1 | \exp[-i\hat{H} t/\hbar] | 1 \rangle \theta(t) \right|^2 \simeq \exp[-t/\tau_s], \quad (\text{A.17})$$

donde τ_s^{-1} es la tasa (*rate*) de decaimiento de la excitación. Según la FGR, podemos estimar τ_s^{-1} usando

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_L|^2 N_{L1}(E_1) \simeq \frac{2\Gamma_{L1}(E_1)}{\hbar}, \quad (\text{A.18})$$

donde N_{L1} es la densidad local de estados del cable en el sitio de contacto con el sistema.

Recordemos que las energías propias obtenidas anteriormente tienen una dependencia funcional explícita sobre ε . En consecuencia, el decaimiento real puede apartarse de esta aproximación exponencial. De hecho, un decaimiento cuántico siempre debe comenzar cuadráticamente como $1 - (V_L t/\hbar)^2$, convirtiéndose a una exponencial solo después de un tiempo. A tiempos muy largos, el decaimiento puede incluso llegar a ser no-monótono y seguir una ley de potencia. [RP06] En la práctica, a menos que ε esté cerca de un borde de banda, nos quedaremos en la aproximación exponencial, conocida como **límite de banda ancha**, pasando por alto la dependencia en ε .

Apéndice B

Algoritmo de evolución Trotter-Suzuki

La forma usual de realizar la evolución dinámica de un sistema es buscando los autovalores y autovectores, para luego diagonalizar el Hamiltoniano \hat{H} . Así, en esa base, la dinámica se vuelve trivial dado que el operador de evolución temporal $U(t) = \exp(-i\hat{H} t/\hbar)$ es diagonal. Sin embargo, en sistemas complejos, el procedimiento de diagonalización no siempre es sencillo y la comprensión de la física en términos de los autovectores no siempre es transparente.

Nuestro modo de realizar la dinámica es a través de la expansión de Trotter-Suzuki en un esquema de tiempos discretos. Consideremos un sistema cuyo Hamiltoniano puede separarse, $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. Recurriendo a la expansión en series de potencia $\exp(-i\hat{H} t/\hbar) = \sum_{m=0}^{\infty} (-i\hat{H} t/\hbar)^m/m!$, el operador de evolución temporal se vuelve

$$U(t) = e^{-i\frac{(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)t}{\hbar}} = e^{-i\frac{\hat{H}_1 t}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{H}_2 t}{\hbar}} e^{-i\frac{[\hat{H}_1, \hat{H}_2] t^2}{\hbar^2}}. \quad (\text{B.1})$$

Esta expresión puede ser fácilmente simplificada considerando una evolución paso-a-paso donde el tiempo avanza en intervalos cortos dt . Por lo tanto, el último factor se vuelve una corrección de menor orden $\mathcal{O}(dt^2)$, y luego,

$$e^{-i\frac{\hat{H} dt}{\hbar}} \simeq e^{-i\frac{\hat{H}_1 dt}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{H}_2 dt}{\hbar}}. \quad (\text{B.2})$$

De este modo, obtenemos la evolución completa durante un intervalo $t = N_t dt$ como una sucesión de N_t pasos temporales dt ,

$$e^{-i\frac{\hat{H} t}{\hbar}} = \prod_{j=1}^{N_t} e^{-i\frac{\hat{H}_1 dt}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{H}_2 dt}{\hbar}}. \quad (\text{B.3})$$

Así, la evolución total resulta en una sucesión de evoluciones parciales. Dentro de este enfoque podemos pasar por alto los procedimientos de diagonalización. De hecho, no es necesario encontrar los autoestados de un Hamiltoniano porque Trotter-Suzuki sigue siendo válida independientemente de la base.

Apéndice C

Matriz S y Funciones de Green

Consideremos un circuito de tres terminales etiquetadas por los índices 1, 2 y 3, como el que se muestra en la figura C.1. Estos terminales se encuentran conectados a través de una región donde las partículas son dispersadas. Por tanto, podemos caracterizar a tal región por una matriz de dispersión S (matriz de *scattering*) que conecta los canales de entrada (*inputs*, i) con los canales de salida (*outputs*, o). Así,

$$\vec{o} = S \vec{i},$$
$$\begin{pmatrix} o_1 \\ o_2 \\ o_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & r_2 & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & r_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i_1 \\ i_2 \\ i_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

donde r_j son los coeficientes de reflexión que caracterizan a una partícula incidiendo por el canal i_j y siendo reflejada hacia el canal o_j , mientras que los t_{ij} corresponden a los coeficientes de transmisión desde el canal de entrada i_j hacia el canal de salida o_i . Así, por ejemplo, si sólo tenemos partículas incidiendo por el canal i_1 , es decir $\vec{i} = (1, 0, 0)$, entonces las salidas quedarán determinadas por

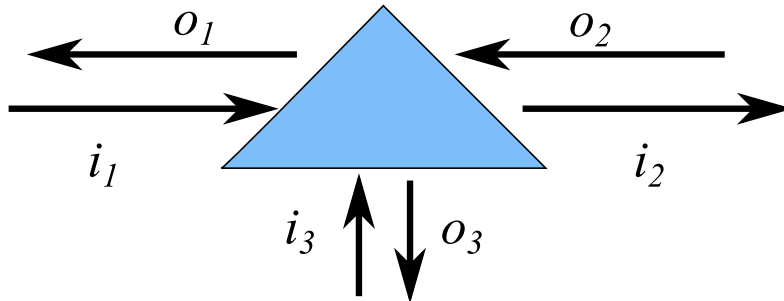


Figura C.1: Esquema de los canales de entrada (*inputs*, i) y de salida (*outputs*, o) que son dispersados por el sistema, representado por una caja triangular.

$$\begin{pmatrix} r_1 \\ t_{21} \\ t_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & r_2 & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & r_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

En ausencia de campos magnéticos, la matriz S presenta simetría de reversión temporal, por lo que $t_{ij} = t_{ji}$. Adicionalmente debe cumplirse

$$\sum_i |S_{ij}|^2 = \sum_i |S_{ji}|^2 = 1, \quad (\text{C.3})$$

que establece una condición para la conservación de probabilidad en el sistema y que la región de scattering no acumula probabilidad.

En la literatura, la definición de los elementos de la matriz S en términos de las funciones de Green está determinada a menos de un signo. En algunas referencias, como por ejemplo [Hac01], se utiliza la definición

$$S_{ij} = \delta_{ij} - 2i\sqrt{\Gamma_i\Gamma_j}G_{ij}^R, \quad (\text{C.4})$$

mientras que otros como Datta presentan la relación anterior en la forma

$$S_{ij} = -\delta_{ij} + 2i\sqrt{\Gamma_i\Gamma_j}G_{ij}^R. \quad (\text{C.5})$$

Muchos observables no dependen de esta ambigüedad en la fase, como por ejemplo las transmitancias, reflectancias, fuerzas, entre otros. No obstante, ambas definiciones no son equivalentes en todos los casos, y no es lo mismo atribuir el sentido de transmisión o reflexión a un coeficiente o a su opuesto.

C.1. Coeficiente de reflexión y función de Green en un cristal unidimensional con una impureza

A los efectos de establecer cuál de las definiciones de la matriz S resulta consistente con el formalismo que utilizamos, vamos a hallar el coeficiente de reflexión que resulta de resolver el problema de dispersión debido a una impureza en un cristal unidimensional usando la ecuación de Schrödinger. La impureza, situada en $n = 0$, se caracteriza por tener una energía que difiere en una cantidad F de las energías de los restantes sitios de la cadena, E_0 . Asumiremos que el acople entre sitios es importante a primeros vecinos y toma el valor V .

La función de onda en el cristal es

$$\psi_k = \sum_n u_{k,n} |n\rangle,$$

donde $|n\rangle$ es el estado en el sitio n y $u_{k,n}$ es la amplitud de la función de onda ψ_k en la posición $x_n = n.a$ de la red discreta, donde a es la constante de red. Desde la izquierda

C.1 Coeficiente de reflexión y función de Green en un cristal unidimensional con una impureza

incide sobre la impureza una onda $1.e^{ikna}$, la cual se dispersa en la impureza, y por tanto, la función de onda se debe cumplir que

$$\begin{aligned} u_{k,n<0} &= 1.e^{ikna} + r e^{-ikna}, \\ u_{k,n>0} &= t e^{ikx}. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Aquí, r y t son los coeficientes de reflexión y transmisión, respectivamente, y k es el vector de onda. Podemos hallar estos coeficientes resolviendo la ecuación de Schrödinger usando la ecuación C.6 y la relación de dispersión de la red

$$\varepsilon_k = 2V - 2V \cos(ka), \quad (\text{C.7})$$

donde elegimos $E_0 = 0$ por simplicidad. Omitiremos la solución completa de este problema, pero el lector interesado puede referirse a la sección 13 – 6 de “Feynman, Leighton, Sands. *The Feynman lectures on Physics*, vol. III: Quantum Mechanics (The new millennium edition, Basic Books)”. La solución de la ecuación de Schrödinger en este problema implica que los coeficientes de transmisión y reflexión se encuentran relacionados por

$$t = 1 + r. \quad (\text{C.8})$$

A su vez, el coeficiente de reflexión resulta

$$r = \frac{-F}{F + 2iV \sin(ka)}.$$

Note que si $F = 0$, es decir, si no hay impureza, no se produce reflexión pues $r = 0$.

Un observable de interés es la probabilidad de encontrar a la partícula en uno u otro de los canales de salida, la cual se obtiene de evaluar el módulo cuadrado de los coeficientes. Adicionalmente, la conservación de las partículas impone la condición

$$|r|^2 + |t|^2 = 1. \quad (\text{C.9})$$

Aquí, los coeficientes $|r|^2 = R$ y $|t|^2 = T$ son las reflectancias y transmitancias que obtenemos en problemas de transporte electrónico.

Nuestro objetivo es comparar los resultados obtenidos mediante la solución de la ecuación de Schrödinger con los coeficientes de reflexión y transmisión deducidos a partir de la definición de la matriz de dispersión en base a las funciones de Green.

La función de Green para el sistema centrado en la impureza es

$$G_{00}^R = \frac{1}{\varepsilon - E_0 - F - 2\Delta(\varepsilon) + 2i\Gamma(\varepsilon)}, \quad (\text{C.10})$$

donde hemos *decimado* las cadenas semi-infinitas conectadas a la impureza. Cada una de éstas da una corrección a la energía dada por $\Sigma(\varepsilon) = \Delta(\varepsilon) - i\Gamma(\varepsilon)$, como vimos el apéndice A, por lo tanto

$$2\Delta(\varepsilon) = \varepsilon - E_0. \quad (\text{C.11})$$

Por otro lado, Γ se relaciona con la velocidad de las excitaciones v_k . Ésta última puede ser evaluada a partir de la relación de dispersión

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} = \frac{2Va}{\hbar} \sin(ka). \quad (\text{C.12})$$

Luego, usando la expresión para $\Gamma(\varepsilon_k)$ dada por la ecuación A.13 tenemos que

$$v_k = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon_k - E_0}{2} \right)^2} = \frac{2a}{\hbar} \Gamma(\varepsilon_k). \quad (\text{C.13})$$

Finalmente, obtenemos una expresión reducida para la función de Green,

$$G_{00}^R = \frac{1}{-F + 2iV \sin(ka)}. \quad (\text{C.14})$$

Como vimos en la sección anterior, los coeficientes de reflexión y transmisión pueden obtenerse a partir de la función de Green. Recordemos que para ello debemos recurrir a alguna de las definiciones de la matriz de dispersión, las cuales varían en un signo, o equivalentemente en un factor de fase $e^{i\pi}$. Sin embargo, sólo una de las definiciones mantiene consistencia con el resultado obtenido mediante la solución de la ecuación de Schrödinger para el coeficiente de reflexión r en nuestro ejemplo. Nos referimos a la definición provista por Datta

$$S_{ij} = -\delta_{ij} + 2i\sqrt{\Gamma_i \Gamma_j} G_{ij}^R, \quad (\text{C.15})$$

donde los elementos no diagonales son exactamente los coeficientes de transmisión y los diagonales, los de reflexión. Así, para la cadena tenemos que

$$\begin{aligned} r &= -1 + 2i\Gamma G_{00}^R, \\ &= \frac{-F}{F - 2iV \sin(ka)}, \end{aligned}$$

la cual es la expresión obtenida anteriormente para r .

En conclusión, para mantener coherencia con nuestros cálculos debemos utilizar la definición de la matriz S provista por Datta. Con esta definición es muy claro que los elementos no diagonales corresponden a coeficientes de transmisión en la forma de la fórmula de Fisher y Lee,

$$t_{ij} = 2i\sqrt{\Gamma_i} G_{ij}^R \sqrt{\Gamma_j}, \quad (\text{C.16})$$

y los elementos diagonales son coeficientes de reflexión

$$r_i = -1 + 2i\Gamma_i G_{ii}^R, \quad (\text{C.17})$$

como vimos anteriormente.

C.2. Conservación de la carga y teorema óptico

Con estas definiciones de los coeficientes t y r puede no ser trivial demostrar la conservación de la carga a través de la ecuación C.3. A continuación, mostraremos que efectivamente esta ecuación se satisface.

La ecuación C.3 para $j = 1$, queda

$$r_1 r_1^* + t_{12} t_{12}^* + t_{13} t_{13}^* = 1, \quad (\text{C.18})$$

y utilizando las ecuaciones C.16 y C.17,

$$\begin{aligned} r_1^* r_1 + t_{12}^* t_{12} + t_{13}^* t_{13} &= (-1 + 2i\Gamma_1 G_{11}^R) (-1 - 2i\Gamma_1 G_{11}^A) + \\ &\quad \left(2i\sqrt{\Gamma_1} G_{12}^R \sqrt{\Gamma_2} \right) \left(-2i\sqrt{\Gamma_1} G_{12}^A \sqrt{\Gamma_2} \right) + \\ &\quad \left(2i\sqrt{\Gamma_1} G_{13}^R \sqrt{\Gamma_3} \right) \left(-2i\sqrt{\Gamma_1} G_{13}^A \sqrt{\Gamma_3} \right), \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

lo que equivale a

$$\begin{aligned} r_1^* r_1 + t_{12}^* t_{12} + t_{13}^* t_{13} &= 1 - 2i\Gamma_1 (G_{11}^R - G_{11}^A) + 2\Gamma_1 |G_{11}^R|^2 2\Gamma_1 + \\ &\quad 2\Gamma_1 |G_{12}^R|^2 2\Gamma_2 + 2\Gamma_1 |G_{13}^R|^2 2\Gamma_3. \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Claramente, los términos de la segunda línea son transmitancias que conectan al canal 1 con el 2 y el 3. Sin embargo, es claro qué representan físicamente los términos que contienen a los elementos diagonales de la función de Green. Afortunadamente, éstos pueden ser escritos en términos de los elementos no diagonales de G^R a través del teorema óptico,

$$[\mathbb{G}^R - \mathbb{G}^A] = \mathbb{G}^R [\Sigma^R - \Sigma^A] G^A \quad (\text{C.21})$$

$$2i\text{Im}\mathbb{G}^R = -2i\mathbb{G}^R \Gamma \mathbb{G}^A \quad (\text{C.22})$$

donde hemos utilizado una notación matricial. Luego,

$$\text{Im}G_{ii}^R = - \sum_i G_{ij}^R \Gamma_j G_{ji}^A. \quad (\text{C.23})$$

Introduciendo este resultado en la ecuación C.20 toma la forma

$$r_1^* r_1 + t_{12}^* t_{12} + t_{13}^* t_{13} = 1 + (2i)^2 \Gamma_1 \left[|G_{11}^R|^2 \Gamma_1 + |G_{12}^R|^2 \Gamma_2 + |G_{13}^R|^2 \Gamma_3 \right] \quad (\text{C.24})$$

$$+ 2\Gamma_1 \left[|G_{11}^R|^2 2\Gamma_1 + |G_{12}^R|^2 2\Gamma_2 + |G_{13}^R|^2 2\Gamma_3 \right]. \quad (\text{C.25})$$

$$(\text{C.26})$$

Trivialmente los últimos dos términos se anulan mutuamente, y por lo tanto

$$r_1^* r_1 + t_{12}^* t_{12} + t_{13}^* t_{13} = 1, \quad (\text{C.27})$$

lo cual representa la conservación de la carga. Es decir, las partículas que ingresan por uno de los canales de entrada son o bien reflejadas o transmitidas por completo, sin que algún efecto de acumulación de carga dentro del sistema ocurra.

Bibliografía

- [AA85] B. L. Altshuler and A. G. Aronov. *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, edited by M. Pollack and A. I. Efros. (North-Holland, Amsterdam, 1985).
- [ABvO14] L. Arrachea, N. Bode, and F. von Oppen. Vibrational cooling and thermoelectric response of nanoelectromechanical systems. *Physical Review B*, 90:125450, 2014.
- [ADLP06] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski. Environmentally induced quantum dynamical phase transition in the spin swapping operation. *J. Chem. Phys.*, 124(19):194507, 2006.
- [ADLP07] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski. Decoherence under many-body system-environment interactions: A stroboscopic representation based on a fictitiously homogenized interaction rate. *Phys. Rev. A*, 75:062116, 2007.
- [ADLP08] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, and H. M. Pastawski. Quantum parallelism as a tool for ensemble spin dynamics calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 101:120503, 2008.
- [AGD63] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinski. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Prentice-Hall, 1963.
- [AvO15] L. Arrachea and F. von Oppen. Nanomagnet coupled to quantum spin hall edge: An adiabatic quantum motor. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 74:596, 2015.
- [Avr13] J. Avron. Viewpoint: Turning the wheels of a quantum motor. *Physics*, 6:87, 2013.
- [B86a] M. Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1761, 1986.
- [B86b] M. Büttiker. Role of quantum coherence in series resistors. *Phys. Rev. B*, 33:3020–3026, 1986.

- [BAL08] S. W. D. Bailey, I. Amanatidis, and C. J. Lambert. Carbon nanotube electron windmills: A novel design for nanomotors. *Phys. Rev. Lett.*, 100:256802, 2008.
- [BAL+12] N. Bode, L. Arrachea, G. S. Lozano, T. S. Nunner, and F. von Oppen. Current-induced switching in transport through anisotropic magnetic molecules. *Physical Review B*, 85:115440, 2012.
- [Bau92] G. E. W. Bauer. Perpendicular transport through magnetic multilayers. *Physical Review Letters*, 69:1676, 1992.
- [BB94] A. Brataas and G.E.W. Bauer. Semiclassical theory of perpendicular transport and giant magnetoresistance in disordered metallic multilayers. *Physical Review B*, 49:14684, 1994.
- [BB00] Ya. M. Blanter and M. Buttiker. Shot noise in mesoscopic conductors. *Phys. Rep.*, 336:1, 2000.
- [BBK06] A. Brataas, G. E. W. Bauer, and P. J. Kelly. Non-collinear magnetoelectronics. *Physics Reports*, 427:157, 2006.
- [BDS+12] C. Betthausen, T. Dollinger, H. Saarikoski, V. Kolkovsky, G. Karczewski, T. Wojtowicz, K. Richter, and D. Weiss. Spin-transistor action via tunable landau-zener transitions. *Science*, 337:324, 2012.
- [BHP97] H. P. Breuer, W. Huber, and F. Petruccione. Stochastic wave-function method versus density matrix: a numerical comparison. *Comput. Phys. Commun.*, 104:46, 1997.
- [BKEvO12] Niels Bode, Silvia Viola Kusminskiy, Reinhold Egger, and Felix von Oppen. Current-induced forces in mesoscopic systems: A scattering-matrix approach. *J. Nanotechnol.*, 3:144, 2012.
- [Blo04] I. Bloch. Quantum gases in optical lattices. *Phys. World*, 17:25, 2004.
- [BMRvO13] Raúl Bustos-Marún, Gil Refael, and Felix von Oppen. Adiabatic quantum motors. *Phys. Rev. Lett.*, 111:060802, 2013.
- [Bos03] S. Bose. Quantum communication through an unmodulated spin chain. *Phys. Rev. Lett.*, 91:207901, 2003.
- [Bro98] P. W. Brouwer. Scattering approach to parametric pumping. *Phys. Rev. B*, 58:R10135–R10138, 1998.
- [BSJ+06] JD Burton, Renat F Sabirianov, Sitaram S Jaswal, Evgeny Y Tsymbal, and Oleg N Mryasov. Magnetic moment softening and domain wall resistance in ni nanowires. *Physical Review Letters*, 97(7):077204, 2006.

- [BvH91] C. W. J. Beenakker and H. van Houten. Quantum transport in semiconductor nanostructures. *Solid state physics*, 44:228, 1991.
- [Car93] H. J. Carmichael. Quantum trajectory theory for cascaded open systems. *Phys. Rev. Lett.*, 70:2273–2276, 1993.
- [Cat12] C. J. Cattena. *Quantum decoherence effects on electronic transport in molecular wires and nanodevices*. Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, 2012.
- [CB02] J. N. H. J. Cremers and P. W. Brouwer. Dephasing in a quantum pump. *Phys. Rev. B*, 65:115333, 2002.
- [CBP10] C. J. Cattena, R. A. Bustos-Marún, and H. M. Pastawski. Crucial role of decoherence for electronic transport in molecular wires: Polyaniline as a case study. *Phys. Rev. B*, 82:144201, 2010.
- [CDEL04] M. Christandl, N. Datta, A. Ekert, and A. J. Landahl. Perfect state transfer in quantum spin networks. *Phys. Rev. Lett.*, 92:187902, 2004.
- [CF74] GG Cabrera and LM Falicov. Theory of the residual resistivity of bloch walls i. paramagnetic effects. *physica status solidi (b)*, 61(2):539–549, 1974.
- [CFABM⁺14] Carlos J Cattena, Lucas J Fernández-Alcázar, Raúl A Bustos-Marún, Daijiro Nozaki, and Horacio M Pastawski. Generalized multi-terminal decoherent transport: recursive algorithms and applications to saser and giant magnetoresistance, 2014.
- [CKGGM⁺97] J. L. Costa-Krämer, N. García, P. García-Mochales, P. A. Serena, M. I. Marqués, and A. Correia. Conductance quantization in nanowires formed between micro and macroscopic metallic electrodes. *Physical Review B*, 55:5416, 1997.
- [Coh03] D. Cohen. Quantum pumping and dissipation: From closed to open systems. *Phys. Rev. B*, 68:201303R, Nov 2003.
- [CRC07] P. Cappellaro, C. Ramanathan, and D. G. Cory. Simulations of information transport in spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 99:250506, 2007.
- [CSVR89] H. J. Carmichael, S. Singh, R. Vyas, and P. R. Rice. Photoelectron waiting times and atomic state reduction in resonance fluorescence. *Phys. Rev. A*, 39:1200–1218, 1989.
- [CTGDR92] C. Cohen-Tannoudji, G. Grynberg, and J. Dupont-Roc. *Atom-Photon Interactions: Basic Processes and Applications*. Wiley, 1992.

- [CYM08] Michael Czerner, Bogdan Yu Yavorsky, and Ingrid Mertig. Fully relaxed magnetic structure of transition metal nanowires: First-principles calculations. *Physical Review B*, 77(10):104411, 2008.
- [CZ04] J. I. Cirac and P. Zoller. New frontiers in quantum information with atoms and ions. *Phys. Today*, 57:38, 2004.
- [DABK83] E. Domany, S. Alexander, D. Bensimon, and L. P. Kadanoff. Solutions to the schrödinger equation on some fractal lattices. *Phys. Rev. B*, 28:3110, 1983.
- [DALP07] E.P. Danieli, G.A. Álvarez, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. Quantum dynamical phase transition in a system with many-body interactions. *Solid State Commun.*, 141(7):422 – 426, 2007.
- [Dan84] P. Danielewicz. Quantum theory of nonequilibrium processes i. *Annals of Physics*, 152:239, 1984.
- [Dat95] S. Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1995.
- [DBP08] A. D. Dente, R. A. Bustos-Marún, and H. M. Pastawski. *Phys. Rev. A*, 78:062116, 2008.
- [DCM92] J. Dalibard, Y. Castin, and K. Mølmer. Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics. *Phys. Rev. Lett.*, 68:580–583, 1992.
- [Ded13] Valentin Alek Dediu. Organic spintronics: Inside the interface. *Nature Physics*, 9(4):210–211, 2013.
- [DMT09] D. Dundas, E.J. McEniry, and T.N. Todorov. Current-driven atomic waterwheels. *Nature Nanotech.*, 4:99, 2009.
- [DP90] J. L. D’Amato and H. M. Pastawski. Conductance of a disordered linear chain including inelastic scattering events. *Phys. Rev. B*, 41:7411, 1990.
- [DPL02] E.P. Danieli, H.M. Pastawski, and P.R. Levstein. Exact spin dynamics of inhomogeneous 1-d systems at high temperature. *Physica B*, 320:351, 2002.
- [DR96] HANS De Raedt. Computer simulation of quantum phenomena in nano-scale devices. *Annual Reviews of Computational Physics*, 4:107, 1996.
- [DT98] D. DiVincenzo and B. Terhal. Decoherence: the obstacle to quantum computation. *Physics world*, 11(3):53, 1998.

- [FAP14] L. J. Fernández-Alcázar and H. M. Pastawski. Landau-zener and rabi oscillations in the spin-dependent conductance. *Europhys. Lett.*, 105(1):17005, 2014.
- [FAP15] Lucas J. Fernández-Alcázar and Horacio M. Pastawski. Decoherent time-dependent transport beyond the landauer-büttiker formulation: A quantum-drift alternative to quantum jumps. *Phys. Rev. A*, 91:022117, 2015.
- [FC68] A. Fert and I. A. Campbell. Two-current conduction in nickel. *Physical Review Letters*, 21:1190, 1968.
- [Fer08] Albert Fert. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1517–1530, 2008.
- [Fer11] A. Fert. Giant magnetoresistance. *Scholarpedia*, 6:6982, 2011.
- [FJWS04] Peter E Falloon, Rodolfo A Jalabert, Dietmar Weinmann, and Robert L Stamps. Circuit model for domain walls in ferromagnetic nanowires: Application to conductance and spin transfer torques. *Physical Review B*, 70(17):174424, 2004.
- [FJWS06] Peter E Falloon, Rodolfo A Jalabert, Dietmar Weinmann, and Robert L Stamps. Electron transport through disordered domain walls: Coherent and incoherent regimes. *Physical Review B*, 74(14):144425, 2006.
- [FL81] D. S. Fisher and P. A. Lee. Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, 23:6851, 1981.
- [GWJS04] Victor A. Gopar, Dietmar Weinmann, Rodolfo A. Jalabert, and Robert L. Stamps. Electronic transport through domain walls in ferromagnetic nanowires: coexistence of adiabatic and nonadiabatic spin dynamics. *Phys. Rev. B*, 69:014426, 2004.
- [Hac01] G. Hackenbroich. Phase coherent transmission through interacting mesoscopic systems. *Phys. Rep.*, 343:463, 2001.
- [IL99] Y. Imry and R. Landauer. Conductance viewed as transmission. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S306, 1999.
- [JP01] Rodolfo A Jalabert and Horacio M Pastawski. Environment-independent decoherence rate in classically chaotic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 86:2490, 2001.
- [Kos72] A. Kossakowski. On quantum statistical mechanics of non- hamiltonian systems. *Rep. Math. Phys.*, 3:247, 1972.

- [KRP⁺11] Tibor Kudernac, Nopporn Ruangsupapichat, Manfred Parschau, Beatriz Macia, Nathalie Katsonis, Syuzanna R. Harutyunyan, Karl-Heinz Ernst, and Ben L. Feringa. Electrically driven directional motion of a four-wheeled molecule on a metal surface. *Nature*, 479:208, 2011.
- [KUS⁺12] E. Khosravi, A.-M. Uimonen, A. Stan, G. Stefanucci, S. Kurth, R. van Leeuwen, and E. K. U. Gross. Correlation effects in bistability at the nanoscale: Steady state and beyond. *Phys. Rev. B*, 85:075103, 2012.
- [KW08] Kyril Kazymyrenko and Xavier Waintal. Knitting algorithm for calculating green functions in quantum systems. *Physical Review B*, 77:115119, 2008.
- [Lan57] Rolf Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 1:223, 1957.
- [Lau99] R. B. Laughlin. Nobel lecture: Fractional quantization. *Rev. Mod. Phys.*, 71:863, 1999.
- [Lin76] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Commun. Math. Phys.*, 48:119, 1976.
- [LJP⁺03] W. Lu, Z. Ji, L. Pfeiffer, K. W. West, and A. J. Rimberg. Real-time detection of electron tunnelling in a quantum dot. *Nature (London)*, 423:422, 2003.
- [LL58] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics non-relativistic theory*. Pergamon Press, 1958.
- [LPD90] P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and J. L. D'Amato. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2:1781, 1990.
- [MB01] M. Moskalets and M. Büttiker. Effect of inelastic scattering on parametric pumping. *Phys. Rev. B*, 64:201305, 2001.
- [MBSH⁺97] Z. L. Mádi, B. Brutscher, T. Schulte-Herbrüggen, R. Brüschweiler, and R. R. Ernst. Time-resolved observation of spin waves in a linear chain of nuclear spins. *Chem. Phys. Lett.*, 268:300, 1997.
- [MCD93] K. Mølmer, Y. Castin, and J. Dalibard. Monte carlo wave-function method in quantum optics. *J. Opt. Soc. Am. B*, 10:524, 1993.
- [MKBE74] L. Müller, A. Kumar, T. Baumann, and R. R. Ernst. Transient oscillations in nmr cross-polarization experiments in solids. *Phys. Rev. Lett.*, 32:1402, 1974.

- [Mot35] N. F. Mott. A discussion of the transition metals on the basis of quantum mechanics. *Proceedings of the Physical Society*, 47:571, 1935.
- [Mot36] N. F. Mott. The electrical conductivity of transition metals. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 153:699, 1936.
- [MS09] Josef Michl and E. Charles H. Sykes. Molecular rotors and motors: Recent advances and future challenges. *ACS Nano*, 3:1042, 2009.
- [MSSvL09] P. Myöhänen, A. Stan, G. Stefanucci, and R. van Leeuwen. Kadanoff-baym approach to quantum transport through interacting nanoscale systems: From the transient to the steady-state regime. *Phys. Rev. B*, 80:115107, 2009.
- [NBMC⁺16] D. Nozaki, R. Bustos-Marín, C. J. Cattena, G. Cuniberti, and H. M. Pastawski. An efficient coarse-grained approach for the electron transport through large molecular systems under dephasing environment. *Eur. Phys. J. B*, 89:102, 2016.
- [NGdRPC12] D. Nozaki, C. Gomes da Rocha, H. M. Pastawski, and G. Cuniberti. Disorder and dephasing effects on electron transport through conjugated molecular wires in molecular junctions. *Phys. Rev. B*, 85:155327, 2012.
- [Pas91] H. M. Pastawski. Classical and quantum transport from generalized landauer-büttiker equations. *Phys. Rev. B*, 44:6329, 1991.
- [Pas92] H. M. Pastawski. Classical and quantum transport from generalized landauer-büttiker equations. ii. time-dependent resonant tunneling. *Phys. Rev. B*, 46:4053, 1992.
- [Pas07] H. M. Pastawski. Revisiting the fermi golden rule: Quantum dynamical phase transition as a paradigm shift. *Physica B: Condensed Matter*, 398:278, 2007.
- [PH08] M. B. Plenio and S. F. Huelga. Dephasing-assisted transport: quantum networks and biomolecules. *New J. Phys.*, 10:113019, 2008.
- [PJT⁺05] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. *Science*, 309:2180, 2005.
- [PLU95] H. M. Pastawski, P. R. Levstein, and G. Usaj. Quantum dynamical echoes in the spin diffusion in mesoscopic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 75:4310, 1995.

- [PM01] H. M. Pastawski and E. Medina. Tight binding methods in quantum transport through molecules and small devices: from the coherent to the decoherent description. *Rev. Mex. Fis.*, 47S1:1, 2001.
- [PUL96] H. M. Pastawski, G. Usaj, and P. R. Levstein. Quantum interference phenomena in the local polarization dynamics of mesoscopic systems: an nmr observation. *Chem. Phys. Lett.*, 261:329, 1996.
- [QZ09] X.-L. Qi and S. C. Zhang. Field-induced gap and quantized charge pumping in a nanoscale helical wire. *Phys. Rev. B*, 79:235442, 2009.
- [Red65] A. G. Redfield. The theory of relaxation processes. *Adv. Magn. Res.*, 1:1, 1965.
- [RMK⁺09] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik. Environment-assisted quantum transport. *New J. Phys.*, 11:033003, 2009.
- [Rot09] I. Rotter. A non-hermitian hamilton operator and the physics of open quantum systems. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 42:153001, 2009.
- [RP06] E. Rufeil Fiori and H. M. Pastawski. *Chem. Phys. Lett.*, 420:35, 2006.
- [RUB⁺08] AA Reynoso, Gonzalo Usaj, CA Balseiro, Denis Feinberg, and Michel Avignon. Anomalous josephson current in junctions with spin polarizing quantum point contacts. *Physical review letters*, 101(10):107001, 2008.
- [SAL⁺14] C. M. Sánchez, R. H. Acosta, P. R. Levstein, H. M. Pastawski, and A. K. Chattah. Clustering and decoherence of correlated spins under double quantum dynamics. *Phys. Rev. A*, 90:042122, 2014.
- [SDR12] Henri Saarikoski, Tobias Dollinger, and Klaus Richter. Spin transmission control in helical magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 86:165407, 2012.
- [SEL03] John Schliemann, J Carlos Egues, and Daniel Loss. Nonballistic spin-field-effect transistor. *Physical review letters*, 90(14):146801, 2003.
- [SGL⁺13] Sabine Steil, Nicolas Großmann, Martin Laux, Andreas Ruffing, Daniel Steil, Martin Wiesenmayer, Stefan Mathias, Oliver LA Monti, Mirko Cinchetti, and Martin Aeschlimann. Spin-dependent trapping of electrons at spinterfaces. *Nature Physics*, 9(4):242–247, 2013.
- [SJ82] J. B. Sokoloff and Jorge V. José. Localization in an almost periodically modulated array of potential barriers. *Phys. Rev. Lett.*, 49:700–700, 1982.
- [SKV⁺14] M. J. A. Schuetz, E. M. Kessler, L. M. K. Vandersypen, J. I. Cirac, and G. Giedke. Nuclear spin dynamics in double quantum dots: Multistability, dynamical polarization, criticality, and entanglement. *Phys. Rev. B*, 89:195310, 2014.

- [Sli96] C. P. Slichter. *Principles of Magnetic Resonance*. Springer, 1996.
- [THJ⁺07] Luc Thomas, Masamitsu Hayashi, Xin Jiang, Rai Moriya, Charles Rettner, and Stuart Parkin. Resonant amplification of magnetic domain-wall motion by a train of current pulses. *Science*, 315(5818):1553–1556, 2007.
- [Tho74] D. J. Thouless. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, 13, 1974.
- [TKVK⁺12] Mark Thomas, Torsten Karzig, Silvia Viola-Kusminskiy, Gergely Zaránd, and Felix von Oppen. Scattering theory of adiabatic reaction forces due to out-of-equilibrium quantum environments. *Phys. Rev. B*, 86:195419, 2012.
- [TM92] W. G. Teich and G. Mahler. Stochastic dynamics of individual quantum systems: Stationary rate equations. *Phys. Rev. A*, 45:3300, 1992.
- [VF93] T. Valet and A. Fert. Theory of the perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers. *Phys. Rev. B*, 48:7099–7113, 1993.
- [vFDS04] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma. *Rev. Mod. Phys.*, 76:323, 2004.
- [vK86] K. von Klitzing. The quantized hall effect. *Reviews of Modern Physics*, 58:519, 1986.
- [Wei90] H. A. Weidenmüller. Scattering theory and conductance fluctuations in mesoscopic systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 167:28, 1990.
- [YKD07] Ahmet Ali Yanik, Gerhard Klimeck, and Supriyo Datta. Quantum transport with spin dephasing: a nonequilibrium green’s function approach. *Physical Review B*, 76(4):045213, 2007.
- [ZASO11] A. Zwick, G. A. Alvarez, J. Stolze, and O. Osenda. Robustness of spin-coupling distributions for perfect quantum state transfer. *Phys. Rev. A*, 84:022311, 2011.
- [Zen32] Clarence Zener. Non-adiabatic crossing of energy levels. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 137, pages 696–702. The Royal Society, 1932.
- [ŽH13] M. Žnidarič and M. Horvat. Transport in a disordered tight-binding chain with dephasing. *Eur. Phys. J. B*, 86:1, 2013.
- [Zur97] W. H. Zurek. Probing quantum origins of the classical. *Physics World*, 10:24, 1997.
- [Zur03] W. H Zurek. Decoherence and the transition from quantum to classical—revisited. *arXiv preprint quant-ph/0306072*, 2003.