

Tesis Doctoral

# Transporte cuántico dependiente del tiempo en sistemas mesoscópicos

Ludovico, María Florencia

2015-12-11

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Ludovico, María Florencia. (2015-12-11). Transporte cuántico dependiente del tiempo en sistemas mesoscópicos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

Cita tipo Chicago:

Ludovico, María Florencia. "Transporte cuántico dependiente del tiempo en sistemas mesoscópicos". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2015-12-11.

**EXACTAS** UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



**UBA**

Universidad de Buenos Aires



**Universidad de Buenos Aires**

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

# **Transporte cuántico dependiente del tiempo en sistemas mesoscópicos**

Tesis presentada para optar al título de Doctor de la Universidad de Buenos Aires área ciencias físicas

**Lic. María Florencia Ludovico**

Director de tesis: Dra. Liliana Arrachea

Consejero de estudios: Dr. Gustavo Lozano

Lugar de trabajo: Departamento de Física, FCEyN, Universidad de Buenos Aires e IFIBA, CONICET.

Buenos Aires, Noviembre de 2015

Fecha de defensa: 11 de Diciembre de 2015

## Resumen

En esta tesis estudiamos las propiedades de transporte de carga y energía en sistemas de escala mesoscópica que se encuentran fuera del equilibrio debido a la acción de potenciales dependientes del tiempo. Con el objetivo de estudiar las propiedades termodinámicas y fenómenos termoeléctricos en sistemas fuera del equilibrio, nos enfocamos en describir la relación entre corrientes de partículas y de energía. En primer lugar, comenzamos estudiando transporte eléctrico en sistemas de tipo Aharonov-Bohm con anillos conectados a dos electrodos y en presencia de campos magnéticos alternos. Analizamos las condiciones para generar corrientes de bombeo continuas en el régimen adiabático y las propiedades de simetría de esta corriente ante la inversión del campo magnético.

Luego nos enfocamos en el estudio de transporte dependiente del tiempo de energía y calor en sistemas con voltajes alternos aplicados. En este punto, presentamos una expresión apropiada para el cálculo de las corrientes de calor en cada parte del sistema, en acuerdo con los principios fundamentales de la termodinámica.

Por último, derivamos una teoría termoeléctrica generalizada que incluye no solo las corrientes de bombeo de carga y calor, sino también el trabajo intercambiado entre el sistema cuántico y las fuentes externas dependientes del tiempo. También presentamos expresiones para los coeficientes termoeléctricos que obedecen relaciones de reciprocidad de Onsager. Esta teoría termoeléctrica generalizada nos permitió describir y caracterizar en término de eficiencias y figuras de mérito máquinas cuánticas tales como motores, generadores, máquinas térmicas y bombeadores de calor.

A lo largo de la tesis, la resolución de los problemas se basó en la aplicación del formalismo de funciones de Green de Keldysh para sistemas fuera del equilibrio, y fue acompañada por resultados numéricos.

**Palabras claves:** Transporte cuántico - Teoría cuántica de campos - Fuera de equilibrio - Energía - Termodinámica

# Time dependent quantum transport in mesoscopic systems

## Abstract

We study the properties of charge and energy transport in mesoscopic systems under time-dependent driving potentials. Studying the relation between particles and energy currents is the basis to describe thermoelectric phenomena, and when combined with the basic principles of thermodynamics, the resulting theory has simplicity and high predictive power. With the purpose of describing this relation, we start by studying electric transport in Aharonov-Bohm setups containing rings threaded by *ac* magnetic fluxes. We analyze the conditions to generate a pumped *dc* current in the adiabatic regime. We also study the symmetry properties of the induced current as a function of the static component of the magnetic flux.

Then we focus on the study of time-dependent energy and heat flows in systems with external power sources. We derive the appropriate expression for the dynamical dissipation, in accordance with the fundamental principles of thermodynamics.

Finally, we generalize the theory of thermoelectrics to include coherent electron systems under adiabatic *ac* driving, accounting for quantum pumping of charge and heat as well as the work exchanged between electron system and driving potentials. We derive the relevant response coefficients in the adiabatic regime and show that they obey Onsager reciprocity relations. This generalized thermoelectric framework allows us to describe and characterize in terms of efficiencies and figures of merit the operation of quantum machines like motors, generators, heat engines and heat pumps.

During this work, we solved the problems by using out of equilibrium Keldysh's Green function formalism and numerical methods.

**Keywords:** Quantum transport - Quantum field theory - non-equilibrium - Energy - Thermodynamic

*Para Lu y Andrés*



# Índice general

Resumen en español	I
Resumen en inglés	II
<b>1. Introducción a sistemas mesoscópicos</b>	<b>1</b>
1.1. Sistemas Mesoscópicos: Escalas características de tiempo y longitud . . . . .	1
1.2. Bombeadores cuánticos y régimen adiabático . . . . .	2
1.3. Anillos Mesoscópicos . . . . .	4
1.4. Capacitores cuánticos y emisores de electrones . . . . .	7
1.5. Máquinas cuánticas . . . . .	9
<b>2. Fundamentos teóricos I: Funciones de Green y su aplicación al estudio de transporte en sistemas con potenciales periódicos</b>	<b>17</b>
2.1. Formalismo de las funciones de Green . . . . .	17
2.1.1. Representación de Schrödinger, Heisenberg e Interacción . . . . .	18
2.1.2. Funciones de Green para sistemas en equilibrio . . . . .	20
2.1.3. Funciones de Green para sistemas fuera de equilibrio . . . . .	22
2.1.4. Representación matricial . . . . .	23
2.1.5. Teorema de Langreth . . . . .	25
2.2. Transporte en sistemas con potenciales periódicos . . . . .	26
2.2.1. Modelo teórico del sistema . . . . .	26
2.2.2. Corrientes de carga y energía . . . . .	28
2.2.3. Solución perturbativa de la ecuación de Dyson . . . . .	33
2.2.4. Expresiones finales para las corrientes dc y la potencia media producida por las fuentes externas . . . . .	33
2.2.5. Relación con el formalismo de la matriz de scattering . . . . .	35
<b>3. Fundamentos teóricos II: Teoría de respuesta lineal</b>	<b>39</b>
3.1. La fórmula de Kubo general . . . . .	39
3.2. Fórmula de Kubo para la conductividad . . . . .	41
3.3. Fórmula de Kubo para la conductancia . . . . .	42
<b>4. Fundamentos teóricos III: Teoría termoeléctrica</b>	<b>45</b>
4.1. Respuesta lineal y relaciones de reciprocidad de Onsager . . . . .	46
4.2. Eficiencias termodinámicas . . . . .	48

<b>5. Desarrollos formales de esta tesis</b>	<b>53</b>
5.1. Cálculo de la corriente de carga ac . . . . .	53
5.2. Cálculo de la corriente de energía ac . . . . .	54
5.3. Flujo de energía en el contacto . . . . .	55
5.4. Expansión a bajas frecuencias . . . . .	55
<b>6. Bombeo de carga con campos magnéticos ac</b>	<b>57</b>
6.1. Enfoque teórico . . . . .	57
6.1.1. Modelo . . . . .	57
6.1.2. Corriente continua y coeficientes de transporte . . . . .	59
6.1.3. Evaluando la función de Green retardada . . . . .	60
6.2. Condiciones para bombeo adiabático . . . . .	62
6.2.1. Un solo anillo . . . . .	62
6.2.2. Dos anillos . . . . .	63
6.3. Dependencia de la corriente bombeada con el flujo magnético estático . . . . .	64
6.3.1. Un solo anillo . . . . .	64
6.3.2. Dos anillos . . . . .	67
6.4. Flujo magnético alterno y diferencia de voltaje entre terminales . . . . .	67
6.4.1. Un solo anillo . . . . .	67
6.4.2. Dos anillos . . . . .	69
6.5. Conclusiones . . . . .	72
<b>7. Transferencia dinámica de energía en sistemas con potenciales ac</b>	<b>77</b>
7.1. Modelo . . . . .	77
7.2. Flujos de energía dependientes del tiempo . . . . .	78
7.3. Comparación con el formalismo de la matriz de scattering . . . . .	80
7.4. Flujo de calor para bajas frecuencias $\omega_0$ (régimen adiabático) . . . . .	81
7.5. Flujo de calor fuera del régimen adiabático . . . . .	83
7.6. Conclusiones . . . . .	85
<b>8. Respuesta adiabática y teoría termoeléctrica generalizada para sistemas con potenciales ac</b>	<b>87</b>
8.1. Respuesta adiabática y relaciones de reciprocidad . . . . .	87
8.2. Teoría termoeléctrica generalizada . . . . .	91
8.2.1. Motores y generadores . . . . .	93
8.2.2. Máquinas térmicas y bombecedores de calor . . . . .	94
8.3. Ejemplo: Sistema con dos terminales y sin interacciones . . . . .	95
8.3.1. Respuesta lineal . . . . .	97
8.3.2. Coeficientes de transporte . . . . .	98
8.3.3. Resultados . . . . .	99
8.4. Conclusiones . . . . .	101
<b>9. Conclusiones</b>	<b>103</b>
<b>Lista de trabajos publicados</b>	<b>107</b>
<b>A. Matriz de scattering</b>	<b>109</b>







# Capítulo 1

## Introducción a sistemas mesoscópicos

### 1.1. Sistemas Mesoscópicos: Escalas características de tiempo y longitud

El estudio de sistemas mesoscópicos ha generado un gran interés en los últimos años ya que por sus dimensiones constituyen una conexión entre los sistemas macroscópicos y los de escala atómica. Por este motivo, estos sistemas permiten comprender algunas características del límite macroscópico y como se llega a él. Las longitudes típicas de la escala mesoscópica van desde decenas de nm hasta algunos  $\mu\text{m}$ , y en ella se manifiesta la naturaleza cuántica de las partículas que conforman el sistema, como por ejemplo los electrones de un metal o un semiconductor. Típicamente estos sistemas mesoscópicos interactúan y se acoplan a otros de mayores dimensiones, y los efectos de esa interacción influyen sobre las propiedades de transporte electrónico. Por ejemplo, un sistema mesoscópico puede estar acoplado a reservorios de partículas, que son considerados macroscópicos, y la magnitud del acoplamiento entre ambos sistemas determina la intensidad del intercambio de partículas y energía.

Para hacer una distinción completa de los sistemas mesoscópicos no es suficiente con saber sus dimensiones típicas, sino que es necesario establecer la relación que existe entre las dimensiones físicas del sistema y otras longitudes características, que son: la longitud de onda de Fermi  $\lambda_F$ , el camino libre medio elástico  $l_e$  y la longitud de coherencia de fase  $L_\phi$ .

El camino libre medio elástico  $l_e = v_F \tau_e$  es la distancia promedio que recorre un electrón antes de ser dispersado elásticamente por un ion. En la expresión anterior  $v_F = \hbar k_F / m$  es la velocidad de Fermi y  $\tau_e$  es el tiempo medio entre colisiones elásticas.

La longitud de coherencia  $L_\phi$  es la distancia en la cual la función de onda de un electrón preserva la fase, y esta longitud es la que define el régimen mesoscópico. Por ejemplo, el término sistema mesoscópico se refiere a microestructuras en las cuales la función de onda de un electrón (en la aproximación de partícula independiente) preserva la fase en todo el sistema [1, p. 5]. Es decir que para estar en el régimen mesoscópico es necesario que la longitud de coherencia de fase  $L_\phi$  sea mayor que la longitud  $L$  del sistema. Por este motivo, los sistemas mesoscópicos son sistemas de transporte coherente.

La longitud de coherencia de fase se puede estimar como  $L_\phi = (D_e \tau_{in})^{1/2}$ , donde  $D_e = (1/3)v_F l_e$  es el coeficiente de difusión y  $\tau_{in}$  es el tiempo medio entre colisiones inelásticas. Los principales procesos que pueden dar lugar a colisiones inelásticas en semiconductores son la interacción electrón-fonón y electrón-electrón.

En término de las escalas de longitud mencionadas anteriormente, se pueden definir los diferentes regímenes de transporte cuántico coherente.

- Régimen Balístico: Para estar en este régimen es necesario que  $\lambda_F \ll L < l_e$ , y en este caso el electrón no sufre ningún tipo de dispersión (elástica o inelástica). Esto es cierto, por ejemplo, en micro/nanoestructuras semiconductoras como los puntos cuánticos. En estas estructuras, la aplicación de voltajes de gate permite confinar los electrones en forma controlada, así como también la manipulación del tamaño y forma de la región de confinamiento y el número de cargas dentro de la misma (ver Fig. 1.1).

En el caso de heteroestructuras de GaAs la condición de régimen balístico puede lograrse con cavidades de  $1 \mu m$  de longitud y a temperaturas menores a 1K. En estas heteroestructuras la longitud de onda de Fermi es relativamente grande comparada con la de la mayoría de los metales (aproximadamente 50 nm) y el tiempo de coherencia es lo suficientemente grande como para que se puedan observar fenómenos de interferencia cuántica de los electrones.

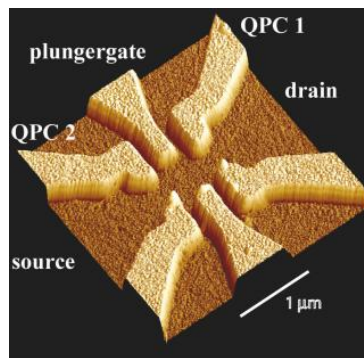


Figura 1.1: Imagen de un punto cuántico en la que se pueden ver los contactos sobre los que se aplican voltajes. La cantidad de electrones, el tamaño y la forma de la región de confinamiento pueden ser controlados por voltajes de gate como en los MOSFET (metal oxide semiconductor field effect transistor)

- Régimen Difusivo: Este régimen se da cuando  $\lambda_F \ll l_e \ll L$ , y en este caso el electrón es dispersado a lo largo de la muestra.

## 1.2. Bombeadores cuánticos y régimen adiabático

Desde fines del siglo pasado, la cantidad de trabajos orientados al entendimiento del transporte cuántico en sistemas mesoscópicos y nanoestructuras ha ido aumentando. Una característica importante de los sistemas mesoscópicos a bajas temperaturas es que los electrones mantienen su fase coherente a lo largo de toda la muestra, y las propiedades termodinámicas y de transporte son sensibles a los efectos de interferencia entre las funciones de onda de los electrones. Estos efectos cuánticos están presentes en superconductores y en pequeños sistemas metálicos, y es por eso que la naturaleza ondulatoria de los electrones juega un papel importante a la hora de estudiar las propiedades de transporte a través de redes periódicas (con electrones de Bloch), o en sistemas desordenados. En primer lugar

se pensó que los efectos de interferencia cuántica estaban presentes sólo cuando el camino libre medio del electrón era mayor que el tamaño del sistema, pero en 1984 Y. Gefen, Y. Imry, y M. Azbel [2] observaron que dichos efectos también existen en el límite de dispersión elástica fuerte.

En la última década se ha incrementado el interés en el estudio del transporte de inducido por campos dependientes del tiempo. Por este motivo, se han realizado experimentalmente una gran variedad de dispositivos tales como bombeadores electrónicos y de spin (electronic pumps - spin pumps), nanotubos de carbono y anillos con flujos dependientes del tiempo. Los bombeadores cuánticos son sistemas mesoscópicos cuyo mecanismo permite inducir transporte controlado de electrones entre reservorios, aún en aquellas situaciones en las que dichos reservorios poseen el mismo potencial químico. Dentro de las primeras realizaciones experimentales de una bomba cuántica se encuentra la fabricada por Pothier y colaboradores [3]. Dicha bomba consiste en la conexión en serie de dos puntos cuánticos (o quantum dots), y mediante la aplicación apropiada de distintos voltajes es posible inducir transporte en forma controlada.

En el experimento de Pothier, el transporte se lleva a cabo electrón por electrón variando el voltaje de dos puntos cuánticos mediante un potencial alterno de la forma  $V_L \sim \sin(\omega_0 t)$  en uno de los puntos, y combinado con otro desfasado respecto al primero de la forma  $V_R \sim \sin(\omega_0 t + \delta)$ . La amplitud de los voltajes se elige de manera tal que los puntos cuánticos se encuentren dentro del régimen de bloqueo de Coulomb (es decir que la energía necesaria para agregar un electrón al sistema es mayor que la temperatura y el voltaje aplicados), de esta forma se bloquea el transporte de carga y el mecanismo se controla sólo a través de  $V_L$  y  $V_R$ . En este ejemplo sencillo los electrones pueden agregarse uno por uno modificando el potencial de compuerta del punto cuántico aislado. En cada ciclo estos electrones se transfieren al segundo punto cuántico y luego al reservorio, lo que resulta en una corriente neta proporcional a la carga del electrón y la frecuencia del ciclo  $\omega_0$ . La corriente inducida de este modo pone de manifiesto la cuantización de la carga, ya que el transporte se realiza electrón por electrón y su dirección viene determinada por la diferencia de fase entre los voltajes aplicados. Sin embargo debemos mencionar que este tipo de bombas se ubica dentro de las que se denominan bombas mesoscópicas clásicas, ya que en ningún momento ocurren efectos de interferencia cuántica en el sistema y por ende no se observan fluctuaciones por efectos cuánticos en su funcionamiento.

El mecanismo de bombeo cuántico fue originalmente descrito por Thouless [4] para sistemas cerrados a temperatura nula. La teoría fue extendida a sistemas abiertos con temperatura finita por Spivak y colaboradores [5]. En este caso, el mecanismo propuesto consistía en una bomba cuántica fabricada con un solo punto cuántico, donde la corriente continua se genera como resultado de la variación adiabática de dos voltajes de compuerta que determinan la forma de la nanoestructura, o cualquier otro par de parámetros (como el nivel de Fermi o un campo magnético), que permitan modificar las propiedades cuánticas del sistema. La magnitud de la corriente inducida es proporcional a la frecuencia  $\omega_0$  a la que oscilan los dos parámetros, y (para pequeñas variaciones) al producto de las amplitudes. La dirección de la corriente dependerá, en este tipo de bombas, de las propiedades microscópicas (cuánticas) del sistema. Es fundamental comprender que en este caso el bombeo no es forzado por cambios cíclicos en las barreras y potenciales de los reservorios, sino por las alteraciones en la forma del potencial de confinamiento (u otros parámetros) que afectan el patrón de interferencia de los electrones coherentes dentro del punto cuántico, de ahí que a este tipo de bombas se las denomina bombas mesoscópicas

cuánticas. Al igual que en el caso de la bomba con dos puntos cuánticos en bloqueo de Coulomb, la dirección de la corriente en esta bomba puede invertirse revirtiendo las fases de los dos parámetros.

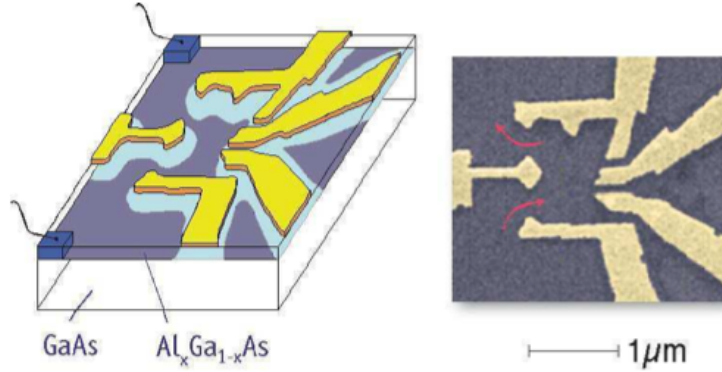


Figura 1.2: (izquierda) Esquema de un punto cuántico utilizado para estudiar el bombeo cuántico [6]. Aplicando un voltaje negativo a través de las compuertas tipo Schottky (de Au) sobre la superficie se logra el confinamiento de los electrones en el punto cuántico. Los contactos cuadrados de NiAuGe son integrados por annealing y constituyen el contacto ohmico entre los reservorios y el punto cuántico. (derecha) Imagen de microscopio electrónico de la bomba cuántica utilizada en [7].

Experimentalmente una bomba cuántica en un punto cuántico abierto ha sido realizada recientemente sobre una heteroestructura de GaAs-AlGaAs (Ver Fig. 1.2)[7], lo que provee una poderosa herramienta para estudiar las propiedades de sistemas mesoscópicos abiertos sin voltaje aplicado. Con el propósito de proveer una noción más cuantitativa sobre el fenómeno del bombeo cuántico, expondremos brevemente algunos resultados conocidos [8] que se obtienen para bombas cuánticas adiabáticas. Se dice que el bombeo es adiabático cuando el tiempo medio que pasa un electrón dentro del punto cuántico es mucho menor que el período de oscilación del bombeador. Si los voltajes de compuerta  $V_1$  y  $V_2$ , que definen la forma de un punto cuántico, varían periódicamente de modo que  $\delta V_1(t) = \delta V_1 \sin(\omega_0 t)$  y  $\delta V_2(t) = \delta V_2 \sin(\omega_0 t - \delta)$ , se tiene que la componente continua de la corriente  $J^{dc}$ , para frecuencias bajas de los potenciales de bombeo, se comporta de la siguiente forma:

$$J^{dc} \sim \omega_0 \sin(\delta) \delta V_1 \delta V_2. \quad (1.1)$$

Otro aspecto interesante del fenómeno del bombeo cuántico es el rol que poseen las simetrías al momento de establecer si es posible inducir una corriente continua a través de un determinado sistema. En estos tipos de bombas cuánticas, se rompen dinámicamente la simetría de inversión temporal y espacial cuando los voltajes oscilan en el tiempo con una diferencia de fase  $\delta \neq 0, \pi$ . Esta ruptura de simetría es la que genera una corriente continua [9].

### 1.3. Anillos Mesoscópicos

Una geometría simple y de interés en sistemas mesoscópicos es la anular, porque permite estudiar efectos de interferencia cuántica en transporte coherente, como el fenómeno

de oscilaciones de Aharonov-Bohm y de las corrientes persistentes. Este último efecto cuántico consiste en corrientes de equilibrio inducidas en un anillo aislado cuando éste es atravesado por un flujo magnético estático. En un anillo mesoscópico metálico las corrientes persistentes presentan oscilaciones como función del flujo magnético, con período  $\Phi_0 = hc/e$  ( $\Phi_0$  es el cuanto de flujo). Este efecto ha motivado muchos trabajos experimentales y teóricos en la última década. En 1993 D. Mailly, C. Chapelier y A. Benoit [10] presentaron el primer experimento con un anillo semiconductor en GaAs-AlGaAs con el que estudiaron la periodicidad de las corrientes persistentes como función del flujo magnético. En la Figura 1.3 se muestra una micrografía electrónica del dispositivo experimental, donde se puede observar el anillo y una espira utilizada para calibración.

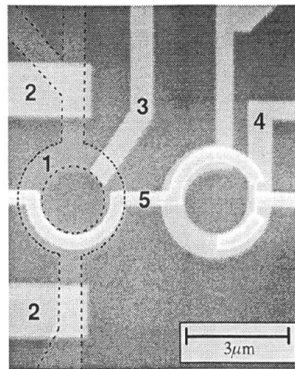


Figura 1.3: Micrografía electrónica del dispositivo experimental. A la izquierda se ve el anillo grabado en GaAs (la línea punteada ha sido agregada debido al mal contraste de la imagen) con los dos gates (2) y (3). A la derecha se encuentra la espira, que es utilizada para calibrar la sensibilidad a la corriente en el anillo .

Un anillo mesoscópico atravesado por un campo magnético es uno de los sistemas paradigmáticos para discutir el transporte cuántico electrónico. Numerosos experimentos [10–12] y trabajos teóricos [2, 13] dedicados a la investigación del efecto de Aharonov-Bohm y otros fenómenos relacionados originados por un flujo de un campo magnético estático, constituyen un hito en esta área de la física.

En el caso de campos magnéticos dependientes del tiempo, un ejemplo muy interesante es aquel en el que el flujo magnético se incrementa linealmente en el tiempo. En ese caso se induce un campo eléctrico constante a lo largo de la circunferencia del anillo, generando así una corriente dependiente del tiempo. En 1983 Büttiker, Imry y Landauer [14] estudiaron este problema motivados en la búsqueda de esquemas alternativos para calcular la conductancia de un sistema propuesto previamente por Landauer, que consistía en una muestra puesta entre dos reservorios de partículas con distinto potencial químico. Si se aísla dicho sistema, la corriente tiene una pura componente alterna (ac) debido a que los electrones producen oscilaciones de Bloch. Un tiempo después, Landauer y Büttiker mostraron que la inclusión de dispersión inelástica en el problema genera una corriente continua y disipación [15–25]. Una manera concreta de introducir dispersión inelástica fue propuesta por Büttiker [26], y consiste en conectar el anillo a un reservorio mediante un cable (conductor ideal). En este modelo, se tiene una separación espacial entre los procesos de dispersión elásticos (que ocurren en el anillo) y los procesos inelásticos (que ocurren en el reservorio).

La discusión de estos efectos, junto con los de desorden y la comparación entre la corriente que se induce en estos dispositivos y la generada por la aplicación de una diferencia de potencial continua, fueron el eje de numerosas investigaciones [27–29]. Por otra parte, la implementación experimental de un flujo magnético que varía linealmente en el tiempo no es muy práctica, y por eso es más usual en los laboratorios trabajar con flujos magnéticos oscilantes.

Un campo magnético armónico con frecuencia típica  $\omega_0$ , y que atraviesa un anillo conectado a un electrodo, fue considerado por Büttiker in Ref. [17]. Este trabajo se encontraba dedicado a la discusión del efecto combinado de scattering inelástico y una fuerza electromotriz (fem) inducida por el flujo magnético, que en conjunto inducen una corriente neta continua a lo largo de la circunferencia del anillo. El acoplamiento a los electrodos fue introducido para proveer un mecanismo concreto de scattering inelástico y decoherencia, los cuales llevan a tener una corriente inducida en el anillo con una componente continua [30]. Otros mecanismos para introducir decoherencia en el anillo sin utilizar acoplamientos con reservorios de electrones, fueron también considerados en [31]. En el caso de un anillo conectado a un único reservorio de partículas, se induce una corriente dependiente del tiempo entre el anillo y el reservorio, la cual tiene componente continua nula. Sin embargo, cuando son acoplados más reservorios adicionales, el anillo se comporta como un bombeador cuántico que induce una corriente entre los contactos con una componente neta continua. Precisamente en el Capítulo 6 analizamos el comportamiento de dicha corriente como función de la componente estática del flujo magnético armónico en el tiempo.

Como se comentó en la sección anterior, los bombeadores cuánticos han recibido mucha atención tanto de la comunidad teórica como experimental en los últimos años [4, 7–9, 32–49]. La idea básica de estos dispositivos es poder generar una corriente continua aún en ausencia de una diferencia de voltaje estática aplicada. Muchos de los dispositivos estudiados son estructuras mesoscópicas a las cuales se le aplica localmente voltajes de gate alternos con una diferencia de fase entre sí. La clave para inducir una corriente continua bajo estas condiciones es la ruptura de las simetrías de inversión espacial y temporal [9, 50–52]. Sin embargo, dependiendo del mecanismo empleado, la corriente inducida se puede comportar de diferente manera como función de la frecuencia  $\omega_0$  de oscilación de los campos externos aplicados. En particular, en el llamado régimen adiabático, la componente continua de la corriente tiene una dependencia lineal en esta frecuencia. Dicho régimen se puede alcanzar cuando se induce bombeo de carga en un dispositivo con al menos dos parámetros dependientes del tiempo [8], los cuales usualmente son dos potenciales alternos aplicados en diferentes lugares de la estructura y que oscilan con una diferencia de fase entre sí.

Mecanismos de bombeo en anillos atravesados por campos magnéticos estáticos y con voltajes alternos aplicados en algunos puntos de la circunferencia han sido estudiados en Refs. [9, 45–49]. Una propuesta para generar bombeo en el régimen adiabático es conectar dos anillos atravesados por flujos magnéticos armónicos en el tiempo y que oscilan con una diferencia de fase entre ellos [53]. A lo largo de la primera parte de este trabajo de tesis, en el Capítulo 6, estudiamos configuraciones que contienen unos o dos anillos conectados a dos reservorios de partículas diferentes. Ambos anillos son atravesados por flujos magnéticos armónicos de la forma  $\Phi(t) = \Phi^{dc} + \Phi^{ac}\cos(\omega_0 t + \delta)$  con componentes continua *dc* y alterna *ac*. Estos tipos de sistemas se comportan como bombeadores cuánticos, que inducen una corriente continua entre los dos reservorios. Uno de nuestros objetivos es identificar bajo



qué condiciones se espera tener un régimen adiabático en estos dispositivos.

Luego, para hacer un estudio más completo, extendimos el análisis considerando también una diferencia de potencial  $V$  aplicada entre los reservorios. Una vez estudiadas las condiciones para generar un régimen adiabático es interesante analizar, en vista de las simetrías ante inversión del campo magnético que establecen las relaciones de Onsager-Casimir en respuesta lineal para estas configuraciones, el comportamiento de la corriente continua inducida como función de la componente estática del flujo magnético  $\Phi^{\text{dc}}$ . En el régimen de respuesta lineal en la perturbación  $V$  y bajo condiciones de microreversibilidad, la corriente inducida resulta ser una función par ante la inversión de  $\Phi^{\text{dc}}$ . Las relaciones de Onsager-Casimir en respuesta lineal (ver Capítulo 4) establecen relaciones de simetría ante inversiones del campo magnético para la conductancia eléctrica y térmica. Para voltajes  $V$  más grandes, fuera de respuesta lineal, no hay razón para esperar tal simetría y por consiguiente se tiene una ruptura de las relaciones de Onsager. Esta violación de las relaciones de reciprocidad tiene importantes consecuencias en efectos termoeléctricos [54]. Muchos trabajos recientes se han orientado al estudio de mecanismos de ruptura de las simetrías de Onsager [55–60]. En muchos de estos casos, la fuente del comportamiento asimétrico de la corriente como función de  $\Phi^{\text{dc}}$  fue identificada como el voltaje efectivo inducido en la estructura como consecuencia de interacciones de Coulomb. También hay resultados experimentales para el caso de anillos atravesados por flujos estáticos y con una diferencia de voltaje  $V$  aplicada entre los reservorios. Estos resultados fueron apoyados por argumentos de teoría semi-clásica, que indican que las relaciones de Onsager-Casimir no son en general válidas para la conductancia asociada a las corrientes de rectificación. [59, 60] En este contexto, la segunda meta del Capítulo 6 es analizar las simetrías de la corriente ante inversión de la componente estática del flujo magnético en configuraciones que contengan anillos atravesados por flujos alternos. Con este fin, definimos los coeficientes de transporte para caracterizar la corriente continua  $dc$  y analizar las propiedades de simetría de los coeficientes como función de  $\Phi^{\text{dc}}$ .

## 1.4. Capacitores cuánticos y emisores de electrones

En los últimos años el estudio de la dinámica de sistemas que exhiben una respuesta puramente  $ac$ , debido a que generan corrientes con valor medio temporal nulo, se ha convertido en un atractivo tanto de trabajos teóricos como experimentales [61–63]. Estos sistemas son llamados capacitores cuánticos porque en promedio temporal no transmiten carga. En este marco, experimentos recientes han logrado la inyección controlada de electrones de a uno en un conductor cuántico usando un punto cuántico conectado a un conductor mediante una barrera túnel [64]. La emisión de electrones es controlada por un potencial dependiente del tiempo que se repite periódicamente, de manera que en cada ciclo el sistema emita y absorba un electrón. En la Fig.1.4 se encuentra esquematizado este proceso. La emisión de un electrón (ver (2)) ocurre cuando el potencial logra mover un nivel de energía ocupado por encima del nivel de Fermi del reservorio (continuo fermiónico). En el proceso opuesto (3), el nivel de energía vuelve a estar por debajo de la energía Fermi, y un electrón entra en el sistema dejando un agujero en el mar de Fermi. Como luego de completado un período no hay carga neta transmitida, se puede identificar a estos sistemas como capacitores cuánticos. La ventaja que presentan estos sistemas, frente a los que se basan en la aplicación de voltajes de bias para generar corrientes, es que permiten emitir electrones bien separados en espacio y tiempo de manera controlada.

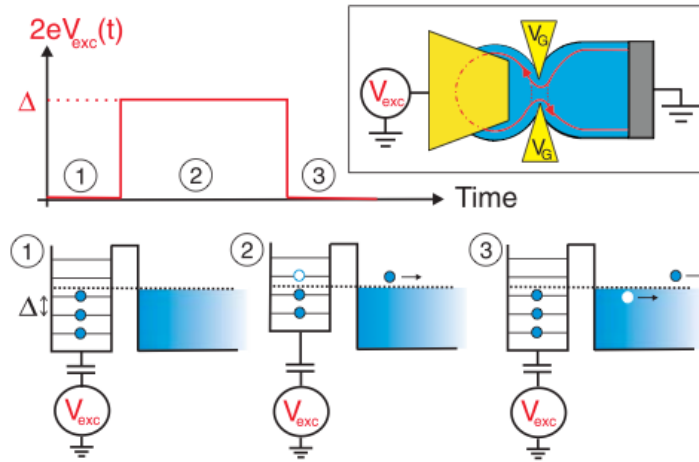


Figura 1.4: Esquema del proceso de emisión y absorción controlada de electrones de a uno, logrado experimentalmente en la Ref.[64]. Se utiliza un punto cuántico con varios niveles conectado a un conductor (cuyo mar de Fermi se encuentra simbolizado en celeste) por una barrera túnel. Los niveles del punto cuántico se mueven en el tiempo por la aplicación de un potencial cuadrado periódico  $V_{exc}(t)$ . En (1) todos los niveles ocupados del punto cuántico están por debajo del nivel de Fermi, de manera que no se produce transferencia de carga. En (2), un electrón es emitido, mientras que en (3) se muestra el proceso inverso.

Esta es una de las cualidades que hace que los capacitores cuánticos sean dispositivos interesantes de estudiar para el desarrollo de electrónica cuántica.

Por otro lado, el creciente interés es el desarrollo de materiales con alta eficiencia termoeléctrica dio lugar a la investigación de varios aspectos relacionados al transporte de energía en sistemas de electrones. Por ejemplo, en las Refs.[62, 65] se discute la producción de calor en motores de escala nanométrica, mientras que el bombeo de calor contra gradientes térmicos es tratado en Ref. [66]. También se ha logrado generalizar el concepto de temperatura local en bombecedores cuánticos ac [67] y se ha predicho la existencia de una resistencia térmica universal para transporte dinámico a bajas temperaturas [68].

En base a esto, durante la segunda parte de esta tesis desarrollada en el Capítulo 7, nos centramos en el estudio de la producción en el tiempo de energía y su redistribución en sistemas cuánticos coherentes de electrones. Para ello, consideramos un sistema compuesto por un nivel resonante forzado periódicamente en el tiempo por una fuente de energía externa, y acoplado a un continuo fermiónico. Este modelo simple contiene los ingredientes básicos para entender el intercambio dinámico de energía en capacitores cuánticos que se comportan como emisores de partículas individuales. Mostramos que el acoplamiento entre las diferentes partes del sistema no solo provee un mecanismo necesario para el intercambio de partículas, sino que también contribuye al transporte de energía. Esta contribución es de naturaleza puramente ac. Aunque el promedio temporal de esta energía es nulo, su almacenamiento temporal no, teniendo así la región del contacto solo un aporte dinámico a la energía. También discutimos qué porción del flujo de energía dependiente del tiempo puede ser identificado como calor, de acuerdo con las leyes fundamentales de la termodinámica.

## 1.5. Máquinas cuánticas

La relación existente entre las corrientes de partículas y de energía se encuentra en el corazón de la teoría termoeléctrica [54, 69–72]. Para sistemas con pequeños gradientes de temperatura y voltaje dc, las relaciones en respuesta lineal entre las corrientes y las fuerzas aplicadas constituyen las bases para describir fenómenos termoeléctricos. Cuando estas relaciones son combinadas con los principios básicos de la termodinámica, la teoría resultante tiene simplicidad y fuerte poder predictivo. Específicamente, permite caracterizar la eficiencia de numerosas máquinas termoeléctricas en término de la figura de mérito introducida por Ioffe en 1949 [73].

Desde hace mucho tiempo ha habido un gran interés en las máquinas microscópicas y nanoscópicas, sin embargo, la incorporación a la teoría termoeléctrica de efectos cuánticos genuinos asociados al transporte coherente en nano-dispositivos sigue representando un gran desafío aún hoy en día. Si hablamos de interés por estos dispositivos de pequeña escala, una de las anécdotas más conocidas es el concurso propuesto por Richard Feynman, en el que prometió un premio de \$1000 para el que descubriese una máquina que entre dentro de un cubo de  $1/64$ " de lado [74]. Si bien el concurso de Feynman representó una inspiración en el campo de la nanotecnología, no logró generar un gran avance intelectual ya que se llevó a cabo poco después de 1960. Luego de muchos años, recién en 2003, se dio a conocer la realización de un prototipo de nano-motor que utilizaba hojas de oro montadas sobre nanotubos de carbono [75].

Si bien hasta ahora experimentalmente solo fue investigado en sistemas cuánticos con potenciales ac aplicados el bombeo de carga, es sabido teóricamente que también se inducen corrientes de energía en este tipo de sistemas [76]. Al aplicar campos externos dependientes del tiempo, las fuerzas ac generan transporte de energía y calor aún en ausencia de gradientes térmicos y diferencias de potencial químico. Estos procesos dan lugar a intercambio de trabajo entre las diferentes fuerzas aplicadas y a mecanismos por los cuales se puede extraer energía útil del sistema para hacer trabajo en contra de las fuerzas externas [65]. Una posible realización de la idea de transferencia de trabajo entre fuentes externas fue considerada en la Ref. [77], en la que se tiene una cavidad formada por dos capacitores cuánticos unidos a un estado de borde Hall y dispuestos en serie. En este sistema, el trabajo hecho por la fuerza ac del primer capacitor (al inyectar partículas en el estado de borde) es transferido y utilizado en el segundo capacitor para realizar trabajo en contra de las fuerzas ac aplicadas sobre él.

Por otro lado, la posibilidad de bombear calor en contra de gradientes térmicos mediante la aplicación de fuerzas ac externas, da lugar a las bases del funcionamiento de máquinas cuánticas que operan como refrigeradores. Por ejemplo, podemos imaginar situaciones en las que se conecta un sistema cuántico a reservorios macroscópicos a diferentes temperaturas, y además se aplican al sistema fuerzas dependientes del tiempo que realizan trabajo sobre él y dan lugar a procesos de bombeo de carga y energía. Entonces podemos considerar a este bombeador cuántico como una máquina que intercambia calor entre dos fuentes a diferente temperatura, mientras se suministra trabajo al sistema. Esta máquina puede operar como un refrigerador, generando un flujo de calor neto desde el reservorio de menor temperatura hacia el de mayor. En un modo inverso, también puede operar como una máquina térmica cuando se utiliza la corriente de calor, inducida por un gradiente de temperatura, para producir trabajo en contra de las fuerzas externas. Un manera intuitiva de entender el funcionamiento de estas máquinas es en analogía con la

máquina de Stirling. Para esta máquina existen muchas configuraciones, como por ejemplo la tipo Alpha ilustrada en la Fig. 1.5, que consta de dos cilindros. Esta máquina trabaja entre dos fuentes térmicas, una es de mayor temperatura que la otra y calienta el gas dentro de un cilindro. La otra fuente, la fría, está en contacto con un segundo cilindro y su temperatura puede ser la ambiental. Los dos cilindros tienen pistones que permiten variar su volumen, y se encuentran unidos a un cigüeñal que desfasa su movimiento en 90 grados. La máquina es diseñada de modo que cuando opera como máquina térmica, el gas es comprimido en el lado más frío y expandido en el cilindro en contacto con la fuente caliente, resultando este proceso en una conversión neta del calor en trabajo. También se puede forzar el cigüeñal para hacer operar la máquina en forma inversa (a este modo los llamamos bombeador de calor), convirtiendo trabajo en un flujo de calor neto que va desde la fuente fría a la caliente.

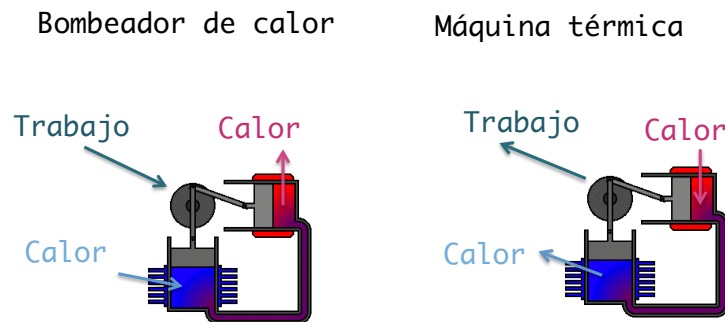


Figura 1.5: Posible realización de la máquina de Stirling, llamada tipo Alpha. Esta máquina tiene dos cilindros con gas en su interior, cuyos volúmenes pueden variar por el movimiento de los pistones unidos al cigüeñal. Cuando funciona como máquina térmica el gas es comprimido en el lado más frío y expandido en el cilindro en contacto con la fuente caliente, resultando este proceso en una conversión neta del calor en trabajo (el calor fluye de de fuente caliente a la fría). En modo inverso, bombeador de calor, se convierte trabajo en un flujo de calor neto que va desde la fuente fría a la caliente

De manera análoga a estos procesos, la inducción de corriente de carga mediante la aplicación de una diferencia de voltaje puede ser utilizada como mecanismo para generar trabajo útil. En este caso se dice que el sistema opera como un motor. La operación inversa corresponde a un generador cuántico, en el que se logra bombear carga en contra de una diferencia de voltaje mediante la aplicación de campos externos. El modo operacional de los motores y generadores puede ser entendido fácilmente en analogía con la máquina de Arquímedes. Esta consiste en un tubo que tiene dentro un tornillo giratorio que se mueve con el flujo de agua (ver en la Fig. 1.6 el modo “motor”). En su modo inverso, el agua es bombeada en contra de la gravedad girando el tornillo (ver en la Fig. 1.6 el modo “bombeador”). Este funcionamiento es análogo al del modo generador cuántico).

Por lo tanto, mediante una adecuada arquitectura, estas configuraciones pueden ser útiles para transformar trabajo eléctrico en mecánico y viceversa, proporcionando las bases para el funcionamiento de nano-máquinas [78–83]. Por ejemplo, en la Fig. 1.7 esquematizamos dos propuestas conceptuales de motores cuánticos. En la parte (a) mostramos un motor basado en un punto cuántico caótico cuya forma es variada mediante la aplicación

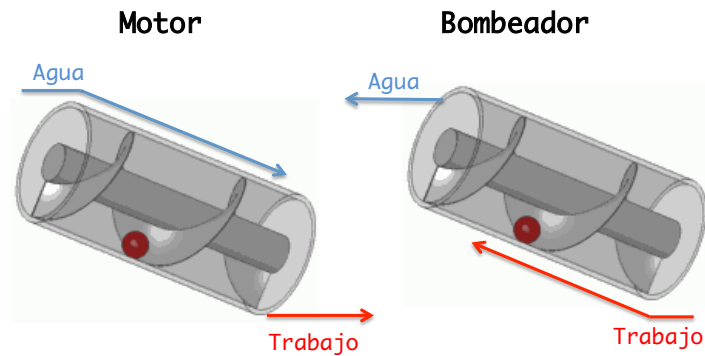


Figura 1.6: Máquina de Arquímedes. Consiste en un tubo que tiene dentro un tornillo giratorio. Esta máquina tiene dos modos operacionales, el modo motor y bombeador. Cuando funciona como motor, el tornillo del interior se mueve por el flujo de agua (lado izquierdo). En el modo inverso, bombeador, el agua es bombeada en contra de la gravedad girando el tornillo (lado derecho).

de voltajes de gate dependientes del tiempo. Estos voltajes son proporcionados por una serie periódica de cargas situadas alrededor de una rueda, que modifican en dos lugares al punto cuántico al acercarse. La corriente que fluye a través del punto cuántico va a producir entonces el movimiento de la rueda. En forma alternativa, podemos basar un motor cuántico en un bombeador de Thouless, como se muestra en la Fig.1.7 (b). Un cable cuántico de un solo canal ubicado próximo a una cinta transportadora con cargas fijas dispuestas periódicamente. Las cargas inducen en el cable cuántico un potencial periódico, que se mueve como lo hace la cinta transportadora induciendo así una corriente en el cable.

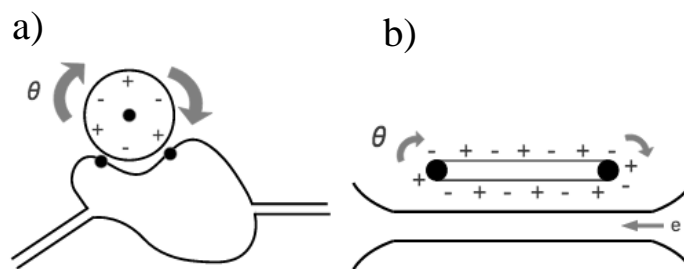


Figura 1.7: Motores cuánticos adiabáticos considerados en la Ref. [78]. (a) motor construido en base a un punto cuántico caótico y en (b) utilizando un bombeador de Thouless. Cuando una diferencia de voltaje es aplicada a los bombeadores, la corriente que se genera hace que la rueda gire un ángulo  $\theta$ .

La incorporación de efectos cuánticos dentro de la teoría termoeléctrica es esencial para poder caracterizar los modos operacionales de estas máquinas cuánticas en términos de eficiencias y figuras de mérito. Es por eso que en la última parte de esta tesis nos pro-

pusimos estudiar cómo incluir efectos de bombeo adiabático cuántico dentro de una teoría termoeléctrica generalizada que permita explorar las relaciones fundamentales en máquinas cuánticas que operan como motores, generadores, máquinas térmicas y bombeadores de calor (o refrigeradores). Nuestra contribución es extender la teoría de respuesta lineal, introducida en los Capítulos 3 y 4, a sistemas bajo la acción de potenciales dependientes del tiempo adiabáticos, incluyendo al flujo de energía entre los electrones y las fuerzas  $ac$  en pie de igualdad con las corrientes de carga y calor. La extensión de esta teoría nos permite describir la forma en que opera un dispositivo cuántico genérico con dos terminales y potenciales periódicos externos aplicados. El dispositivo puede operar como un motor, generador, una máquina térmica o un bombeador de calor. Específicamente en el Capítulo 8, derivamos relaciones de Onsager no convencionales presentando a su vez una teoría termoeléctrica generalizada con una apropiada figura de mérito para sistemas bajo la acción de potenciales alternos, gradientes de temperatura y diferencias de potencial químico.

Estudios recientes sobre el comportamiento termoeléctrico de sistemas con potenciales  $ac$ , consideraron bombeadores y capacitores cuánticos enfocándose en la interacción usual entre las corrientes de carga y calor [84–87], e investigaron el desempeño termoeléctrico en los distintos modos operacionales. Todos estos modos operacionales fueron estudiados como procesos separados e independientes y no como parte de una teoría unificada, en la que cada modo corresponda a un régimen de funcionamiento. En nuestro caso, habiendo ya estudiado en la primera parte de la tesis las propiedades de transporte de carga y calor en sistemas con potenciales alternos, nos enfocamos en el análisis de la relación que existe entre estas corrientes y el trabajo intercambiado con las fuerzas externas  $ac$ . Esto nos condujo a la presentación de relaciones de Onsager no convencionales válidas incluso para sistemas con interacciones, y a la formulación de una teoría termoeléctrica generalizada que incluye no solamente a las corrientes de carga y calor (como en el caso de la teoría usual) sino que también considera al flujo de energía entre el sistema de electrones y las fuerzas  $ac$ . Mostramos además que esta teoría termoeléctrica generalizada permite caracterizar todos los modos operacionales, en término de eficiencias y figuras de mérito, como diferentes regímenes de funcionamiento dentro de una única teoría.

Este trabajo se encuentra organizado de la siguiente manera: Los primeros tres capítulos están destinados a presentar los fundamentos teóricos utilizados en esta tesis. En el Capítulo 2 repasamos la teoría de sistemas fuera del equilibrio en el marco del formalismo de las funciones de Green de Keldysh y su aplicación al estudio de transporte  $dc$  en sistemas con potenciales periódicos. Luego en el Capítulo 3 presentamos la teoría de respuesta lineal, y en el Capítulo 4 desarrollamos la teoría termoeléctrica convencional. En el Capítulo 5 mostramos los desarrollos formales realizados en esta tesis para el cálculo de las corrientes de carga y energía dependientes del tiempo. El Capítulo 6 está destinado a presentar los resultados que obtuvimos en el estudio de bombeo de carga en sistemas con anillos mesoscópicos atravesados por campos magnéticos  $ac$ . En el siguiente capítulo estudiamos la transferencia dinámica de energía en sistemas con potenciales alternos que se comportan como capacitores cuánticos. Luego en el Capítulo 8 presentamos la respuesta adiabática y la teoría termoeléctrica generalizada, y por último en el Capítulo 9 se resumen las principales conclusiones y resultados de esta tesis.

## Bibliografía

- [1] Pier A. Mello, Narendra Kumar, Quantum Transport in Mesoscopic Systems, Oxford (2004).
- [2] Y. Gefen, Y. Imry and M. Ya. Azbel, Quantum Oscillations and the Aharonov-Bohm Effect for Parallel Resistors, *Phys. Rev. Lett.*, 52, 2, (1984).
- [3] H. Pothier, P. Lafarge, C. Urbina, D. Esteve, and M. H. Devoret, Single-Electron Pump Based on Charging Effects, *Europhys. Lett.* 17, 249 (1992).
- [4] D. J. Thouless, Quantization of Particle Transport, *Phys. Rev. B* 27, 6083 (1983).
- [5] B. Spivak, F. Zhou, and M. T. Beal Monod, Mesoscopic Mechanisms of the Photo-voltaic Effect and Microwave Absorption in Granular Metals, *Phys. Rev. B* 51, 13226 (1995).
- [6] M. Switkes, PhD Thesis, Decoherence and Adiabatic Transport in Semiconductor Quantum Dots (1999).
- [7] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman and A. C. Gossard, An Adiabatic Quantum Electron Pump, *Science* 283, 1905 (1999).
- [8] P. W. Brouwer, Scattering approach to parametric pumping, *Phys. Rev. B* 58, 10135 (1998).
- [9] L. Arrachea, *Phys. Rev. B* **72** 121306 (2005).
- [10] D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, Experimental Observation of Persistent Currents in a GaAs-AlGaAs Single loop, *Phys. Rev. Lett.*, 70, 13, (1993).
- [11] R. Deblock, R. Bel, B. Reulet, H. Bouchiat, and D. Mailly, *Phys. Rev. Lett.* 86, 206803 (2002)
- [12] V. Chandrasekhar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen, W. J. Gallagher, and A. Kleinsasser, *Phys. Rev. Lett.* 67, 3578 (1991).
- [13] Y. Imry, "Directions in Condensed Matter Physics", edited by G. Grinstein, E. Mazenko (World Scientific, Singapore, 1986).
- [14] Markus Büttiker, Y. Imry, and R. Landauer, *Phys. Lett.* 96A, 365 (1983)
- [15] R. Landauer, *IBM J. Res. Develop.* 1, 233 (1957); R. Landauer, *Phil. Mag.* 21, 863 (1970).
- [16] M. Büttiker and R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* 54, 2049 (1985).
- [17] M. Büttiker, *Phys. Rev. B* 32, 1846 (1985).
- [18] D. Lenstra and W. van Haeringen, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1623 (1986).
- [19] R. Landauer, *Phys. Rev. B* 33, 6497 (1986).
- [20] R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2150 (1987).

- 
- [21] Y. Gefen and D. J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **59**, 1752 (1987).
- [22] D. Lubin Y. Gefen and I. Goldhirsch, Phys. Rev. B **41**, 4441 (1990).
- [23] G. Blatter and D. A. Browne, Phys. Rev. B **37**, 3856 (1988).
- [24] P. Ao, Phys. Rev. B **41**, 3998 (1990).
- [25] J. Avron and J. Nemirovsky, Phys. Rev. Lett. **68**, 2212 (1992).
- [26] M. Büttiker, Small normal - metal loop coupled to an electron reservoir, Phys. Rev. B **32**, 3 (1985).
- [27] L. Arrachea, Phys. Rev. B **66**, 045315 (2002).
- [28] L. Arrachea, Phys. Rev. B **70**, 155407 (2004).
- [29] F. Foieri, L. Arrachea and M. J. Sánchez, Phys. Rev. Lett. **99**, 266601 (2007).
- [30] Cong-Hua Yan, Lian-Fu Wei Jour. Phys. Cond. Matt. **22**, 185301 (2010).
- [31] F. Marquardt and C. Bruder, Phys. Rev. B **65**, 125315 (2002).
- [32] M. Büttiker, H. Thomas, and A. Pretre, Z. Phys. B: Cond. Mat. **94**, 133 (1994).
- [33] B. L. Altshuler and L. I. Glazman, Science **283**, 1864 (1999).
- [34] P. Sharma and C. Chamon, Phys. Rev. Lett. **87**, 096401 (2001).
- [35] L. DiCarlo, C. M. Marcus, and J. S. Harris Jr, Phys. Rev. Lett. **91**, 246804 (2003).
- [36] M. D. Blumenthal, *et al.*, Nat. Phys. **3**, 343 (2007).
- [37] P. J. Leek, Phys. Rev. Lett. **95**, 256802 (2005).
- [38] E. R. Mucciolo, C. Chamon, and C. M. Marcus, Phys. Rev. Lett. **89**, 146802 (2002).
- [39] S. K. Watson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 258301 (2003).
- [40] F. Giazotto *et al.*, Nature Phys. **7**, 857 (2011).
- [41] M. Moskalets, M. Büttiker, Phys. Rev. B **66**, 035306 (2002).
- [42] L. Arrachea, Phys. Rev. B **72**, 125349 (2005).
- [43] L. Arrachea, Phys Rev. B **75**, 035319 (2007).
- [44] L. Arrachea and M. Moskalets, Phys. Rev. B **74**, 245322 (2006).
- [45] T. A. Shutenko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **61**, 10 366 (2000).
- [46] I. L. Aleiner, B. L. Altshuler, and A. Kamenev, Phys. Rev. B **62**, 10 373 (2000).
- [47] M. Vavilov, V. Ambegaokar, and I. L. Aleiner, Phys. Rev. B **63**, (2001).
- [48] M. Moskalets, M. Büttiker, Phys. Rev. B **72**, 035324 (2005).



- 
- [49] L. E. Foa Torres, Phys. Rev. B **72**, 245339 (2005).
- [50] S. Flach, O. Yevtushenko and Y. Zolotaruk, Phys. Rev. Lett. **84**, 2358 (2000).
- [51] S. Denisov, S. Flach, A. A. Ovchinnikov, O. Yevtushenko, and Y. Zolotaryuk, Phys. Rev. E, **66**, 041104 (2002).
- [52] S. Flach, Y. Zolotaryuk, A. E. Miroshnickenko and M. V. Fistul, Phys. Rev. Lett. **88**, 184101 (2002).
- [53] D. Shin and J. Hong, Phys. Rev. B **70**, 073301 (2004).
- [54] G. Benenti, K. Saito, and G. Casati, Phys. Rev. Lett. **106**, 230602 (2011).
- [55] A. Löfgren, C. A. Marlow, I. Shorubalko, R. P. Taylor, P. Omling, L. Samuelson, and H. Linke, Phys. Rev. Lett. **92**, 046803 (2004).
- [56] J. Wei, M. Shimogawa, Z. Wang, I. Radu, R. Dormaier, and D. H. Cobden, Phys. Rev. Lett. **95**, 256601 (2005).
- [57] C. A. Marlow, R. P. Taylor, M. Fairbanks, I. Shorubalko, and H. Linke, Phys. Rev. Lett. **96**, 116801 (2006).
- [58] C. Ojeda-Aristizabal, M. Monteverde, R. Weil, M. Ferrier, S. Guéron, and H. Bouchiat, Phys. Rev. Lett. **104**, 186802 (2010).
- [59] L. Angers, E. Zakka-Bajjani, R. Deblock, S. Guéron, H. Bouchiat, A. Cavanna, U. Gennser and M. Polianski, Phys. Rev. B **75**, 115309 (2007).
- [60] L. Angers, A. Chepelianskii, R. Deblock, B. Reulet, and H. Bouchiat, Phys. Rev. B **76**, 075331 (2007).
- [61] J. Splettstoesser, S. Ol'khovskaya, M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **78**, 205110 (2008)
- [62] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **80**, 081302(R) (2009)
- [63] M. Moskalets , P. Samuelsson and M. Büttiker (2008). Phys. Rev. Lett. **100**(8), 086601.
- [64] G. Fève, A. Mahé A, J.M. Berroirm, T. Kontos, B. Plaçais, D.C. Glattli, A. Cavanna, B. Etienne and Y. Jin, Science **316** 1169 (2007).
- [65] L. Arrachea, M. Moskalets, and L. Martin-Moreno, Phys. Rev. B **75**, 245420 (2007).
- [66] D. Segal and A. Nitzan, Phys. Rev. E **73**, 026109 (2006).
- [67] A. Caso, L. Arrachea, and G.S. Lozano, Phys. Rev. B **83**, 165419 (2011).
- [68] J.S. Lim, R. López and D. Sánchez, Phys. Rev. B (in press, 2013).
- [69] L. Onsager, Phys. Rev. **38**, 2265 (1931); M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986); P. N. Butcher, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 4869 (1990).

- 
- [70] G. Benenti, G. Casati, T. Prosen, K. Saito, Colloquium: Fundamental aspects of steady state heat to work conversion, arXiv:1311.4430 (2013).
- [71] K. Brandner, K. Saito, and U. Seifert, Phys. Rev. Lett. **110**, 070603 (2013).
- [72] O. Entin-Wohlman, Y. Imry, and A. Aharony, Phys. Rev. B **91**, 054302 (2015).
- [73] M. V. Vedernikov and E. K. Iordanishvili, 17th Int. Conf. on Thermoelectrics vol 1, pp. 37-42 (1998)
- [74] R.P. Feynman, Engineering and Science 23, 22 (1960).
- [75] A.M. Fennimore, T.D. Yuzvinsky, W.-Q. Han, M.S. Fuhrer, J. Cumings, and A. Zettl, Nature 424, 408 (2003)
- [76] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **69**, 205316 (2004).
- [77] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **80**, 081302(R) (2009).
- [78] R. Bustos-Marun, G. Refael and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **111**, 060802 (2013).
- [79] A. M. Fennimore, T. D. Yuzvinsky, W. Q. Han, M. S. Fuhrer, J. Cumings, and A. Zettl, Nature **58**, 408410, (2003).
- [80] A. del Campo, J. Goold, and M. Paternostro, Scientific Reports **4**, 6208 (2014).
- [81] F. Mazza, R. Bosisio, G. Benenti, V. Giovannetti, R. Fazio, and F. Taddei, New J. Phys. **16**, 085001 (2014).
- [82] T. E. Humphrey, R. Newbury, R. P. Taylor, and H. Linke, Phys. Rev. Lett. **89**, 116801 (2002).
- [83] T. E. Humphrey and H. Linke, Phys. Rev. Lett. **94**, 096601 (2005).
- [84] S. Juergens, F. Haupt, M. Moskalets, and J. Splettstoesser, Phys. Rev. B **87**, 245423 (2013).
- [85] A. Crépieux, F. Simkovic, B. Cambon, F. Michelini, Physical Review B **83**, 153417 (2011).
- [86] J. S. Lim, R. López, and D. Sánchez, Phys. Rev. B **88**, 201304(R) (2013).
- [87] A.-M. Daré, P. Lombardo, arXiv:1509.05606 (2015).

# Capítulo 2

## Fundamentos teóricos I: Funciones de Green y su aplicación al estudio de transporte en sistemas con potenciales periódicos

En este capítulo desarrollamos el formalismo teórico utilizado en esta tesis para el estudio de transporte dependiente del tiempo de carga y energía en sistemas mesoscópicos. Para ello, repasamos primero el formalismo de funciones de Green para sistemas en equilibrio y fuera del equilibrio, y luego explicamos como aplicarlo para el estudio de transporte de en sistemas con potenciales periódicos.

### 2.1. Formalismo de las funciones de Green

Las funciones de Green son apropiadas para estudiar las propiedades de un sistema descrito por un Hamiltoniano que no puede ser resuelto en forma exacta. En cambio, la aplicación de esta técnica no es necesaria a la hora de resolver un problema que tiene solución exacta porque se pueden utilizar otros métodos teóricos en ese caso.

Entonces, para introducir esta técnica vamos a suponer que uno está tratando de resolver un Hamiltoniano que puede ser expresado como:

$$H = H_0 + V , \tag{2.1}$$

donde  $H_0$  es el Hamiltoniano que puede ser resuelto en forma exacta, y  $V$  contiene las interacciones. Uno trata de elegir  $H_0$  de manera que los efectos producidos por  $V$  sean pequeños (perturbativos). El procedimiento básico en teoría de muchos cuerpos es comenzar con un sistema que es descrito solamente por el Hamiltoniano  $H_0$ , y luego introducir los efectos de  $V$ . Entonces se realizan los cálculos para ver como la introducción de  $V$  cambia las propiedades del sistema.

En esta sección desarrollaremos el formalismo de funciones de Green, tanto para sistemas en equilibrio como para sistemas fuera del equilibrio. Sin embargo, es necesario repasar antes algunos conceptos sobre los tres tipos de representaciones que hay en mecánica cuántica para operadores y estados.

### 2.1.1. Representación de Schrödinger, Heisenberg e Interacción [1, cap.2-sec.2.1]

#### Schrödinger

En esta representación el estado del sistema evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle . \quad (2.2)$$

Y la solución a la ecuación anterior se reduce a:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{(-i/\hbar)Ht} |\Psi(0)\rangle . \quad (2.3)$$

El uso de las expresiones anteriores requiere suponer dos cosas:

- Las funciones de onda son dependientes del tiempo (aunque sea sólo en el factor exponencial).
- Los operadores son constantes en el tiempo.

De esta manera, la dependencia temporal de los valores esperados de una magnitud observable está determinada completamente por el estado del sistema y no por los operadores

$$\langle O \rangle(t) = \langle \Psi(t) | O | \Psi(t) \rangle . \quad (2.4)$$

#### Heisenberg

Esta es otra manera de resolver los problemas en mecánica cuántica y conduce a los mismos resultados que la representación anterior. Es decir, que los valores medios de los operadores en ambas representaciones son iguales.

Las propiedades de la representación de Heisenberg son las siguientes:

- Las funciones de onda son independientes del tiempo.
- Los operadores tienen una dependencia en el tiempo de la forma

$$O(t) = e^{(i/\hbar)Ht} O(0) e^{(-i/\hbar)Ht} . \quad (2.5)$$

En este caso, se trata de resolver la ecuación de movimiento que cumplen los operadores

$$\frac{\partial}{\partial t} O(t) = \frac{i}{\hbar} [H, O(t)] . \quad (2.6)$$

#### Interacción

Por último, la representación de Interacción distribuye la dependencia temporal tanto en los estados del sistema como en los operadores. Una característica importante es que los operadores evolucionan sólo por influencia de la parte no perturbativa  $H_0$ , mientras que los estados lo hacen según las interacción  $V$ . En esta notación se define la dependencia temporal de la siguiente manera:

- Las funciones de onda evolucionan como

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = e^{(i/\hbar)H_0t} e^{(-i/\hbar)Ht} |\Psi(0)\rangle . \quad (2.7)$$

- Los operadores tienen una dependencia temporal del tipo

$$\hat{O}(t) = e^{(i/\hbar)H_0t} O e^{(-i/\hbar)H_0t} . \quad (2.8)$$

Al igual que en las representaciones anteriores, la dependencia temporal fue elegida de manera que los elementos de matriz de los operadores sean los mismos.

En la ecuación (2.7) se introdujo el operador llamado evolución temporal, que es definido como  $U(t) = e^{(i/\hbar)H_0t} e^{(-i/\hbar)Ht}$ . Este operador obedece una ecuación diferencial que puede ser escrita en la representación de interacción como:

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{V}(t) U(t) . \quad (2.9)$$

Integrando la ecuación anterior respecto al tiempo, se llega a

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i/\hbar)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n) . \quad (2.10)$$

En este punto es interesante introducir el operador orden temporal  $T$ , que se define como:

$$T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2)] = \Theta(t_1 - t_2) \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) + \Theta(t_2 - t_1) \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_1) . \quad (2.11)$$

Volviendo a la expansión (2.10) y haciendo tender todos los extremos de integración a  $t$ , se obtiene la siguiente expresión para  $U(t)$

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n)] , \quad (2.12)$$

que puede ser abreviada escribiéndola como:

$$U(t) = T \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right] . \quad (2.13)$$

También se puede definir un operador  $S$  que cambie la función de onda de  $\hat{\Psi}(t')$  a  $\hat{\Psi}(t)$  de la siguiente manera:

$$\hat{\Psi}(t) = S(t, t') \hat{\Psi}(t') , \quad (2.14)$$

con

$$S(t, t') = U(t) U^\dagger(t') . \quad (2.15)$$

Este operador cumple con tres propiedades:

- $S(t, t) = 1 = U(t) U^\dagger(t)$
- $S^\dagger(t, t') = S(t', t)$

$$\blacksquare S(t, t')S(t', t'') = S(t, t'')$$

Finalmente, si se deriva el operador  $S(t, t')$  respecto a  $t$  se obtiene una ecuación diferencial como la 2.9, cuya solución es:

$$S(t, t') = T \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right]. \quad (2.16)$$

### 2.1.2. Funciones de Green para sistemas en equilibrio

Comenzaremos esta sección definiendo la función de Green [2] (o propagador) de un sistema perturbado con un Hamiltoniano del tipo (2.1).

$$G(1, 1') = -i \langle \Psi_0 | T [\Psi_H(1) \Psi_H^\dagger(1')] | \Psi_0 \rangle, \quad (2.17)$$

donde  $1 = (\mathbf{x}, t)$ ,  $1' = (\mathbf{x}', t')$  y  $\Psi_H(1)$  es el operador de campo en la representación de Heisenberg. La presencia del operador  $T$  hace que la función de Green esté ordenada temporalmente, y por esta razón se la conoce como **función de Green causal**.

La definición de la función de Green contiene una dificultad, ya que involucra el estado fundamental  $|\Psi_0\rangle$  del sistema con Hamiltoniano  $H$ . El problema está en que los autoestados y autovalores del  $H$  no son conocidos, sino que son una de las cosas que se trata de obtener mediante la función de Green. Una manera de solucionar este problema es expresar el estado fundamental exacto  $|\Psi_0\rangle$  en término de cantidades conocidas, como por ejemplo el estado fundamental  $|\phi_0\rangle$  del Hamiltoniano sin interacción  $H_0$ .

La relación entre los dos estados fundamentales a temperatura nula fue establecida por el teorema de Gell-Mann y Low:

$$|\Psi_0\rangle = S(0, -\infty) |\phi_0\rangle. \quad (2.18)$$

El argumento es que antes de encender la perturbación  $V$  (a  $t \rightarrow -\infty$ ) el sistema se halla en el estado fundamental  $|\phi_0\rangle$ . Luego, en  $t = 0$  (cuando la perturbación está completamente encendida) el sistema se encontrará en el estado fundamental  $|\Psi_0\rangle$ , que se genera a partir de la evolución en forma adiabática del autoestado  $|\phi_0\rangle$  del Hamiltoniano no interactuante.

Cuando se habla de sistemas en equilibrio se refiere a sistemas que son perturbados por potenciales reversibles. Es decir, que cuando la perturbación se apaga en  $t \rightarrow \infty$ , el estado del sistema  $|\hat{\Psi}(\infty)\rangle$  vuelve a ser el estado fundamental del Hamiltoniano  $H_0$  (a menos de una fase global  $L$  [3]). Teniendo en cuenta esto,

$$|\phi_0\rangle e^{iL} = |\hat{\Psi}(\infty)\rangle = S(\infty, 0) |\Psi_0\rangle = S(\infty, -\infty) |\phi_0\rangle \Rightarrow e^{iL} = \langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle. \quad (2.19)$$

Combinando la última expresión con las propiedades de  $S$ , el bra  $\langle \Psi_0 |$  se puede escribir como:

$$\langle \Psi_0 | = \langle \phi_0 | S(-\infty, 0) = e^{-iL} \langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) S(-\infty, 0) = \frac{\langle \phi_0 | S(\infty, 0)}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (2.20)$$

El siguiente paso es convertir la función de Green (definida en la representación de Heisenberg) a la representación de interacción. Para ello, resta cambiar los operadores de campo a partir de las expresiones 2.5 y 2.8:

$$\Psi_H(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t} \hat{\Psi}_{H_0}(t) e^{iH_0 t} e^{-iHt} = U^\dagger(t) \hat{\Psi}_{H_0}(t) U(t) = S(0, t) \hat{\Psi}_{H_0}(t) S(t, 0), \quad (2.21)$$

donde el subíndice  $H_0$  en el operador de campo indica que está en la representación de Interacción, en la que los operadores evolucionan según la parte no perturbada del Hamiltoniano. Entonces se puede reescribir el producto de operadores de campo como:

$$\Psi_H(1) \Psi_H^\dagger(1') = S(0, t) \hat{\Psi}_{H_0}(t) S(t, 0) S(0, t') \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(t') S(t', 0). \quad (2.22)$$

Utilizando que el operador  $S$  obedece la propiedad  $S(t, t') = S(t, t'') S(t'', t')$ , la Ec.(2.17) queda:

$$G(1, 1') = -i \frac{\langle \phi_0 | T[S(\infty, -\infty) \hat{\Psi}_{H_0}(1) \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (2.23)$$

Para los sistemas en equilibrio supondremos que la perturbación no depende explícitamente del tiempo, por lo que podemos transformar la dependencia temporal a la variable  $\tau = t - t'$ . De esta manera, todas las cantidades físicas de interés dependen sólo de la diferencia entre tiempos.

El procedimiento para el cálculo de las funciones de Green continúa expandiendo la matriz  $S$  (en el numerador y denominador) en potencias de  $\hat{V}(t)$ :

$$G(1, 1') = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n+1} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{\langle \phi_0 | T[\hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \hat{\Psi}_{H_0}(1) \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (2.24)$$

La dificultad que se presenta ahora es como evaluar los brackets con productos de operadores ordenados temporalmente. Para ello se utiliza el teorema de Wick [1, pág.76] y las reglas diagramáticas de Feynman. Este teorema permite obtener la función de Green total a partir de las funciones de Green del sistema no perturbado. A estas últimas se las llama muchas veces propagadores libres, y contienen parejas de operadores de creación y destrucción,

$$G^0(t - t') = -i \langle \phi_0 | T[\hat{\Psi}_{H_0}(1) \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle. \quad (2.25)$$

En el caso  $t' > t$  el operador orden temporal  $T$  hace que se permute la posición de los operadores de campo (con un cambio de signo en el caso fermiónico). Por lo tanto, el operador  $\hat{\Psi}_{H_0}(1)$  va a actuar directamente sobre el estado fundamental  $|\phi_0\rangle$ . Así, un electrón de este estado va a ser destruido a tiempo  $t$  y creado a un tiempo posterior  $t'$ , lo cual es posible sólo si hay electrones en el estado fundamental a temperatura cero. Un caso en el que esto ocurre es el mar de Fermi de un metal, en el cual remover un electrón crea un estado vacante, muchas veces llamado agujero.

El teorema de Wick tiene en cuenta todas las posibles parejas que se pueden armar entre operadores y todos los ordenamientos temporales. Por lo tanto, el resultado va a ser la suma sobre todas las contracciones de a parejas. Cada término puede ser fácilmente expresado en término de los diagramas de Feynman, que tienen entre sí propiedades muy distintas. Por ejemplo, algunos de ellos son desconectados (llamados burbujas) y a menudo divergen. Esto no resulta una dificultad porque son cancelados en forma exacta por el denominador  $\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle$ . Es por esto que la suma se realiza solo sobre los diagramas conectados que son topológicamente diferentes.

### 2.1.3. Funciones de Green para sistemas fuera de equilibrio [1, 4]

En el caso de sistemas fuera del equilibrio, una vez que la perturbación es encendida y apagada, no hay garantía que el sistema vuelva al mismo estado inicial para tiempos asintóticamente largos debido a la irreversibilidad de los procesos. En física de materia condensada el estado a  $t \rightarrow \infty$  debe ser definido con mucho cuidado, ya que puede ocurrir que el estado  $|\phi_0\rangle$  del sistema no interactuante no sea una buena descripción. Algunos ejemplos de perturbaciones de no equilibrio pueden ser: un campo electromagnético, un pulso de luz, o un acoplamiento del sistema con reservorios a diferentes potenciales químicos.

Un método para manipular el límite para  $t \rightarrow \infty$  consiste en pensar que la integral temporal de  $S$  tiene dos partes: la primera va desde  $(-\infty, \tau)$ , la segunda va desde  $(\tau, -\infty)$ , y eventualmente se puede considerar  $\tau \rightarrow \infty$ . El camino de integración es un loop temporal que empieza y termina en  $t = -\infty$ , y tiene la ventaja de ser conocido el estado final e inicial  $|\Psi(-\infty)\rangle = |\phi_0\rangle$ . A este camino se lo conoce como **contorno de Keldysh**, y se encuentra ilustrado en la Figura 2.1. Las ramas se grafican separadas para enfatizar que el ordenamiento temporal de cada una es diferente. Sobre la rama superior (+) el ordenamiento temporal es cronológico, mientras que en la rama inferior (-) es anti-cronológico.

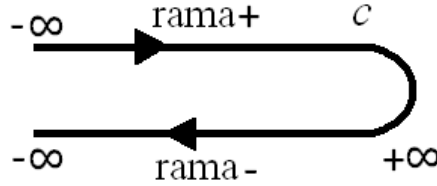


Figura 2.1: Contorno de Keldysh.

En este caso la función de Green es ordenada en el contorno  $c$ , y definida como:

$$G(1, 1') \equiv i\langle T_c \Psi_H(1) \Psi_H^\dagger(1') \rangle = \begin{cases} i\langle \Psi_H(1) \Psi_H^\dagger(1') \rangle & \text{si } \tau_1 > \tau_{1'} \text{ en } c \\ -i\langle \Psi_H^\dagger(1') \Psi_H(1) \rangle & \text{si } \tau_1 < \tau_{1'} \text{ en } c, \end{cases} \quad (2.26)$$

donde  $T_c$  es el operador de orden a lo largo del contorno de Keldysh y los operadores de campo están expresados en la representación de Heisenberg. El ket  $|\cdot\rangle$ , al igual que en la subsección anterior, es el estado fundamental del estado interactuante.

En forma análoga al caso de equilibrio, se puede expresar la función de Green en la representación de interacción. Para ello es necesario transformar los operadores y estados mediante el operador evolución temporal  $S$ , que sobre el contorno  $c$  se define como:

$$S_c(t_1, t_2) = T_c \exp \left[ -i \int_{t_1}^{t_2} d\tau \hat{V}(\tau) \right], \quad (2.27)$$

A partir de esta definición y las relaciones 2.18 y 2.22, se tiene que:



$$G(1, 1') = -i\langle\phi_0|T_c[S_c(-\infty, -\infty)\hat{\Psi}_{H_0}(1)\hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')]| \phi_0\rangle . \quad (2.28)$$

En lugar del operador de orden temporal utilizado en la teoría de equilibrio, se introduce el operador de ordenamiento sobre el contorno  $c$ , el cual ordena los tiempos de acuerdo al orden que tienen en el contorno. Con esta generalización, la estructura topológica es idéntica al caso de equilibrio. La única diferencia es que ahora las integrales son sobre el contorno de Keldysh, en lugar del eje real.

Tanto para sistemas en equilibrio como para sistemas fuera del equilibrio, la expansión de  $S$  (o  $S_c$ ) conduce a una ecuación cerrada para  $G$ . Por el teorema de Wick, cada término de la expansión puede escribirse como una suma de productos de funciones de Green de una partícula del sistema no perturbado. Esta expansión da lugar a una ecuación, conocida como **ecuación de Dyson** [1, pág. 128] que la función de Green debe obedecer,

$$G(1, 1') = G^0(1, 1') + \int d^3x_2 \int d^3x_3 \int_c d\tau_2 \int_c d\tau_3 G^0(1, 2)\Sigma(2, 3)G(3, 1') , \quad (2.29)$$

donde  $G^0$  es la función de Green del sistema sin perturbar y  $\Sigma$  es la autoenergía. Esta última contiene los efectos de la interacción y está compuesta por la suma de un número infinito de diagramas distintos. Este método es útil si  $\Sigma$  puede ser aproximada por algunos pocos términos de la serie de bajo orden en la perturbación. Esto puede ocurrir, por ejemplo, en teorías de acoplamiento débil, en las cuales la perturbación es lo suficientemente débil como para obtener una aproximación adecuada teniendo en cuenta solamente algunos términos.

Una desventaja de la utilización del loop temporal es que este método emplea seis funciones de Green diferentes. La necesidad de introducir estas funciones se puede entender a partir del operador de ordenamiento sobre el contorno  $T_c$ . Por ejemplo, si  $\tau_1$  y  $\tau_{1'}$  se encuentran sobre la rama  $+$ , el ordenamiento en el contorno es idéntico al ordenamiento temporal cronológico. En cambio, si ambos se encuentran en la rama  $-$  el ordenamiento va a coincidir con el anti-cronológico. También puede ocurrir que  $\tau_1$  y  $\tau_{1'}$  estén en ramas diferentes, y en ese caso están automáticamente ordenados. Entonces es conveniente definir, además de la función de Green ordenada temporalmente, una que sea ordenada anti-temporalmente y dos que no tengan ordenamiento temporal. Estos casos diferentes dan cuatro funciones de Green ( $G_t, G_{\bar{t}}, G^<, G^>$ ), y las otras dos ( $G_{ret}, G_{adv}$ ) son combinaciones lineales de las anteriores.

Debido al empleo de estas seis funciones de Green, es conveniente utilizar una representación matricial para la función de Green ordenada en el contorno, que se presenta a continuación [1, cap.2 sec. 2.9.2].

#### 2.1.4. Representación matricial

Como se mencionó anteriormente, es muy útil utilizar la forma matricial. En esta representación la función de Green definida en el contorno  $c$  es expresada como una matriz de  $(2 \times 2)$ , cuyas componentes son funciones de Green definidas sobre el eje real de tiempo.

$$\tilde{G}(1, 1') = \begin{pmatrix} G_t(1, 1') & -G^<(1, 1') \\ G^>(1, 1') & -G_{\bar{t}}(1, 1') \end{pmatrix} . \quad (2.30)$$

Cada elemento de la matriz dependerá de la ubicación de los argumentos temporales sobre el contorno de Keldysh. Se tienen las siguientes funciones de Green:

### Función mayor

$$G^>(1, 1') = -i\langle\Psi_H(1)\Psi_H^\dagger(1')\rangle \quad (2.31)$$

### Función menor

$$G^<(1, 1') = i\langle\Psi_H^\dagger(1')\Psi_H(1)\rangle \quad (2.32)$$

### Causal u ordenada temporalmente

$$G_t(1, 1') = \Theta(t_1 - t_{1'})G^>(1, 1') + \Theta(t_{1'} - t_1)G^<(1, 1') \quad (2.33)$$

### Ordenada anti-temporalmente

$$G_{\bar{t}}(1, 1') = \Theta(t_{1'} - t_1)G^>(1, 1') + \Theta(t_1 - t_{1'})G^<(1, 1') \quad (2.34)$$

A partir de las expresiones anteriores puede probarse que  $G_t + G_{\bar{t}} = G^< + G^>$ , y por lo tanto hay solamente tres funciones independientes. Esta libertad de elección hace que se puedan tomar diferentes convenciones. Para el propósito de este trabajo las funciones de Green más adecuadas son las  $G^{>/<}$ , la avanzada y la retardada. Las dos últimas son definidas como:

$$G_{av} = i\Theta(t_{1'} - t_1)\langle\{\Psi_H(1), \Psi_H^\dagger(1')\}\rangle, \quad (2.35)$$

y

$$G_{ret} = -i\Theta(t_1 - t_{1'})\langle\{\Psi_H(1), \Psi_H^\dagger(1')\}\rangle. \quad (2.36)$$

Se puede observar que las cuatro componentes cumplen la relación  $G_{ret} - G_{av} = G^> - G^<$ , de manera tal que haya tres funciones independientes.

En la representación matricial la función de Green  $\tilde{G}$  también obedece la ecuación de Dyson:

$$\tilde{G}(1, 1') = \tilde{G}^0(1, 1') + \int d^3x_2 \int d^3x_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \tilde{G}^0(1, 2)\tilde{\Sigma}(2, 3)\tilde{G}(3, 1'), \quad (2.37)$$

donde la autoenergía  $\Sigma$  puede representarse matricialmente en forma análoga a la función de Green de la Ec. (2.30), y sus componentes cumplen las siguientes relaciones:

$$\Sigma_t(1, 1') = \begin{cases} -\Sigma^>(1, 1') & \text{si } t_1 > t_{1'} \\ -\Sigma^<(1, 1') & \text{si } t_1 < t_{1'} \end{cases}, \quad (2.38)$$

$$\Sigma_{\bar{t}}(1, 1') = \begin{cases} -\Sigma^>(1, 1') & \text{si } t_1 < t_{1'} \\ -\Sigma^<(1, 1') & \text{si } t_1 > t_{1'} \end{cases}. \quad (2.39)$$

### 2.1.5. Teorema de Langreth [2]

Este teorema, también conocido como reglas de Langreth, va a ser de gran utilidad más adelante para el cálculo de las corrientes. Estas reglas permiten expresar los elementos de cualquier producto de matrices en el espacio de Keldysh en función de exclusivamente las componentes retardada, avanzada y menor. Así mismo, transforman las integrales sobre el contorno cerrado  $c$  en integrales ordinarias definidas sobre el eje real. El método ( que no se demostrará aquí) consiste en deformar apropiadamente el contorno  $c$  y reescribir las integrales resultantes utilizando las relaciones (2.31), (2.32), (2.33) y (2.34).

Por ejemplo, consideremos la ecuación de Dyson 2.29 en la que se puede encontrar términos con la estructura  $C = AB$ , u otros que involucren productos de más funciones. Para este caso se tiene:

$$C(t_1, t_{1'}) = \int_c d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t_{1'}) , \quad (2.40)$$

donde se suprimieron las variables espaciales.

Si por ejemplo se asume que  $t_1$  está en la rama superior (+) y que  $t_{1'}$  pertenece a la rama (-), entonces la componente menor de  $C$  se escribe,

$$C^<(1, 1') = \int_{-\infty}^{\infty} dt [A_{ret}(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) + A^<(t_1, t) B_{av}(t, t_{1'})] . \quad (2.41)$$

El mismo resultado se obtiene para la componente mayor, solo hay que reemplazar  $<$  por  $>$ . También se puede aplicar el mismo procedimiento para la componente avanzada y retardada. En una notación compacta se obtiene en el eje real que:

$$C_{ret/av} = A_{ret/av} B_{ret/av} \quad (2.42)$$

Es fácil generalizar ahora el resultado 2.41 para un producto de tres funciones. Si se considera  $D = ABC$  en el contorno  $c$ , luego en el eje real se tiene:

$$D^{\lessgtr} = A_{ret} B_{ret} C^{\lessgtr} + A_{ret} B^{\lessgtr} C_{av} + A^{\lessgtr} B_{av} C_{av} . \quad (2.43)$$

Aplicando esta regla a la Ec. (2.29) y luego de un poco de álgebra se llega finalmente a la ecuación de Dyson:

$$G^{\lessgtr} = (1 + G_{ret} \Sigma_{ret}) G^{0\lessgtr} (1 + \Sigma_{av} G_{av}) + G_{ret} \Sigma^{\lessgtr} G_{av} . \quad (2.44)$$

Puede demostrarse, usando la ecuación de Dyson para la función de Green retardada, que el primer término de la Ec.(2.44) es nulo en el caso de estudiar sistemas estacionarios.

## 2.2. Transporte en sistemas con potenciales periódicos

El gran desarrollo en tecnología de fabricación de circuitos pequeños, ha permitido la investigación de transporte electrónico inducido por campos periódicos en el tiempo. En algunos experimentos realizados por Switkes (entre otros) [5] se ha logrado inducir transporte de carga en puntos cuánticos mediante la aplicación de dos potenciales periódicos con una diferencia de fase entre sí. Otro fenómeno estrechamente relacionado con éste es el efecto de foto-voltaje (photovoltaic) en juntas mesoscópicas [6], por el cual se genera una corriente continua en un conductor mesoscópico cuando es sometido a radiación de alta frecuencia. La principal característica de estos efectos es que se genera una corriente neta como respuesta a un campo externo dependiente del tiempo, aún en ausencia de un bias estático. Todo esto renovó el interés en el estudio de transporte de carga en sistemas cuánticos abiertos en presencia de potenciales armónicos, motivando así gran cantidad de actividades teóricas y experimentales.

Un método para la investigación del fenómeno de transporte en sistemas mesoscópicos y nanoestructuras se basa en la descripción del sistema en término de Hamiltonianos de enlaces fuertes (tight - binding) y en estudiar la solución del problema con funciones de Green de no equilibrio. El formalismo de Keldysh fue aplicado por primera vez a la teoría de transporte mesoscópico por Caroli y Combescot; y posteriormente fue más elaborado por Pastawski [7] y Jauho, Meir y Wingreen [8] para estudiar sistemas con voltajes dependientes del tiempo. Más recientemente, se elaboraron propuestas teóricas para el estudio de sistemas con potenciales dependientes del tiempo de manera armónica [9].

En esta sección explicaremos el tratamiento teórico para sistemas con campos externos periódicos aplicando el formalismo introducido en las dos secciones anterior. Para ello, consideramos un dispositivo general que consiste en un sistema central con potenciales armónicos en el tiempo, el cual es conectado a dos reservorios de partículas estacionarios. En el tratamiento teórico del problema no se incluyen efectos de interacciones de muchos cuerpos, ni de spin.

### 2.2.1. Modelo teórico del sistema

El sistema completo es descrito por un Hamiltoniano total  $H$ , que puede ser separado en tres partes:

$$H = H_{res} + H_{cont} + H_{sist} , \quad (2.45)$$

donde

$$H_{res} = \sum_{\alpha=R,L} \sum_{k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha} , \quad (2.46)$$

es el Hamiltoniano de ambos reservorios, uno a la izquierda (L) y otro a la derecha (R), con potenciales químicos  $\mu_L$  y  $\mu_R$  respectivamente. El número cuántico  $k_\alpha$  identifica a cada uno de los estados (en el espacio de vectores de onda) del reservorio  $\alpha$  y  $\varepsilon_{k_\alpha}$  es la energía de dicho estado. Más adelante se pueden hacer distintas aproximaciones sobre los reservorios. Por ejemplo, se puede asumir que la densidad de estados es constante o modelarlos como cadenas tight - binding con interacción con los vecinos cercanos.

El contacto de los reservorios con la región central es descrito por el Hamiltoniano:

$$H_{cont} = \sum_{\alpha=L,R} H_{cont\alpha} = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k_\alpha} \sum_{l_\alpha} w_{k_\alpha, l_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger d_{l_\alpha} + h.c. \quad (2.47)$$

Este término del Hamiltoniano es el que permite que exista transporte mediante el intercambio de partículas. El contacto entre ambos sistemas está representado por un elemento de salto (hopping)  $w_{k_\alpha, l_\alpha}$  entre el reservorio  $\alpha$  y el sitio  $l_\alpha$  del sistema central.

El último término del Hamiltoniano corresponde a la parte central del sistema y se escribe como:

$$H_{sist} = - \sum_{\langle l, l' \rangle} t_{l, l'} d_l^\dagger d_{l'} + \sum_{l=1}^N \varepsilon_l d_l^\dagger d_l + \sum_{l, l'} V_{l, l'}(t) d_l^\dagger d_{l'} + h.c. , \quad (2.48)$$

donde  $\langle l, l' \rangle$  denota pares de primeros vecinos y  $V_{l, l'}(t) = V_{l, l'}^0 \cos(\omega_0 t + \zeta_{l, l'})$ . Los electrones son no interactuantes y no se tiene en cuenta el espín. El modelo para la región central es de electrones fuertemente ligados con una red de  $N$  sitios, elementos de salto  $t_{l, l'}$  entre los sitios  $l$  y  $l'$  y energías locales  $\varepsilon_l$ . Este potencial  $V_{l, l'}(t)$  oscila con una amplitud  $V_{l, l'}^0$ , frecuencia  $\omega_0$  y fase  $\zeta_{l, l'}$ . En el caso que los potenciales sean locales solo van a contribuir a parte diagonal del Hamiltoniano, ya que  $V_{l, l'}(t) = \delta_{l, l'} V_{l, l'}^0 \cos(\omega_0 t + \zeta_{l, l'})$ . Cuando un campo magnético dependiente del tiempo es aplicado, aparecen componentes extra-diagonales en la matriz potencial  $\hat{V}(t)$ . El esquema del sistema en este caso se muestra en la Figura 2.2.

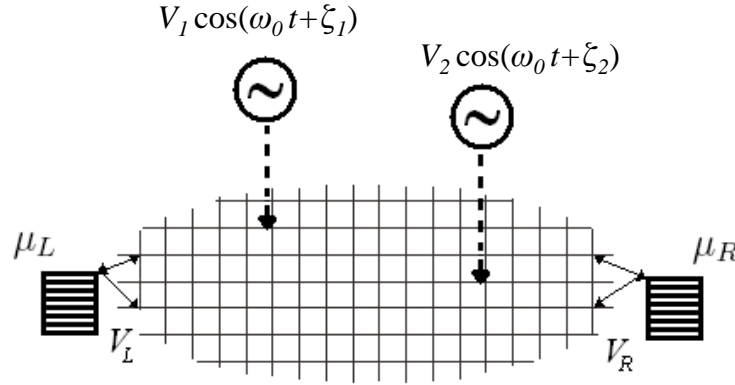


Figura 2.2: Esquema de un sistema con potenciales locales armónicos y acoplado a dos reservorios. La red representa el sistema central y las cajas esquematizan los reservorios con potenciales químicos  $\mu_L$  y  $\mu_R$ . Solo se pusieron dos potenciales armónicos a modo de ejemplo.

### 2.2.2. Corrientes de carga y energía

Los flujos de carga y energía que entran en el reservorio  $\alpha$  pueden ser calculados a partir de la evolución temporal de los operadores número de partículas  $N_\alpha = \sum_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}$  y energía  $H_{res_\alpha} = \sum_{k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}$  respectivamente. A partir de la ecuación de Heisenberg (2.6), podemos escribir estas cantidades en función de conmutadores:

$$\begin{aligned} J_\alpha &= e \langle \dot{N}_\alpha \rangle = \frac{ie}{\hbar} \langle [H, N_\alpha] \rangle, \\ W_\alpha^E &= \langle \dot{H}_{res_\alpha} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, H_{res_\alpha}] \rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Estas corrientes son positivas si salen del sistema central y entran al reservorio. Ahora bien, apelando a las relaciones de anticonmutación que obedecen los operadores fermiónicos, es fácil probar que

$$[H_{res}, N_\alpha] = [H_{sist}, N_\alpha] = [H_{res}, H_{res_\alpha}] = [H_{sist}, H_{res_\alpha}] = 0, \quad (2.50)$$

ya que el número de partículas y la energía del reservorio  $\alpha$  se conserva cuando está aislado. El único término del Hamiltoniano que describe la interacción entre los reservorios y el sistema central es  $H_{cont}$ , y por lo tanto es éste el único que da una contribución no nula al conmutador. De esta manera se obtiene que:

$$J_\alpha = \frac{ie}{\hbar} \langle [H_{cont}, N_\alpha] \rangle = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{l_\alpha, k_\alpha} [w_{k_\alpha, l_\alpha} \langle c_{k_\alpha}^\dagger d_{l_\alpha} \rangle - w_{k_\alpha, l_\alpha}^* \langle d_{l_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha} \rangle], \quad (2.51)$$

y

$$W_\alpha^E = \frac{i}{\hbar} \langle [H_{cont}, H_{res_\alpha}] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_{l_\alpha, k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} [w_{k_\alpha, l_\alpha} \langle c_{k_\alpha}^\dagger d_{l_\alpha} \rangle - w_{k_\alpha, l_\alpha}^* \langle d_{l_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha} \rangle]. \quad (2.52)$$

En este momento resulta útil definir dos funciones de Green nuevas:

$$\begin{aligned} G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t') &\equiv i \langle c_{k_\alpha}^\dagger(t') d_{l_\alpha}(t) \rangle \\ G_{k_\alpha, l_\alpha}^<(t, t') &\equiv i \langle d_{l_\alpha}^\dagger(t') c_{k_\alpha}(t) \rangle. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Se puede ver que las corrientes  $J_\alpha$  y  $W_\alpha^E$  están compuestas por las funciones de Green definidas anteriormente evaluadas a tiempos iguales. Si además se tiene en cuenta que estas funciones tienen la propiedad  $G_{k_\alpha, l_\alpha}^<(t, t) = -[G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t)]^*$ , las corrientes pueden ser expresadas como

$$J_\alpha = -\frac{2e}{\hbar} Re \left\{ \sum_{l_\alpha, k_\alpha} w_{k_\alpha, l_\alpha} G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t) \right\}, \quad (2.54)$$

y

$$W_\alpha^E = -\frac{2}{\hbar} Re \left\{ \sum_{l_\alpha, k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} w_{k_\alpha, l_\alpha} G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t) \right\}, \quad (2.55)$$

Para continuar con el cálculo de las corrientes es necesario encontrar una expresión para  $G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t)$ . En este caso, la relación general para la función de Green ordenada

en el contorno  $G_{l_\alpha, k_\alpha}(\tau, \tau')$  se puede derivar fácilmente con la técnica de la ecuación de movimiento. Como se explicó en la subsección (2.1.3), la teoría para sistemas fuera del equilibrio es estructuralmente equivalente a la teoría de equilibrio. La diferencia reside en que el ordenamiento es sobre el contorno  $c$ , en vez de tener un ordenamiento temporal cronológico. Por lo tanto es suficiente con considerar la ecuación de movimiento para la función de Green ordenada temporalmente ( $G_t$ ).

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} G_{l, k_\alpha}^t(t, t') = \varepsilon_{k_\alpha} G_{l, k_\alpha}^t(t, t') + \sum_m G_{l, m}^t(t, t') w_{k_\alpha, m}^* , \quad (2.56)$$

donde se definió la función de Green ordenada temporalmente en la región central  $G_{n, m}^t(t, t') = -i\langle T \{ d_m^\dagger(t') d_n(t) \} \rangle$ . Luego, la forma integral de la ecuación anterior es:

$$G_{l, k_\alpha}^t(t, t') = \sum_m \int dt_1 G_{l, m}^t(t, t_1) w_{k_\alpha, m}^* g_{k_\alpha}^t(t_1 - t') , \quad (2.57)$$

donde  $g_{k_\alpha}$  es la función de Green de equilibrio correspondiente al reservorio  $\alpha$  (no interactuante) aislado del sistema central.

Ya que las teorías de equilibrio y fuera de equilibrio son topológicamente equivalentes, la ecuación (2.57) tiene en el caso fuera de equilibrio la misma forma, excepto que la integral intermedia es sobre el contorno  $c$ . Por lo tanto se tiene

$$G_{l, k_\alpha}(\tau, \tau') = \sum_m \int_c d\tau_1 G_{l, m}(\tau, \tau_1) w_{k_\alpha, m}^* g_{k_\alpha}(\tau_1, \tau') . \quad (2.58)$$

Aquí,  $G_{n, m}(\tau, \tau')$  es la función de Green del sistema central ordenada en el contorno  $c$ . Ahora el último paso que falta para obtener la función  $G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t')$  es aplicar la regla de Langreth (2.41).

$$G_{l, k_\alpha}^<(t, t') = \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 w_{k_\alpha, m}^* [G_{l, m}^{ret}(t, t_1) g_{k_\alpha}^<(t_1 - t') + G_{l, m}^<(t, t_1) g_{k_\alpha}^{av}(t_1 - t')] . \quad (2.59)$$

También se puede aplicar la regla (2.42) y obtener la expresión para la componente  $G_{l_\alpha, k_\alpha}^{ret}$

$$G_{l, k_\alpha}^{ret}(t, t') = \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 w_{k_\alpha, m}^* G_{l, m}^{ret}(t, t_1) g_{k_\alpha}^{ret}(t_1 - t') . \quad (2.60)$$

Las funciones de Green para los reservorios cuando el sistema está desacoplado son:

$$g_{k_\alpha}^<(t - t') = i\langle c_{k_\alpha}^\dagger(t') c_{k_\alpha}(t) \rangle = i f_\alpha(\varepsilon_{k_\alpha}) e^{-i\varepsilon_{k_\alpha}(t-t')/\hbar} , \quad (2.61)$$

$$g_{k_\alpha}^{R, A}(t - t') = \mp i\Theta(\pm t \mp t') \langle \{ c_{k_\alpha}(t), c_{k_\alpha}^\dagger(t') \} \rangle = \mp i\Theta(\pm t \mp t') e^{-i\varepsilon_{k_\alpha}(t-t')/\hbar} , \quad (2.62)$$

donde  $f_\alpha$  es la distribución de Fermi del reservorio  $\alpha$

$$f_\alpha(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta_\alpha(\varepsilon - \mu_\alpha)} + 1} , \quad (2.63)$$

con  $\beta_\alpha = k_B T_\alpha$  es proporcional a la temperatura del reservorio y  $\mu_\alpha$  es el potencial químico. Las funciones de Fermi de los reservorios no son en principio iguales porque pueden tener distinto potenciales químico (bias estático) y temperatura (gradiente térmico).

Estas funciones de Green pueden ser reescritas como:

$$g_{k_\alpha}^<(t-t') = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} f_\alpha(\varepsilon) \rho_{k_\alpha}(\varepsilon) e^{-i\varepsilon(t-t')/\hbar} , \quad (2.64)$$

$$g_{k_\alpha}^{R,A}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\rho_{k_\alpha}(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' \pm i\eta} e^{-i\varepsilon(t-t')/\hbar} , \quad (2.65)$$

donde  $\rho_{k_\alpha}(\varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - \varepsilon_{k_\alpha})$ ,  $\eta = 0^+$ .

De esta manera se logró expresar la corriente en el contacto en función de las componentes retardada y menor de la función de Green del sistema central y del reservorio  $\alpha$ . Para continuar con el cálculo de la corriente es necesario encontrar una expresión para las componentes correspondientes al sistema central. En el formalismo para sistemas fuera del equilibrio, la ecuación de Dyson para la función de Green tiene una estructura matricial que conduce a un conjunto de ecuaciones integro - diferenciales acopladas para las componentes menor ( $<$ ) y retardada ( $R$  o  $ret$ ). Estas componentes de la función de Green del sistema central se definen como

$$\begin{aligned} G_{m,n}^R(t,t') &= -i\Theta(t-t') \langle \{d_m(t), d_n^\dagger(t')\} \rangle , \\ G_{m,n}^<(t,t') &= i \langle d_n^\dagger(t') d_m(t) \rangle . \end{aligned} \quad (2.66)$$

Una forma de encontrar las ecuaciones que cumplen estas funciones de Green es calcular la derivada temporal respecto a  $t'$  y utilizar la ecuación de Heisenberg (2.6) para la evolución temporal de los operadores de creación y destrucción,

$$\begin{aligned} -i\hbar\partial_{t'} G_{m,n}^R(t,t') &= \hbar\delta(t-t')\delta_{m,n} + \sum_{l=1}^N G_{m,l}^R(t,t') (\varepsilon_l\delta_{l,n} - t_{l,n} + V_{l,n}(t')) \\ &+ \sum_{\alpha=L,R} \sum_{l,k_\alpha} w_{k_\alpha,l} G_{m,k_\alpha}^R(t,t') \delta_{n,l} , \end{aligned} \quad (2.67)$$

y

$$-i\hbar\partial_{t'} G_{m,n}^<(t,t') = \sum_{l=1}^N G_{m,l}^<(t,t') (\varepsilon_l\delta_{l,n} - t_{l,n} + V_{l,n}(t')) + \sum_{\alpha=L,R} \sum_{l,k_\alpha} w_{k_\alpha,l} G_{m,k_\alpha}^<(t,t') \delta_{n,l} , \quad (2.68)$$

Sustituyendo las funciones de Green  $G_{m,k_\alpha}^<$  y  $G_{m,k_\alpha}^R$  por las ecuaciones (2.59) y (2.60) se obtiene:

$$\left(-i\hbar\partial_{t'} - \hat{H}_{sist}(t')\right) \hat{G}^R(t,t') - \int_{t'}^t dt_1 \hat{G}^R(t,t_1) \hat{\Sigma}^R(t_1-t') = \hbar\delta(t-t') \hat{I} , \quad (2.69)$$

y

$$\left(-i\hbar\partial_{t'} - \hat{H}_{sist}(t')\right) \hat{G}^<(t,t') - \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{G}^R(t,t_1) \hat{\Sigma}^<(t_1-t') - \int_{-\infty}^{t'} dt_1 \hat{G}^<(t,t_1) \hat{\Sigma}^A(t_1-t') = 0 . \quad (2.70)$$



Aquí, el símbolo  $\hat{\cdot}$  se utilizó para remarcar que las componentes retardada y menor están escritas en forma matricial, con elementos dados por la Ec. (2.66). En este caso, los índices de fila y columna de la matriz se corresponden con los sitios de la red. Por otra parte, las funciones  $\Sigma$  son las auto-energías, las cuales contienen los efectos de los reservorios. Estas funciones son definidas como:

$$\begin{aligned} \Sigma_{l,m}^{R,A,<}(t-t') &= \delta_{l,l_\alpha} \delta_{m,l'_\alpha} \sum_{k_\alpha} w_{k_\alpha,l_\alpha} w_{k_\alpha,l'_\alpha}^* g_{k_\alpha}^{R,A,<}(t-t') = \delta_{l,l_\alpha} \delta_{m,l'_\alpha} \Sigma_\alpha^{R,A,<}(t-t') \\ &= \delta_{l,l_\alpha} \delta_{m,l'_\alpha} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \Sigma_\alpha^{R,A,<}(\varepsilon) e^{-i\varepsilon(t-t')/\hbar} . \end{aligned} \quad (2.71)$$

Es importante notar que estas auto-energías dependen solamente de la estructura espectral del sistema  $\alpha$  y de la intensidad del parámetro de contacto  $w_{k_\alpha,l_\alpha}$ . En ausencia de interacciones de muchos cuerpos, la presencia de la auto-energía en la ecuación de Dyson para las funciones de Green retardada y menor tiene en cuenta los efectos de la interacción del sistema central con los contactos.

Para cálculos que se van a realizar más adelante es conveniente definir la función espectral  $\Gamma_\alpha(\varepsilon)$

$$[\Gamma_\alpha(\varepsilon)]_{nm} = \sum_{k_\alpha} \rho_{k_\alpha}(\varepsilon) w_{k_\alpha,n} w_{k_\alpha,m}^* , \quad (2.72)$$

de modo que

$$\Sigma_\alpha^<(\varepsilon) = i f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) , \quad (2.73)$$

y

$$\Sigma_\alpha^{R,A}(\varepsilon) = \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' \pm i\eta} \text{ con } \eta = 0^+ . \quad (2.74)$$

Las ecuaciones (2.69) y (2.70) proveen una solución para las funciones de Green retardada y menor, las cuales son necesarias para el cálculo de la corriente en el contacto. En este momento es conveniente introducir una forma de calcular las funciones de Green que consiste en trabajar con una representación de la ecuación de Dyson más práctica. Esto conduce a un conjunto de ecuaciones lineales para la función de Green retardada, que en la mayoría de los casos puede ser resuelto numéricamente. Para ello, comencemos escribiendo las ecuaciones (2.69) y (2.70) en forma integral,

$$\hat{G}^R(t, t') = \hat{G}^0(t-t') + \int_{t'}^t dt_1 \hat{G}^R(t, t_1) \hat{V}(t_1) \hat{G}^0(t_1 - t') , \quad (2.75)$$

$$\hat{G}^<(t, t') = \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t'} dt_2 \hat{G}^R(t, t_1) \hat{\Sigma}^<(t_1 - t_2) \hat{G}^A(t_2, t') , \quad (2.76)$$

donde  $\hat{G}^0(t-t')$  es la función de Green retardada no perturbada correspondiente a la solución del problema del sistema central acoplado a los reservorios, pero sin potenciales dependientes del tiempo. Por otro lado, el Hamiltoniano de la región central fue separado

en dos partes  $\hat{H}_{sist}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ , de manera que la parte del Hamiltoniano que depende explícitamente del tiempo esté solamente contenida en  $\hat{V}(t)$  y que  $\hat{H}_0$  reúna los términos restantes.

De las definiciones de las funciones de Green (2.35) y (2.36), se puede probar fácilmente que la función de Green avanzada está relacionada con la retardada a través de  $G_{j,i}^A(t, t') = [G_{i,j}^R(t', t)]^*$ . Entonces, teniendo en cuenta esta propiedad, se puede ver de la Ec.(2.76) que la función de Green retardada proporciona la solución para la función menor. De esta manera, todo el problema queda resuelto en términos de la función de Green retardada, y lo que se busca ahora es una forma práctica de calcular esta función. Para ello, la estrategia consiste en introducir la transformada de Fourier para la componente retardada

$$\hat{G}^R(t, \varepsilon) = \int_{-\infty}^t dt' \hat{G}^R(t, t') e^{i(\varepsilon + i0^+)(t-t')/\hbar}, \quad (2.77)$$

y trabajar con la forma integral de la ecuación de Dyson (2.75). Esto conduce a un conjunto de ecuaciones lineales para la función de Green retardada:

$$\hat{G}^R(t, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{G}^R(t, \varepsilon + n\hbar\omega_0) \hat{V}(n) \hat{G}^0(\varepsilon) e^{-in\omega_0 t}, \quad (2.78)$$

donde  $\hat{V}(n)$  es la componente de Fourier de la matriz potencial  $\hat{V}(t) = \sum_{n \neq 0} \hat{V}(n) e^{-in\omega_0 t}$ . Por ejemplo, en el caso de que el potencial contenga solo un armónico de frecuencia  $\omega_0$ , entonces  $n = \pm 1$  y  $\hat{V}(1)$  va a tener elementos de matriz  $V_{l,l'} = \frac{V_{l,l'}^0}{2} e^{-i\zeta_{l,l'}}$  y  $\hat{V}(-1) = [\hat{V}(1)]^*$ .

Para problemas estacionarios, la transformada de Fourier (2.77) se reduce a la transformada usual utilizada en el formalismo de funciones de Green de equilibrio. Por la tanto, si se considera la ecuación (2.69) con la sustitución  $\hat{H}_{sist} \rightarrow \hat{H}_0$  y se realiza la transformada de Fourier usual en  $\hat{G}^0(t-t')$  y  $\hat{\Sigma}(t-t')$ , se obtiene que la función de Green de equilibrio  $\hat{G}^0(\varepsilon)$  es la solución de la siguiente ecuación de Dyson:

$$\hat{G}^0(\varepsilon) [\varepsilon \hat{I} - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}^R(\varepsilon)] = \hat{I}. \quad (2.79)$$

El sistema lineal (2.78), que nos lleva a la solución completa del problema, posee la misma estructura que la dinámica de un problema en el que los electrones con una energía  $\varepsilon$  interactúan con un potencial  $V$  emitiendo o absorbiendo paquetes de energía  $\hbar\omega_0$ , teniendo un estado final de energía  $\varepsilon \pm \hbar\omega_0$ .

Debido a la estructura periódica en el tiempo del conjunto de ecuaciones (2.78), la función de Green retardada es también una función periódica en el tiempo con período  $\tau = 2\pi/\omega_0$ . Por este motivo es muy útil trabajar en la expansión:

$$\hat{G}^R(t, \varepsilon) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{\mathcal{G}}(n, \varepsilon) e^{-in\omega_0 t}, \quad (2.80)$$

donde las funciones  $\hat{\mathcal{G}}(n, \varepsilon)$  son conocidas como componentes de Floquet. Se les da este nombre a las funciones de Green  $\mathcal{G}$  porque (2.80) tiene una estructura similar a la propuesta por Floquet para las funciones de onda de Hamiltonianos periódicos en el tiempo.

### 2.2.3. Solución perturbativa de la ecuación de Dyson

En la mayoría de los casos, el sistema de ecuaciones (2.78) debe ser resuelto numéricamente. Por este motivo, es conveniente realizar expansiones sistemáticas en potencias de  $V_{l,l'}$  para obtener expresiones analíticas (ver [9]).

Cuando el parámetro  $V_{l,l'}$  es pequeño (comparado con las energías del Hamiltoniano independiente del tiempo), una solución a bajo orden en este parámetro puede resultar una buena aproximación. Por ejemplo, la solución a segundo orden se obtiene escribiendo la ecuación de Dyson para  $\hat{G}^R(t, \varepsilon + n\hbar\omega_0)$

$$\hat{G}^R(t, \varepsilon + n\hbar\omega_0) = \hat{G}^0(\varepsilon + n\hbar\omega_0) + \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \hat{G}^0(\varepsilon + (n+n')\hbar\omega_0) \hat{V}(n') \hat{G}^0(\varepsilon + n\hbar\omega_0) e^{-in'\omega_0 t}, \quad (2.81)$$

y reemplazando esta ecuación en (2.78). Reagrupando los coeficientes con  $e^{-in\omega_0 t}$  en la expresión resultante se obtiene:

$$\hat{G}^R(t, \varepsilon) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{\mathcal{G}}(n, \varepsilon) e^{-in\omega_0 t}, \quad (2.82)$$

con

$$\hat{\mathcal{G}}(0, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon) + \sum_{n \neq 0} \hat{G}^0(\varepsilon) \hat{V}(-n) \hat{g}(n, \varepsilon), \quad (2.83)$$

$$\hat{\mathcal{G}}(\pm n, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon \pm n\hbar\omega_0) \left[ \hat{V}(\pm n) \hat{G}^0(\varepsilon) + \sum_m \hat{V}(\pm n - m) \hat{g}(m, \varepsilon) \right] \quad \text{con } n \neq 0,$$

y

$$\hat{g}(n, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon + n\hbar\omega_0) \hat{V}(n) \hat{G}^0(\varepsilon). \quad (2.84)$$

En el caso de tener un solo armónico este sistema se reduce a tener

$$\hat{\mathcal{G}}(0, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon) + \sum_{n=\pm 1} \hat{G}^0(\varepsilon) \hat{V}(-n) \hat{\mathcal{G}}(n, \varepsilon), \quad (2.85)$$

$$\hat{\mathcal{G}}(\pm 1, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon \pm \hbar\omega_0) \hat{V}(\pm 1) \hat{G}^0(\varepsilon),$$

$$\hat{\mathcal{G}}(\pm 2, \varepsilon) = \hat{G}^0(\varepsilon \pm 2\hbar\omega_0) \hat{V}(\pm 1) \hat{\mathcal{G}}(\pm 1, \varepsilon).$$

### 2.2.4. Expresiones finales para las corrientes dc y la potencia media producida por las fuentes externas[10]

Partiendo de la expresión de la Ec.(2.54) y teniendo en cuenta (2.59) para la función de Green  $G_{l,k\alpha}^<(t, t)$ , la corriente de carga que entra en el reservorio  $\alpha$  se puede escribir como:

$$J_\alpha(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left\{ \sum_{k_\alpha} |w_{k_\alpha}|^2 \int dt_1 [G_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, t_1) g_{k_\alpha}^<(t_1 - t) + G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(t, t_1) g_{k_\alpha}^A(t_1 - t)] \right\}, \quad (2.86)$$

donde  $l_\alpha$  y  $l_\beta$  son los sitios del sistema central a los que se conectan los reservorios.

Ahora, partiendo de las definiciones en las Ecs.(2.71), (2.73) y (2.74) para las autoenergías menor y avanzada y luego transformando Fourier, se puede pasar a la expresión:

$$J_\alpha(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left\{ \int d\varepsilon \left[ iG_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, \varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) + G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(t, \varepsilon) \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon')}{(\varepsilon - \varepsilon' - i0^+)} \right] \right\}. \quad (2.87)$$

Podemos usar esta ecuación para evaluar la componente continua de la corriente como

$$J_\alpha^{dc} = \overline{J_\alpha(t)} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt J_\alpha(t), \quad (2.88)$$

con  $\tau = 2\pi/\omega_0$  el período de los potenciales ac. Como los potenciales externos son periódicos en el tiempo, se puede re-escribir la ecuación anterior haciendo uso de la representación de Floquet-Fourier de la función de Green (2.80)

$$J_\alpha^{dc} = -\frac{e}{\hbar} \int d\varepsilon \left\{ f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) 2\text{Im} [\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}(0, \varepsilon)] - \sum_{\beta=L,R} \sum_n |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n, \varepsilon)|^2 \Gamma_\beta(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0) f_\beta(\varepsilon) \right\}. \quad (2.89)$$

Finalmente si se introduce la siguiente identidad que obedecen las componentes de Floquet (ver demostración en [11, Apéndice D]):

$$\hat{\mathcal{G}}(l, \omega) - \hat{\mathcal{G}}^\dagger(-l, \omega + l\hbar\omega_0) = -i \sum_n \hat{\mathcal{G}}(l+n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \hat{\Gamma}(\varepsilon - n\hbar\omega_0) \hat{\mathcal{G}}^\dagger(n, \varepsilon - n\hbar\omega_0), \quad (2.90)$$

se puede expresar la corriente en una forma más compacta

$$J_\alpha^{dc} = \frac{e}{\hbar} \int d\varepsilon \sum_{\beta=L,R} \sum_n |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n, \varepsilon)|^2 \Gamma_\beta(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0) [f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0)] \quad (2.91)$$

Algo interesante de mencionar es que a partir de esta última ecuación se puede demostrar la conservación de la carga, que implica:

$$\sum_{\alpha=L,R} J_\alpha^{dc} = 0. \quad (2.92)$$

Como  $J_\alpha^{dc}$  fue definida como la corriente que entra al reservorio, la conservación de la carga implica que tiene diferente signo en los dos reservorios. Para frecuencias bajas y diferencias de potencial químico y temperatura pequeñas, la Ec.(2.91) nos muestra que solamente los electrones cercanos al nivel de Fermi  $\varepsilon \sim \mu$  van a ser excitados de modo de contribuir a la corriente.

Al igual que para la corriente de carga, partiendo de la expresión de la Ec.(2.55) y teniendo en cuenta (2.59) para la función de Green  $G_{l, k_\alpha}^<(t, t)$ , se puede escribir al flujo de energía como

$$W_\alpha^E(t) = -\frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left\{ \sum_{k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} |w_{k_\alpha}|^2 \int dt_1 [G_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, t_1) g_{k_\alpha}^<(t_1 - t) + G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(t, t_1) g_{k_\alpha}^A(t_1 - t)] \right\}, \quad (2.93)$$

donde  $l_\alpha$  y  $l_\beta$  son los sitios del sistema central en los cuales se conectan los reservorios. Y luego, transformando Fourier se pasa a la forma

$$W_\alpha^E(t) = -\frac{2}{h} \text{Re} \left\{ \int d\varepsilon \left[ iG_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, \varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) \varepsilon + G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(t, \varepsilon) \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon') \varepsilon'}{(\varepsilon - \varepsilon' - i0^+)} \right] \right\}. \quad (2.94)$$

Si ahora se promedia en el tiempo para extraer la componente dc  $W_\alpha^{dc} = \overline{W_\alpha^E(t)}$  y se utiliza la representación de Floquet, se obtiene

$$W_\alpha^{dc} = \frac{1}{h} \int d\varepsilon \sum_{\beta=L,R} \sum_n (\varepsilon + n\hbar\omega_0) |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n, \varepsilon)|^2 \Gamma_\beta(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0) [f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0)]. \quad (2.95)$$

A diferencia de la carga, la ecuación de conservación de la energía involucra otro término que describe la potencia desarrollada por los potenciales externos ac

$$\sum_{\alpha=L,R} W_\alpha^{dc} = \overline{P}, \quad (2.96)$$

con  $\overline{P}$  el promedio en un período de la potencia, que cuando los potenciales externos son locales se escribe

$$\overline{P} = \sum_l \overline{\dot{V}_l} = -i \sum_l \int_0^\tau \frac{dt}{\tau} \dot{V}_l(t) G_{ll}^<(t, t), \quad (2.97)$$

con  $l$  los sitios en los cuales se aplican los potenciales dependientes del tiempo. Mediante un procedimiento similar al presentado para las corrientes de carga y energía, se puede escribir a esta cantidad en término de las componentes de Floquet

$$\overline{P} = -\frac{1}{h} \sum_{\alpha, l, n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon n\hbar\omega_0 f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) \text{Im} \{ V_l(n) \mathcal{G}_{l, l_\alpha}(n+l, \varepsilon) \mathcal{G}_{l, l_\alpha}^*(l, \varepsilon) \}. \quad (2.98)$$

### 2.2.5. Relación con el formalismo de la matriz de scattering [10]

Para calcular las corrientes de carga y energía que entran a los reservorios se puede utilizar también el formalismo de la matriz de scattering. En este enfoque se considera al sistema central como un dispersor de partículas que puede reflejar o transmitir electrones que vienen desde los reservorios. Por ejemplo, en un sistema con solamente dos terminales (L y R), un electrón que viene desde el reservorio izquierdo hacia el sistema central puede ser transmitido al derecho o ser reflejado con una cierta amplitud. Para encontrar la corriente que entra a un reservorio se calcula la diferencia entre el número de partículas que entran y salen del mismo. No es necesario saber lo que le sucede al electrón al pasar por el sistema central, sino que solamente se necesitan las amplitudes de dispersión cuánticas de que un electrón sea transmitido/reflejado hacia/desde el sistema central.

En este formalismo se considera solamente a los electrones que están en los cables unidimensionales que conectan al sistema con los reservorios macroscópicos. Es conveniente introducir dos operadores,  $a_\alpha(\varepsilon)$  para los electrones que entran por el cable hacia el sistema central con una energía  $\varepsilon$  y  $b_\alpha(\varepsilon)$  para los que son dispersados por la parte central. Luego, por ejemplo, la corriente de carga se puede escribir como:

$$J_\alpha(t) = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon d\varepsilon' e^{-i(\varepsilon - \varepsilon')t/\hbar} \{ \langle b_\alpha^\dagger(\varepsilon) b_\alpha(\varepsilon') \rangle - \langle a_\alpha^\dagger(\varepsilon) a_\alpha(\varepsilon') \rangle \}. \quad (2.99)$$

La correspondiente corriente continua es:

$$\overline{J}_\alpha = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \{ f_\alpha^{\text{out}}(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon) \}, \quad (2.100)$$

donde  $f_\alpha^{\text{out}}(\varepsilon) = \langle b_\alpha^\dagger(\varepsilon) b_\alpha(\varepsilon) \rangle$  es la función distribución de los electrones que salen del sistema central a través del cable  $\alpha$ , y  $f_\alpha(\varepsilon) = \langle a_\alpha^\dagger(\varepsilon) a_\alpha(\varepsilon) \rangle$  es la función distribución de los electrones que entran el mismo. Esta expresión muestra que la corriente dc es la diferencia entre el número de electrones que salen y entran al sistema. Como los reservorios se asumen en equilibrio, la función distribución para los electrones que entran al cable es la función de Fermi. Por otro lado, los electrones dispersados por el sistema central, en general, son partículas fuera del equilibrio. Para calcular la distribución de los electrones dispersados, se expresan los operadores  $b$  en términos de los  $a$  como  $b_\alpha(\varepsilon) = \sum_{\beta=L,R} S_{\alpha\beta}(\varepsilon) a_\beta(\varepsilon)$ , siendo  $S_{\alpha\beta}(\varepsilon)$  las amplitudes de dispersión (elementos de la matriz de scattering  $\hat{S}(\varepsilon)$ ).

Cuando se aplican fuerzas externas periódicas en el tiempo, como las que consideramos en esta sección, el electrón puede ganar o perder una energía  $n\hbar\omega_0$  al interactuar con el sistema central. Entonces, la matriz de scattering va a depender, además de los índices de los cables, de las energías correspondientes al electrón de salida y de entrada. A esta matriz de scattering, denotada con  $S_{\alpha\beta}^F(\varepsilon_n, \varepsilon)$  donde  $\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\omega_0$ , se la conoce como matriz de scattering de Floquet, al igual que a las componentes de Fourier de la función de Green. En este caso la relación entre los operadores  $b$  y  $a$  queda  $b_\alpha(\varepsilon) = \sum_{\beta=L,R} \sum_n S_{\alpha\beta}^F(\varepsilon, \varepsilon_n) a_\beta(\varepsilon_n)$ .

Por otro lado, la conservación del número de partículas implica que la matriz de Floquet debe ser unitaria [12]:

$$\sum_{\alpha=L,R} \sum_n S_{\alpha\beta}^{F*}(\varepsilon_n, \varepsilon) S_{\alpha\gamma}^F(\varepsilon_n, \varepsilon_m) = \delta_{m,0} \delta_{\beta\gamma}, \quad (2.101)$$

y

$$\sum_{\beta=L,R} \sum_n S_{\alpha\beta}^{F*}(\varepsilon, \varepsilon_n) S_{\gamma\beta}^F(\varepsilon_m, \varepsilon_n) = \delta_{m,0} \delta_{\beta\gamma}. \quad (2.102)$$

Luego, haciendo uso de la relación entre los operadores  $b$  y los  $a$ , y las Ecs.(2.101) y (2.102), la función distribución para los electrones dispersados se puede escribir como

$$f_\alpha^{\text{out}}(\varepsilon) = \sum_{\beta=L,R} \sum_n |S_{\alpha\beta}^F(\varepsilon, \varepsilon_n)|^2 f_\beta(\varepsilon_n). \quad (2.103)$$

Esta función no es una función distribución de Fermi a menos que el sistema central sea estacionario y que todos los reservorios tengan el mismo potencia químico y la misma temperatura. Reemplazando esta última ecuación en (2.100) se obtiene que la corriente dc de carga es

$$\overline{J}_\alpha = \frac{e}{h} \sum_{\beta=L,R} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon_n)] |S_{\alpha\beta}^F(\varepsilon_n, \varepsilon)|^2. \quad (2.104)$$

En forma análoga se puede calcular la corriente de energía como

$$\overline{W}_\alpha^E = \frac{1}{h} \sum_{\beta=L,R} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \varepsilon_n [f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon_n)] |S_{\alpha\beta}^F(\varepsilon_n, \varepsilon)|^2. \quad (2.105)$$

Existe una relación simple entre la matriz de scattering de Floquet y los coeficientes de la función de Green  $\hat{\mathcal{G}}(n, \varepsilon)$  introducidos en la Ec.(2.80)[11]:

$$S_{\alpha\beta}^F(\varepsilon_m, \varepsilon_n) = \delta_{\alpha,\beta}\delta_{m,n} - i\sqrt{\Gamma_\alpha(\varepsilon_m)\Gamma_\beta(\varepsilon_n)}\mathcal{G}_{l_\alpha,l_\beta}(m-n, \varepsilon_n). \quad (2.106)$$

Esta última ecuación es una generalización para sistemas con potenciales periódicos de la fórmula de Fisher y Lee [13] para sistemas estacionarios, y permite pasar del enfoque con matriz de scattering al de funciones de Green y viceversa. A pesar de que este formalismo es muy práctico para el estudio de propiedades de transporte en estructuras mesoscópicas, no permite computar explícitamente ciertas cantidades relevantes del sistema, como por ejemplo la potencia desarrollada por las fuentes externas. Esto se debe a que este formalismo no le asocia a cada región del sistema un Hamiltoniano, de modo de poder identificar por separado la contribución a la energía de cada parte. Solamente considera al sistema central como un dispersor de partículas, de manera que la función de onda de los electrones que llegan a esta región puede ser reflejada o transmitida con una cierta amplitud.

## Bibliografía

- [1] Gerald D. Mahan, Many-Particle-Physics, Third Edition.
- [2] A. P. Jauho, Introduction to the Keldysh nonequilibrium Green function technique. Lecture notes (2006).
- [3] A Fetter and J.D. Walecka, Quantum theory of many-particle systems (Dover Publications, USA, 2003).
- [4] Esteban Calzetta, Nonequilibrium quantum field theory, Cambridge University Press (2007).
- [5] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campoman, and A. C. Gossard, Science 293, 1905 (1999).
- [6] V. D. Mihailechi, L. J. A. Koster, J. C. Hummelen, and P. W. M. Blom, Phys. Rev. Lett.93, 216601 (2004).
- [7] H. Pastawski, Phys. Rev. B 46, 4053 (1992).
- [8] A. P. Jauho, N.Wingreen and Y. Meir, Phys. Rev. B 50, 5528 (1994).
- [9] L. Arrachea, A Green function Approach to Transport Phenomena in Quantum Pumps, Phys. Rev. B 72, 125349 (2005).
- [10] L. Arrachea and M. Moskalets, Chapter of “Handbook on Nanophysics”, ed. by K. Satler, Taylor and Francis 2010, arXiv:0903.1153v1(2009).
- [11] L. Arrachea and M. Moskalets, Phys. Rev. B 74, 245322, (2006)
- [12] M. Moskalets and M. Büttiker. Phys. Rev. B 69, 205316 (12) , (2004).
- [13] D. S. Fisher and P. A. Lee ,Phys. Rev. B 23, 6851 - 4 (1981).





# Capítulo 3

## Fundamentos teóricos II: Teoría de respuesta lineal

*Este capítulo está basado principalmente en el libro de H. Bruus and K. Flensberg, Many-body quantum field theory in condensed matter physics, (Oxford, 2005).*

La respuesta lineal es un concepto muy utilizado en todas las ramas de la física, y esta teoría establece simplemente que la respuesta de un sistema ante una pequeña perturbación externa es proporcional a dicha perturbación de manera que todo lo que se necesita estudiar es la constante de proporcionalidad. Este capítulo está destinado a derivar la fórmula general de respuesta lineal para un sistema cuántico bajo una perturbación.

La pregunta física que nos hacemos es cuáles son las consecuencias que se tienen al medir una cantidad observable  $A$ , si se perturba al sistema con un Hamiltoniano  $H'$ . En otras palabras, como es  $\langle A \rangle$  a orden lineal en  $H'$ .

Dentro de todas las numerosas aplicaciones que tiene la fórmula de respuesta lineal, se encuentran por ejemplo las susceptibilidades de carga y espín de sistemas electrónicos a campos externos magnéticos y eléctricos. También se pueden calcular, utilizando una fórmula similar, las respuestas a fuerzas mecánicas o vibraciones externas. En particular, en este capítulo mostramos cómo utilizar este formalismo para derivar una expresión general para la conductividad eléctrica.

### 3.1. La fórmula de Kubo general

Consideremos un sistema cuántico en equilibrio termodinámico descrito por el Hamiltoniano independiente del tiempo  $H_0$ . Entonces el valor de expectación de una cantidad física representada por el operador  $A$ , puede ser evaluado como

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n}, \\ \rho_0 &= e^{-\beta H_0} = \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-\beta E_n},\end{aligned}\tag{3.1}$$

donde  $\rho_0$  es el operador densidad y  $Z_0 = \text{Tr}[\rho_0]$  es la función de partición. El conjunto de estados  $\{|n\rangle\}$  corresponde a los autoestados del Hamiltoniano  $H_0$ , con autoenergías  $\{E_n\}$ .

Supongamos ahora que a algún tiempo  $t = t_0$ , se aplica una perturbación externa al sistema, llevándolo fuera del equilibrio. La perturbación es descrita por un término adicional dependiente del tiempo en el Hamiltoniano

$$H(t) = H_0 + H'(t)\theta(t - t_0).\tag{3.2}$$

Ahora el objetivo es encontrar el valor de expectación del operador  $A$  a tiempos  $t$  mayores que  $t_0$ . Para ello debemos calcular la evolución temporal de la matriz densidad o equivalentemente la evolución temporal de los autoestados del Hamiltoniano  $H_0$  que describe al sistema antes de que se encienda la perturbación, de manera de calcular  $\langle A(t) \rangle$  con  $|n(t)\rangle$

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t) | A | n(t) \rangle e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z_0} \text{Tr}[\rho(t) A], \\ \rho(t) &= \sum_n |n(t)\rangle \langle n(t)| e^{-\beta E_n}.\end{aligned}\quad (3.3)$$

La idea de esta expresión para los valores de expectación es la siguiente, inicialmente se distribuyen los estados del sistema de acuerdo a la distribución de Boltzmann usual  $e^{-\beta E_n^0}/Z_0$ . A tiempos posteriores, el sistema es descrito por la misma distribución de estados, pero con los estados iniciales evolucionados en el tiempo de acuerdo al nuevo Hamiltoniano  $H(t)$ . La dependencia temporal de los estados  $|n\rangle$  esta por supuesto gobernada por la ecuación de Schrödinger

$$i\partial_t |n(t)\rangle = H(t) |n(t)\rangle. \quad (3.4)$$

Como  $H'$  es considerada una perturbación pequeña, es conveniente utilizar la representación de interacción introducida en el Capítulo 2 Subsec.2.1.1, en la que los estados están representados con  $|\hat{n}(t)\rangle$  y su dependencia temporal está dada por

$$|n(t)\rangle = e^{-iH_0 t} |\hat{n}(t)\rangle = e^{-iH_0 t} \hat{U}(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle. \quad (3.5)$$

A orden lineal en  $H'$  la Ec. (2.12) establece que el operador evolución temporal es  $\hat{U}(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t')$ . Luego, insertando esto en (3.3), se obtiene el valor de expectación de  $A$  hasta orden lineal en la perturbación

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n(t_0) | \hat{A}(t) \hat{H}'(t') - \hat{H}'(t') \hat{A}(t) | n(t_0) \rangle \\ &= \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0.\end{aligned}\quad (3.6)$$

Los brackets  $\langle \rangle_0$  significan que los valores de expectación están tomados con respecto al Hamiltoniano  $H_0$ . Este es un resultado a remarcar porque a pesar de que  $\langle A(t) \rangle$  es una cantidad de no equilibrio, ha sido expresada como una función correlación del sistema en equilibrio. La razón física de esto es que la interacción entre excitaciones creadas en el estado fuera del equilibrio es un efecto de segundo orden en la perturbación, y por lo tanto no está incluido en respuesta lineal.

La función de correlación que aparece en la segunda línea de la Ec. (3.6) es llamada función correlación retardada, y vamos a re-escribir el resultado de respuesta lineal solamente en términos de esta función

$$\delta \langle A(t) \rangle \equiv \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AH'}^R(t, t') e^{-\eta(t-t')}, \quad (3.7)$$

donde

$$C_{AH'}^R(t, t') = -i\theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0. \quad (3.8)$$

En la bibliografía se puede encontrar que se refieren a esta función correlación como susceptibilidad retardada  $\chi_{AH'}^R$ .

La Ec.(3.7) es la famosa fórmula de Kubo que expresa la respuesta lineal del sistema a la perturbación  $H'$ . Se ha incluido el factor  $e^{-\eta(t-t')}$ , con  $\eta$  un parámetro infinitesimal positivo, para forzar que la respuesta a tiempo  $t$  debida a la  $H'$  a tiempo  $t'$  decaiga para  $t \gg t'$ . Entonces, al final del cálculo, se debe tomar el límite  $\eta \rightarrow 0$ .

Frecuentemente es conveniente expresar la respuesta en el dominio de frecuencias, entonces escribimos la perturbación en término de sus componentes de de Fourier

$$H'(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} H'_\omega, \quad (3.9)$$

de modo que  $C_{AH'}^R$  es

$$C_{AH'}^R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t'} C_{AH'_\omega}^R(t - t'), \quad (3.10)$$

porque puede ser probado fácilmente, usando la definición del valor de expectación, que  $\langle [\hat{A}(t), \hat{H}'_\omega(t')] \rangle$  depende solamente de la diferencia entre  $t$  y  $t'$ . Cuando se inserta esto en la fórmula de Kubo, se obtiene tomando  $t_0 \rightarrow -\infty$

$$\begin{aligned} \delta\langle A(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} e^{-i(\omega+i\eta)(t-t')} C_{AH'_\omega}^R(t - t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} C_{AH'_\omega}^R(\omega). \end{aligned} \quad (3.11)$$

## 3.2. Fórmula de Kubo para la conductividad

Ahora consideremos un sistema de electrones sujeto a un campo electromagnético externo que induce una corriente, de manera que la conductividad queda determinada por el coeficiente de respuesta lineal. En general la conductividad puede ser no local en tiempo y espacio, ya que la corriente eléctrica  $J_e$  en el punto  $\mathbf{r}$  a tiempo  $t$  depende del campo eléctrico en el punto  $\mathbf{r}'$  a tiempo  $t'$

$$J_e(\mathbf{r}, t) = \int dt' \int d\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') E(\mathbf{r}', t'), \quad (3.12)$$

donde  $\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$  es el tensor conductividad que describe la respuesta de la corriente en la dirección  $\hat{e}_\alpha$  al campo eléctrico aplicado en la dirección  $\hat{e}_\beta$ .

El campo eléctrico  $\mathbf{E}$  está dado por el potencial eléctrico  $\phi_{ext}$  y el vector potencial  $\mathbf{A}_{ext}$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \phi_{ext}(\mathbf{r}, t) - \partial_t \mathbf{A}_{ext}(\mathbf{r}, t). \quad (3.13)$$

El término de la perturbación en el Hamiltoniano debido al campo electromagnético externo está dado por el acoplamiento de los electrones a los potenciales escalar y vector. A orden lineal en el potencial externo

$$H_{ext} = -e \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \phi_{ext}(\mathbf{r}, t) + e \int d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}) \mathbf{A}_{ext}(\mathbf{r}, t), \quad (3.14)$$

donde  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$  es el operador densidad de corriente

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r})\mathbf{v}\psi(\mathbf{r}) - [\mathbf{v}\psi^\dagger(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}), \quad (3.15)$$

con  $\mathbf{v} = (-i\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r})) / (2m)$  y  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_{ext}$ , siendo  $\mathbf{A}_0$  el potencial vector en equilibrio y  $\mathbf{A}_{ext}$  la perturbación externa.

Para simplificar las expresiones, y sabiendo que el resultado final no puede depender de la elección del gauge, podemos elegir uno en el que el potencial escalar eléctrico externo sea nulo,  $\phi_{ext} = 0$ . Es más cómodo expresar la conductividad en el dominio de frecuencias, y entonces debemos transformar Fourier la perturbación. Como  $\mathbf{E}_{ext}(t) = -\partial_t \mathbf{A}_{ext}(t)$ , y en el dominio de frecuencias la derivada temporal pasa a ser  $\partial_t \rightarrow -i\omega$ , entonces  $\mathbf{A}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) = (1/i\omega)\mathbf{E}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)$  y la perturbación se escribe como

$$H_{ext,\omega} = \frac{e}{i\omega} \int d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_{ext}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.16)$$

Ahora, como la ecuación (3.16) es de hecho lineal en el potencial externo  $\mathbf{E}_{ext}$  y estamos interesados en la respuesta lineal, vamos a descartar los términos proporcionales a  $\mathbf{E}_{ext}\mathbf{A}_{ext}$ . Para encontrar el valor de expectación de la corriente usamos la fórmula de Kubo (3.7) derivada en la sección previa, reemplazando “A” por  $\mathbf{J}$ , y  $H'$  por  $H_{ext}$

$$\delta\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) \rangle = C_{J_0 H_{ext,\omega}}^R(\omega) + \frac{e}{m} \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle \mathbf{A}_{ext}(\mathbf{r}, \omega), \quad (3.17)$$

o alternativamente

$$\delta\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) \rangle = \int d\mathbf{r}' \left\{ \int dt' e^{(i\omega - \eta)(t-t')} (-i\theta(t-t')) \langle [\hat{\mathbf{J}}_0(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{J}}_0(\mathbf{r}', t')] \rangle \right\} \frac{e}{i\omega} \quad (3.18)$$

$$+ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e}{i\omega m} \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle \mathbf{E}_{ext}(\mathbf{r}', \omega), \quad (3.19)$$

con  $\mathbf{J}_0$  la corriente sin tener en cuenta la perturbación  $\mathbf{A}_{ext}$ .

Comparando esta última ecuación con la definición de la conductividad de la Ec.(3.12)

$$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \frac{e^2 n(\mathbf{r})}{i\omega m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.20)$$

donde  $\Pi^R$  es la correlación corriente-corriente retardada, que en el dominio temporal es

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = C_{J_0^\alpha, J_0^\beta}^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i\theta(t-t') \langle [\mathbf{J}_0(\mathbf{r}, t), \mathbf{J}_0(\mathbf{r}', t')] \rangle_0. \quad (3.21)$$

Por lo tanto, encontrar la conductividad de un determinado sistema se redujo a encontrar la correlación retardada corriente-corriente.

### 3.3. Fórmula de Kubo para la conductancia

La conductividad  $\sigma$  es proporcional al coeficiente entre el campo eléctrico  $E$  y la densidad de corriente  $J$ , sin embargo la conductancia es el coeficiente de proporcionalidad que hay entre la corriente  $I$  que circula a través del sistema y el voltaje  $V$  aplicado, es decir la ley de Ohm usual  $I = GV$ . La corriente que fluye a través del sistema es igual a la integral de la densidad de corriente en la sección transversal. Para hacer la integral es

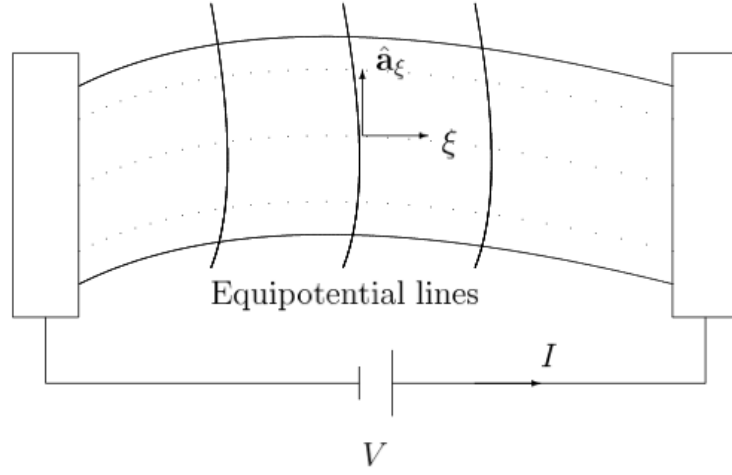


Figura 3.1: En la derivación de la fórmula de Kubo para la conductancia tomamos un sistema de coordenadas dado por líneas equipotenciales, que junto con la conservación de la corriente permite que se simplifiquen los cálculos

conveniente elegir una superficie equipotencial y definir el sistema de coordenadas  $(\xi, \mathbf{a}_\xi)$ , donde  $\xi$  es la coordenada paralela a la línea de campo y  $\mathbf{a}_\xi$  son las coordenadas en el plano perpendicular a la dirección de los  $\xi$  (ver Fig. 3.1). La corriente  $I$  es entonces

$$I = \int d\mathbf{a}_\xi \hat{\mathbf{a}}_\xi \cdot \mathbf{J}(\xi, \mathbf{a}_\xi) = \int d\mathbf{a}_\xi \int d\mathbf{a}'_\xi \int d\xi' \hat{\mathbf{a}}_\xi \cdot \sigma(\xi, \hat{\mathbf{a}}_\xi, \xi', \hat{\mathbf{a}}'_\xi, \omega = 0) \cdot \hat{\mathbf{a}}'_\xi \mathbf{E}(\xi'), \quad (3.22)$$

donde  $\hat{\mathbf{a}}_\xi$  es un vector unidad normal al elemento de superficie  $d\mathbf{a}_\xi$ . Por la conservación de la carga la corriente calculada en un punto cualquiera  $\xi$  no puede depender de  $\xi$ . Además, debido a que se cumple la propiedad  $\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \sigma(\mathbf{r}', \mathbf{r}, -\omega)$  podemos concluir que el integrando es también independiente de  $\xi'$ . Esta simplificación es la razón por la cual elegir un sistema de coordenadas definido por las líneas de campo. Entonces podemos hacer la integral sobre  $\xi'$ , que es justamente la diferencia de voltaje  $V = \int d\xi' E(\xi')$ , y

$$G = \int d\mathbf{a}_\xi \int d\mathbf{a}'_\xi \hat{\mathbf{a}}_\xi \cdot \sigma(\hat{\mathbf{a}}_\xi, \hat{\mathbf{a}}'_\xi, \omega = 0) \cdot \hat{\mathbf{a}}'_\xi, \quad (3.23)$$

que en términos de la función correlación corriente-corriente

$$G = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{i\omega} C_{II}^R(\omega). \quad (3.24)$$

Como la conductancia es una cantidad real, va a tener un aporte no nulo solamente la componente imaginaria de la función de correlación  $C_{II}^R$ ,

$$G = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} [C_{II}^R(\omega)]}{\omega}. \quad (3.25)$$

La correlación en el dominio temporal es

$$C_{II}^R(t - t') = -i\theta(t - t') \langle [I(t), I(t')] \rangle, \quad (3.26)$$

donde  $I$  es el operador corriente definido en (3.22).



# Capítulo 4

## Fundamentos teóricos III: Teoría termoeléctrica

*Este capítulo está basado principalmente en el artículo G. Benenti, G. Casati, T. Prosen, K. Saito, Colloquium: Fundamental aspects of steady state heat to work conversion, arXiv:1311.4430 (2013).*

La termoelectricidad, también conocida como efecto de Peltier-Seebeck, consiste en la conversión de diferencias de temperatura en electricidad, y al revés, voltaje eléctrico en calor. El fuerte interés por los fenómenos termoeléctricos surgió en la década del 50, cuando Ioffe descubrió que los semiconductores dopados exhibían mayores efectos termoeléctricos que otros materiales. Propuso entonces la utilización de semiconductores para construir refrigeradores de hogar. Estos refrigeradores iban a tener un largo tiempo de vida, ser silenciosos y ambientalmente benignos. La sugerencia de Ioffe impulsó una intensa actividad de investigación en física de semiconductores, pero a pesar del esfuerzo, los refrigeradores termoeléctricos tienen aún eficiencias muy pobres comparadas con la de los refrigeradores que utilizamos hoy en día.

En la última década ha habido una creciente presión por encontrar materiales termoeléctricos con mejores eficiencias, debido a la fuerte preocupación ambiental por los clorofluorocarbonos que se utilizan en la mayoría de los refrigeradores. La necesidad de proveer fuentes de energía sustentable a la población mundial es cada vez mayor, de manera que a lo largo de las próximas décadas todo el esfuerzo de la comunidad científica estará enfocado en esa dirección y en particular en la transformación de calor en trabajo. La posibilidad de generar energía eléctrica usando efectos termoeléctricos está siendo cada vez más atractiva. A pesar de los progresos logrados en los últimos años, la eficiencia alcanzada por las tecnologías basadas en efectos termoeléctricos sigue siendo muy baja [1–6]. La eficiencia termoeléctrica de estos sistemas depende de las propiedades físicas del material, como por ejemplo la conductividad eléctrica  $G$ , la conductividad térmica  $\Xi$  y el coeficiente de Seebeck  $\mathcal{S}$ ; y es expresada en función de un coeficiente sin dimensiones llamado usualmente figura de mérito  $ZT = (G\mathcal{S}^2/\Xi)T$  [7]. Para tener altas eficiencias se requieren valores grandes de  $ZT \rightarrow \infty$ , los cuales resultan difíciles de alcanzar.

Después de más de cincuenta años de que Ioffe descubriese que los semiconductores dopados exhiben efectos termoeléctricos relativamente altos, y a pesar de los logros recientes, los dispositivos actuales más eficientes todavía operan con una figura de mérito  $ZT \sim 1$  a temperatura ambiente. Se considera esencial que los dispositivos termoeléctricos tengan valores de  $ZT > 3$  para competir en cuanto a eficiencia con sistemas que refrigeran o generan energía en forma mecánica.

A escalas pequeñas, como por ejemplo micro o nano escalas, se espera que las tecnologías termoeléctricas sean más eficientes que otros sistemas tradicionales. La nano-

estructuras permitirían controlar el transporte de calor y partículas con mecanismos de scattering apropiados [8]. El progreso reciente en ingeniería de nano-estructuras abrió nuevas posibilidades, de manera que el estudio de la dinámica de estos sistemas podría llevar a nuevas estrategias para el desarrollo de materiales con alta eficiencia termoeléctrica.

El propósito de este capítulo es introducir, dentro del marco de la termodinámica fuera del equilibrio, los resultados fundamentales de la teoría de respuesta lineal, las relaciones de reciprocidad de Onsager, y por último la definición de eficiencia.

## 4.1. Respuesta lineal y relaciones de reciprocidad de Onsager

La termodinámica fuera del equilibrio describe procesos en base a dos tipos de parámetros: las **fuerzas termodinámicas**  $X_i$  (también conocidas como fuerzas generalizadas o afinidades) que dan lugar a procesos irreversibles, y los **flujos**  $J_i$  que caracterizan la respuesta del sistema a las fuerzas aplicadas. Más específicamente, vamos a considerar un dispositivo genérico para extraer trabajo a partir de un flujo de calor. El trabajo que realiza un sistema contra una fuerza externa  $F$  es  $W = -Fx$ , con variable conjugada  $x$ . La fuerza puede ser de naturaleza mecánica, química, o eléctrica, y la fuerza termodinámica es  $X_1 = F/T$  siendo  $T$  la temperatura del sistema. Por otro lado, el flujo termodinámico es la derivada temporal de la variable conjugada,  $J_1 = \dot{x}$  y la potencia de salida es  $P = \dot{W} = -J_1 X_1 T$ .

Por ejemplo, si consideramos la conversión de calor en trabajo, de modo que el trabajo es realizado convirtiendo una parte del calor  $Q_1$  que fluye desde el reservorio caliente a temperatura  $T_1$  (asumimos  $T_1 > T_2$ ) al frío, la fuerza termodinámica es  $X_2 = 1/T_2 - 1/T_1$  y la corriente de calor es  $J_2 = \dot{Q}_1$ . Cuando se genera energía debido a un voltaje (ver Fig.4.1) la fuerza es  $F = \Delta V = \Delta\mu/e$ , donde  $e$  es la carga del electrón y  $\Delta V = V_1 - V_2$  ( $V_1 < V_2$ ) es la diferencia de voltaje entre los dos reservorios con potencial electroquímico  $\mu_1$  y  $\mu_2$ . La variable conjugada  $x$  es la carga total transferida desde el reservorio 1 al 2. Entonces  $X_1 = \Delta V/T$  y  $J_1$  es la corriente eléctrica.

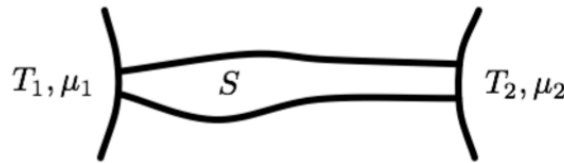


Figura 4.1: Esquema de un sistema en el que se convierte calor en trabajo. El sistema  $S$  está en contacto con dos reservorios a temperaturas  $T_1$  y  $T_2$ , y potenciales electroquímicos  $\mu_1$  y  $\mu_2$ . Se asume  $T_1 > T_2$  y  $\mu_1 < \mu_2$ , de manera que las fuerzas generalizadas sean  $X_1 < 0$  y  $X_2 > 0$ . En la generación de energía termoeléctrica, tanto la corriente de carga como la de calor fluyen desde el reservorio caliente al frío, es decir con  $J_1 > 0$  y  $J_2 > 0$ . En el caso que se considere refrigeración  $J_1 < 0$  y  $J_2 < 0$ .

Asumiendo que las fuerzas generalizadas son chicas, la relación entre los flujos y las



fuerzas es lineal:

$$\begin{aligned} J_1 &= L_{11}X_1 + L_{12}X_2 \\ J_2 &= L_{21}X_1 + L_{22}X_2. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Estas ecuaciones de transporte son de respuesta lineal, y los coeficientes  $L_{ab}$  son conocidos como coeficientes de Onsager. Como estamos asumiendo que las fuerzas termodinámicas son pequeñas, la diferencia de temperatura  $\Delta T = T_1 - T_2$  es pequeña en comparación con  $T_1 \sim T_2 \sim T$ , entonces  $X_2 = \Delta T/T^2$ . Nos estamos enfocando en el estado estacionario, donde todas las fuerzas y las corrientes en promedio son independientes del tiempo.

La positividad de la tasa de producción de entropía,  $\dot{S} = J_1X_1 + J_2X_2 \geq 0$ , implica que los coeficientes de Onsager cumplan

$$\begin{aligned} L_{11} &\geq 0 \\ L_{22} &\geq 0 \\ L_{11}L_{22} - \frac{1}{4}(L_{12} + L_{21})^2 &\geq 0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Asumiendo la propiedad de invarianza ante inversión temporal de las ecuaciones de movimiento, Onsager ([9]) derivó relaciones fundamentales conocidas como relaciones de reciprocidad de Onsager para los coeficientes cruzados de la matriz:  $L_{ab} = L_{ba}$ . Cuando se aplica un campo magnético  $B$  al sistema, y se transforma el tiempo  $t$  por  $-t$  y  $B \rightarrow -B$ , las relaciones de Onsager-Casimir [9, 10] son

$$\begin{aligned} L_{ab}(B) &= L_{ba}(-B) \\ L_{aa}(B) &= L_{aa}(-B). \end{aligned} \quad (4.3)$$

A campo magnético nulo, se recobran las relaciones de reciprocidad de Onsager  $L_{ab} = L_{ba}$ . Solamente los coeficientes diagonales son funciones pares ante inversión del campo magnético, mientras que en general para  $a \neq b$ ,  $L_{ab}(B) \neq L_{ab}(-B)$ .

Los coeficientes de Onsager están relacionados con los coeficientes de transporte, que en caso de termoelectricidad son

$$\begin{aligned} G &= \left( \frac{J_1}{\Delta V} \right)_{\Delta T=0} = \frac{L_{11}}{T}, \\ \Xi &= \left( \frac{J_2}{\Delta T} \right)_{J_1=0} = \frac{\det L}{T^2 L_{11}}, \\ \mathcal{S} &= - \left( \frac{\Delta V}{\Delta T} \right)_{J_1=0} = \frac{L_{12}}{T L_{11}}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde  $G$  es la conductancia eléctrica,  $\Xi$  la conductancia térmica,  $\mathcal{S}$  el coeficiente de Seebeck. El coeficiente Peltier

$$\Pi = \left( \frac{J_2}{J_1} \right)_{\Delta T=0} = \frac{L_{21}}{L_{11}} \quad (4.5)$$

esta relacionado con el de Seebeck mediante la relación de reciprocidad  $\Pi(B) = T\mathcal{S}(-B)$ . Es importante notar que las relaciones de Onsager-Casimir implican

$$\begin{aligned} G(B) &= G(-B) \\ \Xi(B) &= \Xi(-B), \end{aligned} \quad (4.6)$$

pero en general no imponen una simetría en el coeficiente de Seebeck ante el cambio  $B \rightarrow -B$ .

## 4.2. Eficiencias termodinámicas

En respuesta lineal, la eficiencia de convertir calor en trabajo es

$$\eta = \frac{\dot{W}}{\dot{Q}_1} = -\frac{TX_1 J_1}{J_2} = \frac{-TX_1(L_{11}X_1 + L_{12}X_2)}{L_{21}X_1 + L_{22}X_2}, \quad (4.7)$$

donde  $J_2 = \dot{Q}_1 > 0$  y la potencia  $P = \dot{W} > 0$ . El máximo de  $\eta$  en función de  $X_1$ , para  $X_2$  fijo, se alcanza cuando

$$X_1 = \frac{L_{22}}{L_{21}} \left( -1 + \sqrt{\frac{\det L}{L_{11}L_{22}}} \right) X_2, \quad (4.8)$$

y entonces para sistemas con simetría de inversión temporal, es decir con  $L_{12} = L_{21}$ , la eficiencia máxima está dada por

$$\eta_{max} = \eta_C \frac{\sqrt{ZT + 1} - 1}{\sqrt{ZT + 1} + 1}. \quad (4.9)$$

En la ecuación anterior se introdujo la figura de mérito

$$ZT = \frac{L_{12}^2}{\det L} \quad (4.10)$$

que es un parámetro sin dimensiones, el cual puede escribirse en término de los coeficientes de transporte  $G, \Xi, \mathcal{S}, \Pi$  haciendo uso de la Ec.(4.4)

$$ZT = \frac{G\mathcal{S}^2}{\Xi} T. \quad (4.11)$$

El factor  $\eta_C$  en (4.9) corresponde a la eficiencia de Carnot,  $\eta_C = 1 - T_1/T_2$ . La restricción que impone la termodinámica (más precisamente que la tasa de producción de entropía sea positiva) es que  $ZT \geq 0$  y que  $\eta_{max} \rightarrow \eta_C$  cuando  $ZT \rightarrow \infty$ . La eficiencia máxima  $\eta_{max}$  se encuentra ilustrada en la Fig.4.2 con una curva sólida. La figura de mérito  $ZT$  diverge si  $J_2 = cJ_1$ , con  $c$  un factor de proporcionalidad independiente de los valores de las fuerzas termodinámicas aplicadas. En resumen, en respuesta lineal y sin campos magnéticos aplicados u otros efectos que rompan la simetría de inversión temporal, se alcanza la eficiencia de Carnot si los flujos de carga y energía son proporcionales. Esto se conoce en la literatura como condición de acoplamiento fuerte.

En el caso que se considere refrigeración, es decir lograr extraer calor de la fuente fría administrándole energía al sistema, la eficiencia se estima como la inversa del cociente anterior  $\eta^{ref} = 1/\eta = \dot{Q}_1/\dot{W}$  y su máximo valor está determinado también por la Ec.(4.9).

Otra cantidad relevante para caracterizar la forma en que operan de estos sistemas, es la eficiencia cuando la potencia de salida es máxima. Para ello, escribimos la potencia a partir de las fuerzas y flujos termodinámicos

$$P = -TX_1 J_1 = -TX_1(L_{11}X_1 + L_{12}X_2), \quad (4.12)$$

que es máxima cuando

$$X_1 = -\frac{L_{12}}{2L_{11}} X_2, \quad (4.13)$$

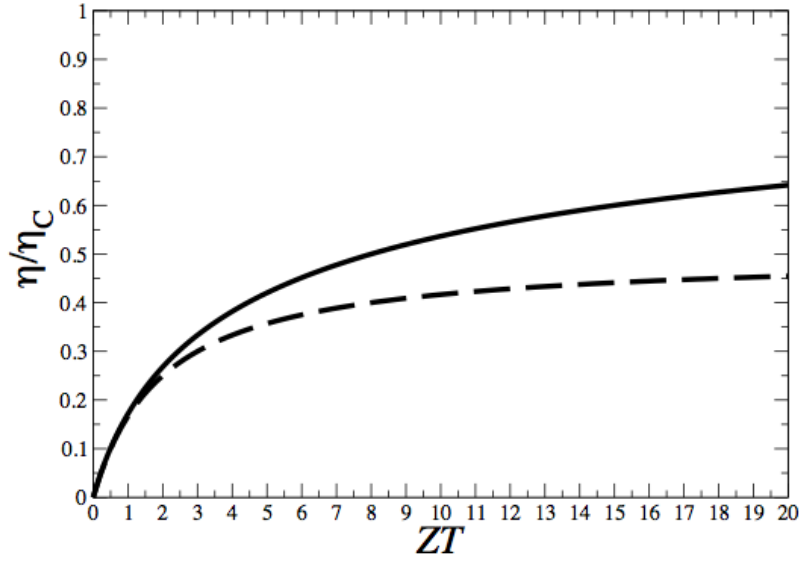


Figura 4.2: Eficiencia en respuesta lineal para el caso de conversión de calor en trabajo, en unidades de la eficiencia de Carnot  $\eta_C$ , como función de la figura de mérito  $ZT$ . La curva superior e inferior corresponden respectivamente a la eficiencia máxima  $\eta_{max}$  y a la eficiencia a potencia máxima  $\eta(P_{max})$ .

y está dada por

$$P_{max} = \frac{\eta_C}{4} \frac{L_{12}^2}{L_{11}} X_2. \quad (4.14)$$

Usando la Ec.(4.4) podemos escribir también

$$P_{max} = \frac{1}{4} S^2 G (\Delta T)^2. \quad (4.15)$$

Podemos ver directamente de esta última ecuación que la potencia máxima depende de la combinación  $S^2 G$ , conocida como factor de energía por esta razón. Para sistemas con simetría de inversión temporal, la eficiencia a potencia máxima es [11]

$$\eta(P_{max}) = \frac{\eta_C}{2} \frac{ZT}{ZT + 2}. \quad (4.16)$$

Esta cantidad también es una función monótona creciente de  $ZT$ , con  $\eta(P_{max}) = 0$  cuando  $ZT = 0$  y  $\eta(P_{max}) \rightarrow \eta_C/2$  si  $ZT \rightarrow \infty$  (curva punteada de la Fig.4.2). Cuando  $ZT$  es pequeño  $\eta(P_{max}) \sim \eta_{max}$ , y entonces la diferencia entre estas dos cantidades se hace relevante solamente para  $ZT > 1$ .

Todo este mismo análisis se puede repetir para sistemas con simetría de inversión temporal rota, por ejemplo mediante la aplicación de campos magnéticos. En general, en esos casos,  $L_{12}(B) \neq L_{21}(B)$  y como consecuencia la eficiencia máxima y la eficiencia a potencia máxima quedan determinadas por dos parámetros [12]: el parámetro de asimetría

$$x = \frac{L_{12}}{L_{21}} = \frac{S(B)}{S(-B)} \quad (4.17)$$

y la “figura de mérito”

$$y = \frac{L_{12}L_{21}}{\det L} = \frac{G(B)\mathcal{S}(B)\mathcal{S}(-B)}{\Xi(B)}T. \quad (4.18)$$

La eficiencia máxima es

$$\eta_{max} = \eta_C x \frac{\sqrt{y+1} - 1}{\sqrt{y+1} + 1}, \quad (4.19)$$

mientras que la eficiencia a potencia máxima

$$\eta(P_{max}) = \frac{\eta_C}{2} \frac{xy}{2+y}. \quad (4.20)$$

A diferencia del caso con simetría de inversión temporal, la eficiencia máxima para la máquina refrigerante no es (4.19), sino

$$\eta_{max}^{ref} = \frac{\eta_C}{x} \frac{\sqrt{y+1} - 1}{\sqrt{y+1} + 1}. \quad (4.21)$$

En particular, con  $x = 1$ ,  $y$  se reduce a la figura de mérito  $ZT$  y se recupera el caso con simetría de inversión temporal.

## Bibliografía

- [1] Dresselhaus, M. S., Chen, G., Tang, M. Y., Yang, R. G., Lee, H., Wang, D. Z., Ren, Z. F., Fleurial, J. P., and Gogna, P., 2007, “New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials,” *Adv. Mater.* 19, 1043.
- [2] Dubi, Y. and Di Ventra, M., 2011, “Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions,” *Rev. Mod. Phys.* 83, 131.
- [3] Goldsmid, H. J., 2010, *Introduction to thermoelectricity* (Springer-Verlag).
- [4] Shakouri, A., 2011, “Recent Developments in Semiconductor Thermoelectric Physics and Materials,” *Annu. Rev. Mater. Res.* 41, 399.
- [5] Snyder, G. J. and Toberer, E. S., 2008, “Complex thermoelectric materials,” *Nat. Mater.* 7, 105.
- [6] Sootsman, J. R., Chung, D. Y., and Kanatzidis, M. G., 2009, “New and Old Concepts in Thermoelectric Materials,” *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 8616.
- [7] Ioffe, A. F., 1957, *Semiconductor Thermoelements, and Thermoelectric Cooling* (Infosearch Limited).
- [8] Vineis, C. J., Shakouri, A., Majumdar, A., and Kanatzidis, M. G., 2010, “Nanostructured Thermoelectrics: Big Efficiency Gains from Small Features,” *Adv. Mat.* 22, 3970.
- [9] Onsager, L., 1931, “Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I.,” *Phys. Rev.* 37, 405.

- 
- [10] Casimir, H. B. G., 1945, “On Onsager’s Principle of Microscopic Reversibility,” *Rev. Mod. Phys.* 17, 343.
  - [11] Van den Broeck, C., 2005, “Thermodynamic Efficiency at Maximum Power,” *Phys. Rev. Lett.* 95, 190602.
  - [12] Benenti, G., Saito, K., and Casati, G., 2011, “Thermodynamic Bounds on Efficiency for Systems with Broken Time-Reversal Symmetry,” *Phys. Rev. Lett.* 106, 230602.



# Capítulo 5

## Desarrollos formales de esta tesis

Este capítulo esta destinado a mostrar algunos de los cálculos realizados en esta tesis. En particular, nos centraremos en la evaluación de las corrientes de carga y energía en los contactos como función del tiempo, y en el cálculo de la energía almacenada en la región de contacto entre las diferentes partes del sistema. Por último, presentamos una solución aproximada a la ecuación de Dyson (2.78) para bajas frecuencias  $\omega_0$ .

### 5.1. Cálculo de la corriente de carga ac

Como se mostró en el Cap.2 Subsec.2.2.4, la corriente de carga dependiente del tiempo que entra en el reservorio  $\alpha$  se puede escribir como

$$J_\alpha(t) = -\frac{2e}{h} \text{Re} \left\{ \int d\varepsilon \left[ iG_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, \varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) + G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(t, \varepsilon) \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon')}{(\varepsilon - \varepsilon' - i0^+)} \right] \right\}.$$

Haciendo uso de que los potenciales externos son periódicos en el tiempo, se puede re-escribir la ecuación anterior en la representación de Floquet-Fourier

$$J_\alpha(t) = -\frac{2e}{h} \text{Re} \left\{ \sum_l e^{-il\omega_0 t} \int d\varepsilon [i\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}(l, \varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) \right. \\ \left. + \sum_{\beta=L,R} \sum_n i\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon) f_\beta(\varepsilon) \Gamma_\beta(\varepsilon) \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon')}{(\varepsilon - (\varepsilon' - n\hbar\omega_0) - i0^+)} \right] \right\}. \quad (5.1)$$

Reordenando esta ecuación, se puede llegar a una expresión teórica para la corriente más conveniente en término de diferencia de funciones de Fermi. Para ello, se puede empezar descomponiendo la parte real como suma de un número complejo y su conjugado

$$J_\alpha(t) = -\frac{e}{h} \int d\varepsilon \sum_l i e^{-il\omega_0 t} [f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) (\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}(l, \varepsilon) - \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}^*(-l, \varepsilon)) \\ + \sum_{\beta=L,R} \sum_n f_\beta(\varepsilon) \Gamma_\beta(\varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(l, \varepsilon) \\ \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \left( \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon')}{(\varepsilon - (\varepsilon' - n\hbar\omega_0) - i0^+} - \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon' + l\hbar\omega_0)}{\varepsilon - (\varepsilon' - n\hbar\omega_0) + i0^+} \right)]. \quad (5.2)$$

Para anchos de banda de los reservorios lo suficientemente grandes, se puede considerar que  $\Gamma_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0) \sim \Gamma_\alpha(\varepsilon)$ . Teniendo en cuenta esto y la propiedad

$$\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon' - i0^+} = \mathcal{P}\left\{\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon'}\right\} + i\pi\delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (5.3)$$

se llega a que

$$J_\alpha(t) = -\frac{e}{\hbar} \int d\varepsilon \sum_l i e^{-il\omega_0 t} \Gamma_\alpha(\varepsilon) \left[ f_\alpha(\varepsilon) (\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}(l, \varepsilon) - \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}^*(-l, \varepsilon)) \right. \\ \left. + i \sum_{\beta=L,R} \sum_n f_\beta(\varepsilon - n\hbar\omega_0) \Gamma_\beta(\varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \right]. \quad (5.4)$$

Finalmente si se introduce la identidad que obedecen las componentes de Floquet de la Ec.(2.90), se obtiene

$$J_\alpha(t) = -\frac{e}{\hbar} \int d\varepsilon \sum_l e^{-il\omega_0 t} \Gamma_\alpha(\varepsilon) \left\{ i \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}^*(-l, \varepsilon) [f_\alpha(\varepsilon - l\hbar\omega_0) - f_\alpha(\varepsilon)] \right. \\ \left. - \sum_{\beta=L,R} \sum_n \Gamma_\beta(\varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) [f_\beta(\varepsilon - n\hbar\omega_0) - f_\alpha(\varepsilon)] \right\}. \quad (5.5)$$

Por la estructura de la ecuación (5.5), calcular la componente continua de la corriente a partir del promedio en el período resulta equivalente a quedarse solamente con el término correspondiente a  $l = 0$ . Por lo tanto se puede probar que se recupera la Ec.(2.91) para la corriente dc.

## 5.2. Cálculo de la corriente de energía ac

Al igual que para la corriente de carga, se mostró en el Cap.2 Subsec.2.2.4 que la corriente de energía dependiente del tiempo que entra al reservorio  $\alpha$  se puede escribir como

$$W_\alpha^E(t) = -\frac{2}{\hbar} \text{Re} \left\{ \int d\varepsilon \left[ i G_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, \varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha(\varepsilon) \varepsilon + G_{l_\alpha, l_\alpha}^<(t, \varepsilon) \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(\varepsilon') \varepsilon'}{(\varepsilon - \varepsilon' - i0^+)} \right] \right\}.$$

Pasando a la representación de Floquet de la función de Green y siguiendo un procedimiento similar al presentado para la corriente de carga, se obtiene

$$W_\alpha^E(t) = -\frac{e}{\hbar} \int d\varepsilon \sum_l e^{-il\omega_0 t} \Gamma_\alpha \left\{ i \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}^*(-l, \varepsilon) [(\varepsilon - l\hbar\omega_0) f_\alpha(\varepsilon - l\hbar\omega_0) - \varepsilon f_\alpha(\varepsilon)] \right. \\ \left. - \sum_{n, \beta=L,R} \sum_n \Gamma_\beta \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \right. \\ \left. \left[ \left( \varepsilon - \frac{l\hbar\omega_0}{2} \right) f_\beta(\varepsilon - n\hbar\omega_0) - \varepsilon f_\alpha(\varepsilon) \right] \right\}, \quad (5.6)$$

donde también se utilizó la aproximación de densidad de estados constante en los reservorios, con lo que  $\Gamma_\alpha$  resulta independiente de la energía. También podemos comprobar evaluando la Ec.(5.6) para  $l = 0$  que se recupera la expresión para la corriente de energía dc (2.95).



### 5.3. Flujo de energía en el contacto

Al igual que para las corrientes que entran en el reservorio  $\alpha$ , la energía que fluye a través del contacto entre el reservorio  $\alpha$  y el sistema se puede definir a partir de la variación en el tiempo del Hamiltoniano  $H_{cont_\alpha}$  de la Ec. (2.47)

$$W_{T_\alpha}(t) = \langle \dot{H}_{cont_\alpha} \rangle = \sum_{k_\alpha, l_\alpha} \left[ w_{k_\alpha, l_\alpha} \frac{d \langle c_{k_\alpha}^\dagger(t) d_{l_\alpha}(t) \rangle}{dt} + h.c. \right], \quad (5.7)$$

que en término de las funciones de Green se escribe

$$W_{T_\alpha}(t) = -2 \sum_{k_\alpha, l_\alpha} \text{Im} \left\{ w_{k_\alpha, l_\alpha} \frac{dG_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t)}{dt} \right\}. \quad (5.8)$$

Haciendo un procedimiento análogo al de las secciones anteriores, se puede re-escribir este flujo de energía en término de las componentes de Floquet

$$W_{T_\alpha}(t) = \int \frac{d\varepsilon}{h} \omega_0 f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha \sum_l l \left[ 2\text{Im}\{e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}(l, \varepsilon)\} + \sum_{n, \beta} \Gamma_\beta \text{Re}\{e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon)\} \right]. \quad (5.9)$$

Es fácil probar que el término  $\sum_{l, n} l \text{Re}\{e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon)\}$  se anula,

$$\sum_{l>0} \sum_n \left( l \text{Re}\{e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon)\} - l \text{Re}\{e^{il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(-l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon)\} \right) =$$

$$\sum_{l>0} \sum_n l \left( \text{Re}\{e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(n, \varepsilon)\} - \text{Re}\{e^{il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^*(l+n, \varepsilon) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n, \varepsilon)\} \right) = 0.$$

Como consecuencia de esto, la variación de la energía almacenada en el contacto es

$$W_{T_\alpha}(t) = \int \frac{d\varepsilon}{h} \omega_0 f_\alpha(\varepsilon) \Gamma_\alpha \sum_l l 2\text{Im}\{e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\alpha}(l, \varepsilon)\}. \quad (5.10)$$

Combinando esta expresión con la Ec. (2.80), encontramos que

$$W_{T_\alpha}(t) = 2\text{Re}\left\{ \int \frac{d\varepsilon}{h} \partial_t G_{l_\alpha, l_\alpha}^R(t, \varepsilon) \Gamma_\alpha f_\alpha(\varepsilon) \right\}. \quad (5.11)$$

### 5.4. Expansión a bajas frecuencias

En el Cap.2 Subsec. 2.2.3 mostramos como se puede hallar una solución perturbativa de la ecuación de Dyson para amplitudes pequeñas de los potenciales alternos. Alternativamente, otra solución aproximada de esta ecuación se puede obtener para frecuencias de oscilación de los potenciales ac externos bajas, es decir para  $\omega_0 \rightarrow 0$ , de modo que las fuerzas externas aplicadas al sistema varían tan lentamente que son prácticamente constantes para los electrones que se propagan a través del sistema central. Por esta razón,

las propiedades del sistema van a ser próximas a las de una situación estacionaria, pero con la diferencia de que un electrón puede absorber o emitir cuantos de energía  $\hbar\omega_0$  en su viaje a través de la parte central del sistema. Bajo estas condiciones, es posible encontrar una solución exacta hasta orden  $\mathcal{O}(\omega_0)$  expandiendo la Ec. (2.78) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{G}^R(t, \varepsilon) \sim & \hat{G}^{(0)}(\varepsilon) + \hat{G}^R(t, \varepsilon) \hat{V}(t) \hat{G}^{(0)}(\varepsilon) + \\ & i\hbar \partial_\varepsilon \hat{G}^R(t, \varepsilon) \frac{d\hat{V}(t)}{dt} \hat{G}^{(0)}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Luego, se puede definir la función de Green **congelada** (frozen)

$$\hat{G}^f(t, \varepsilon) = \left[ \hat{G}^{(0)}(\varepsilon)^{-1} - \hat{V}(t) \right]^{-1}, \quad (5.13)$$

con  $\hat{G}^{(0)}(\varepsilon)$  la solución de la ecuación de Dyson (2.79). Como su nombre indica, describe al sistema como si fuese estacionario, tomando al tiempo  $t$  como parámetro fijo. En términos de esta función de Green, la solución exacta de la ecuación de Dyson hasta orden  $\mathcal{O}(\omega_0)$  se puede expresar como

$$\hat{G}^R(t, \varepsilon) = \hat{G}^f(t, \varepsilon) + i\hat{G}^{(1)}(t, \varepsilon), \quad (5.14)$$

con

$$\hat{G}^{(1)}(t, \varepsilon) = \frac{\hbar}{2} \partial_t \partial_\varepsilon \hat{G}^f(t, \varepsilon) + \frac{\hbar}{2} \left( \partial_\varepsilon \hat{G}^f(t, \varepsilon) \dot{\hat{V}}(t) \hat{G}^f(t, \varepsilon) - \hat{G}^f(t, \varepsilon) \dot{\hat{V}}(t) \partial_\varepsilon \hat{G}^f(t, \varepsilon) \right) \quad (5.15)$$

la contribución a primer orden en  $\omega_0$ .

La Ec. (5.15) muestra que esta expansión en potencias de  $\omega_0$  es en realidad una expansión en  $\hbar\omega_0/\delta\varepsilon$ , donde  $\delta\varepsilon$  es una escala característica de energía de la función de Green estacionaria. Esta energía está relacionada con la inversa del tiempo que permanece el electrón en el sistema central, y entonces se puede decir que la expansión adiabática es válida para fuerzas externas con períodos grandes comparados con este tiempo característico. Este tratamiento es independiente del presentado en el capítulo anterior, por lo que se puede aplicar para amplitudes de los potenciales arbitrarias.

La Ec.(2.80) establece una relación entre la función de Green retardada  $G^R(t, \varepsilon)$  y las componentes de Floquet  $\mathcal{G}(n, \varepsilon)$ , de modo que haciendo una expansión a bajas frecuencias de  $\mathcal{G}$  como

$$\mathcal{G}(n, \varepsilon) \sim \mathcal{G}^{(0)}(n, \varepsilon) + \hbar\omega_0 \mathcal{G}^{(1)}(n, \varepsilon) \quad (5.16)$$

podemos relacionar las componentes de Floquet con la función de Green congelada comparando con la Ec.(5.14),

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(0)}(n, \varepsilon) &= \int_0^\tau \frac{dt}{\tau} G^f(t, \varepsilon) e^{in\omega_0 t} \\ \hbar\omega_0 \mathcal{G}^{(1)}(n, \varepsilon) &= \int_0^\tau \frac{dt}{\tau} iG^{(1)}(t, \varepsilon) e^{in\omega_0 t}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

# Capítulo 6

## Bombeo de carga con campos magnéticos ac

*M. F. Ludovico and L. Arrachea, (2013). Pumping charge with ac magnetic fluxes and the dynamical breakdown of Onsager symmetry. Physical Review B, 87(11), 115408.*

En este capítulo estudiamos configuraciones que contienen unos o dos anillos conectados a dos reservorios de partículas diferentes. Ambos anillos son atravesados por flujos magnéticos armónicos de la forma  $\Phi(t) = \Phi^{\text{dc}} + \Phi^{\text{ac}} \cos(\omega_0 t + \delta)$  con componentes continua *dc* y alterna *ac*. Estos tipos de sistemas se comportan como bombecedores cuánticos, que inducen una corriente continua entre los dos reservorios. Uno de los principales objetivos es identificar bajo qué condiciones se espera tener en estos dispositivos una corriente con componente lineal en la frecuencia de oscilación  $\omega_0$ , es decir dentro del régimen adiabático.

Luego, la segunda meta de este capítulo es analizar las simetrías de la corriente ante inversión de la componente estática del flujo magnético en configuraciones que contengan anillos atravesados por flujos alternos. Con este fin, definimos los coeficientes de transporte para caracterizar la corriente continua *dc* y analizar las propiedades de simetría de los coeficientes como función de  $\Phi^{\text{dc}}$ .

El capítulo está organizado de la siguiente manera. En la Sec. 6.1 presentamos el modelo y las definiciones de los diferentes coeficientes de transporte, en la Sec. 6.2 discutimos las condiciones para generar bombeo de carga en el régimen adiabático. La siguiente sección está destinada al análisis de las propiedades de simetría de la corriente bombeada como función de la componente estática del flujo magnético. Este análisis se extiende en la Sec. 6.4, donde a su vez consideramos el efecto de una diferencia de voltaje aplicada entre los dos reservorios. Por último, en la Sec. 6.5 cerramos el capítulo con un resumen y conclusiones.

### 6.1. Enfoque teórico

#### 6.1.1. Modelo

El sistema que consideramos se encuentra ilustrado en la Fig. 6.1. El mismo consiste en una estructura formada por uno o dos anillos de perímetro  $L$ , que son atravesados por flujos magnéticos armónicos en el tiempo de la forma  $\Phi_j(t) = \Phi_j^{\text{dc}} + \Phi_j^{\text{ac}} \cos(\omega_0 t + \delta_j)$ . Los anillos son etiquetados con el índice  $j = 1, 2$  y se encuentran conectados a cadenas unidimensionales a la izquierda ( $L$ ) y a la derecha ( $R$ ), que cumplen el rol de reservorios de partículas.

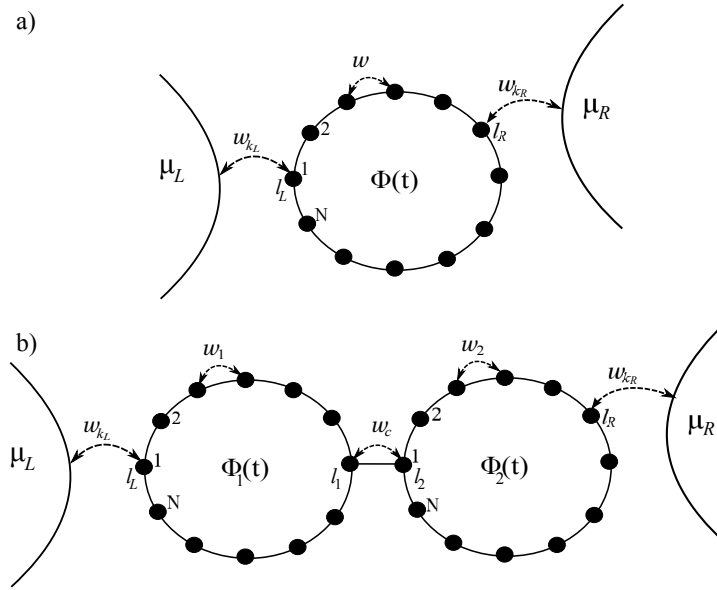


Figura 6.1: Esquemas de los sistemas considerados en el Capítulo 6. Panel a): un único anillo metálico atravesado por un flujo magnético  $\Phi(t)$  y conectado a dos reservorios de partículas con potenciales químicos  $\mu_L$  y  $\mu_R$  respectivamente. Panel b): dos anillos conectados entre sí y atravesados por flujos magnéticos  $\Phi_j(t) = \Phi_j^{\text{dc}} + \Phi_j^{\text{ac}} \cos(\omega_0 t + \delta_j)$ ,  $j = 1, 2$ . Los anillos son descritos por cadenas en el modelo tight-binding con  $N$  sitios. Los reservorios están acoplados a los sitios  $l_L$  y  $l_R$  mediante contactos puntuales con amplitudes  $w_{k_L}$  y  $w_{k_R}$ .

El Hamiltoniano del sistema es

$$H = H_r(t) + \sum_{\alpha=L,R} H_\alpha + H_{\text{cont}}. \quad (6.1)$$

Los Hamiltonianos de los anillos corresponden a modelos de enlaces fuertes (tight-binding) con parámetro de red  $a$  y  $N$  sitios cada uno, de modo que  $L = aN$ ,

$$H_r(t) = - \sum_{j=1}^2 w_j \sum_{l=1}^N \left[ e^{-i\phi_j(t)} c_{l,j}^\dagger c_{l+1,j} + H.c. \right] + \\ - w_c \left[ c_{l_1,1}^\dagger c_{l_2,2} + H.c. \right]. \quad (6.2)$$

Las fases  $\phi_j(t) = 2\pi\Phi_j(t)/L$ ,  $j = 1, 2$  son factores de Pierls, que dan cuenta de los flujos magnéticos que atraviesan los anillos en unidades del cuanto de flujo  $\Phi_0 = hc/e$ . Por simplicidad, no consideramos el grado de libertad de espín de los electrones e impusimos condiciones de contorno periódicas  $N + 1 \equiv 1$  para cada anillo. El número de sitios  $N$  determina la cantidad de niveles discretos del anillo cuando se encuentra aislado, que a su vez están dentro del rango de energías  $[-2w, 2w]$ . Es por eso que el número  $N$  también fija el espaciado típico entre niveles, siendo  $\Delta = 4w/N$ .

Los últimos términos en la Ec. 6.2 representan al acoplamiento entre los dos anillos. Los reservorios están descritos por Hamiltonianos del tipo no interactuante  $H_\alpha =$

$\sum_{k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}$ . Los Hamiltonianos que representan los contactos entre los reservorios y los anillos son

$$H_{cont} = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k_\alpha} w_{k_\alpha} \left[ c_{k_\alpha}^\dagger c_{l_\alpha} + H.c. \right], \quad (6.3)$$

donde los  $l_\alpha$  son los sitios del anillo a los cuales se conectan los reservorios. El caso de un solo anillo se recupera fijando  $w_2 = w_c = 0$  en  $H_r(t)$  y con los  $l_\alpha$  pertenecientes solamente al primer anillo. En adelante, para simplificar la notación, adoptamos las unidades  $e = c = \hbar = 1$  y parámetro de red  $a = 1$ . Vamos a retomar las unidades cuando sea necesario para el análisis de los resultados.

### 6.1.2. Corriente continua y coeficientes de transporte

En el caso más general, podemos suponer que también existe una pequeña diferencia de voltaje  $V$  aplicada, la cual se representa con una diferencia entre el potencial químico del reservorio  $L$  y el del  $R$ ;  $\mu_L = \mu + V$  y  $\mu_R = \mu$  respectivamente. Con el objetivo de analizar los coeficientes de transporte, seguimos el procedimiento presentado en el Capítulo 2 Sec. 2.2 para sistemas con potenciales periódicos. En la representación de Floquet-Fourier, la corriente dc que fluye por el contacto  $\alpha$  entre el reservorio y el anillo al que se encuentra conectado es

$$J_\alpha^{dc} = \sum_{\beta=L,R} \sum_n \int \frac{d\omega}{2\pi} [f_\beta(\omega) - f_\alpha(\omega + n\omega_0)] \times \Gamma_\alpha(\omega + n\omega_0) |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}(n, \omega)|^2 \Gamma_\beta(\omega), \quad (6.4)$$

donde  $\Gamma_\alpha(\omega) = 2\pi \sum_{k_\alpha} |w_{k_\alpha}|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{k_\alpha})$  and  $f_\alpha$  es la función de Fermi correspondiente al reservorio  $\alpha$  en equilibrio. En este capítulo consideramos que el sistema se encuentra a temperatura  $T = 0$ , y entonces  $f_\alpha = \Theta(\mu_\alpha - \omega)$ .

Para diferencias de voltajes  $V$  muy pequeñas y frecuencias del flujo magnético  $\omega_0$  bajas, la Ec.6.4 para la corriente continua en los contactos puede ser expresada como

$$J_\alpha^{dc} = G_{dc}^V V + G_{dc}^a \omega_0 + G_{dc}^{ma} \omega_0^2 + G_{dc}^{mix} V \omega_0, \quad (6.5)$$

que satisface  $J_L^{dc} = -J_R^{dc}$ , como es de esperar debido a la conservación de la carga. En la expresión anterior definimos cuatro coeficientes de transporte. El coeficiente  $G_{dc}^V$  es la conductancia dc lineal usual,  $G_{dc}^a$  es el coeficiente relacionado con la corriente de bombeo en el régimen adiabático,  $G_{dc}^{ma}$  es el coeficiente de transporte no adiabático y  $G_{dc}^{mix}$  es el coeficiente que cuantifica el efecto de tener simultáneamente una diferencia de voltaje dc  $V$  y bombeo con campos alternos para generar una corriente con componente continua. Las expresiones para los coeficientes son

$$\begin{aligned} G_{dc}^a &= \sum_{\beta=L,R} \sum_n n \Gamma_\beta(\mu) \Gamma_\alpha(\mu) |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^0(n, \mu)|^2, \\ G_{dc}^{mix} &= - \sum_{\substack{\beta=L,R \\ \beta \neq \alpha}} \sum_n \Gamma_\beta(\mu) \Gamma_\alpha(\mu) \left[ n \partial_\omega |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^0(n, \omega)|^2 \delta_{\alpha,L} \right. \\ &\quad \left. - 2\text{Re} \left( \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^0(n, \omega) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^{1*}(n, \omega) \right) \right] \Big|_{\omega=\mu}, \\ G_{dc}^{ma} &= \sum_{\beta=L,R} \sum_n \Gamma_\beta(\mu) \Gamma_\alpha(\mu) \left[ \frac{n^2}{2} \partial_\omega^2 |\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^0(n, \omega)|^2 \right. \\ &\quad \left. + n 2\text{Re} \left( \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^0(n, \omega) \mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^{1*}(n, \omega) \right) \right] \Big|_{\omega=\mu}, \end{aligned} \quad (6.6)$$

donde los elementos de matriz  $\mathcal{G}_{l_\alpha, l_\beta}^k(n, \omega)$  con  $k = 0, 1$  corresponden a la expansión a bajas frecuencias de la función de Green

$$\hat{\mathcal{G}}(n, \omega) \sim \hat{\mathcal{G}}^0(n, \omega) + \omega_0 \hat{\mathcal{G}}^1(n, \omega). \quad (6.7)$$

En este momento es interesante mencionar que, cuanto se recuperan las constantes  $e$  y  $h$ , resulta  $G_{\text{dc}}^V \propto e^2/h$  mientras que el coeficiente adiabático  $G_{\text{dc}}^a \propto e$ . En el régimen adiabático, este último es el único coeficiente no nulo y esta relacionado con la carga promedio mediante  $Q_{\text{dc}} = 2\pi G_{\text{dc}}^a$ , con

$$Q_{\text{dc}} = \tau J^{\text{dc}}, \quad (6.8)$$

siendo  $\tau = 2\pi/\omega_0$  el período del flujo oscilante. En las secciones siguientes, vamos a analizar la dependencia de los coeficientes de bombeo no nulos con los parámetros y las simetrías de las diferentes configuraciones. Por otra parte, vamos a discutir también las propiedades de simetría de la corriente como función de  $\Phi_j^{\text{dc}}$ ,  $j = 1, 2$ .

### 6.1.3. Evaluando la función de Green retardada

En esta subsección presentamos diferentes estrategias que vamos a llevar adelante para evaluar en diferentes límites la función de Green retardada que aparece en la corriente

#### Amplitudes $\phi_j^{\text{dc}}$ pequeñas

Para calcular la función de Green en forma exacta hay que resolver la ecuación de Dyson (2.78). Para amplitudes de la parte alterna del flujo magnético chicas  $\phi_1^{\text{ac}}$  y  $\phi_2^{\text{ac}}$  y frecuencias arbitrarias  $\omega_0$ , es posible resolver esta ecuación en forma perturbativa (ver Capítulo 2 Subsec.2.2.3). Es conveniente empezar expandiendo el Hamiltoniano  $H_r(t)$  en potencias de  $\phi_1^{\text{ac}}$ ,  $\phi_2^{\text{ac}}$ . Manteniendo solamente los términos lineales en estos parámetros, tenemos

$$H_r(t) \sim H_0 + \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^N \left[ \mathcal{V}^{(j)}(t) c_{l,j}^\dagger c_{l+1,j} + H.c. \right], \quad (6.9)$$

con

$$\mathcal{V}^{(j)}(t) = iw_j e^{-i\phi_j^{\text{dc}}} \phi_j^{\text{ac}} \cos(\Omega_0 t + \delta_j), \quad (6.10)$$

y

$$\begin{aligned} H_0 = & - \sum_{j=1}^2 w_j \sum_{l=1}^N \left[ e^{-i\phi_j^{\text{dc}}} c_{l,j}^\dagger c_{l+1,j} + H.c. \right] \\ & - w_c \left[ c_{l_1,1}^\dagger c_{l_2,2} + H.c. \right], \end{aligned} \quad (6.11)$$

donde  $\phi_j^{\text{dc,ac}} = 2\pi\Phi_j^{\text{dc,ac}}/L$ ,  $j = 1, 2$ . La correspondiente solución perturbativa a la Ec. (2.78) queda

$$\begin{aligned} \hat{G}^R(t, \omega) \sim & \hat{G}^0(\omega) + \sum_{n=-1, n \neq 0}^1 e^{-in\omega_0 t} \\ & \times \hat{G}^0(\omega + n\omega_0) \hat{\mathcal{V}}^n \hat{G}^0(\omega), \end{aligned} \quad (6.12)$$

donde  $\hat{\mathcal{V}}^n = \hat{\mathcal{V}}^{n,(1)} + \hat{\mathcal{V}}^{n,(2)}$ , con elementos de matrices

$$\mathcal{V}_{l,l'}^{\pm 1,(j)} = iw_j \frac{\phi_j^{\text{ac}}}{2} \left[ \delta_{l',l+1} e^{-i\phi_j^{\text{dc}}} - \delta_{l',l-1} e^{i\phi_j^{\text{dc}}} \right], \quad j = 1, 2, \quad (6.13)$$

siendo  $l, l'$  sitios del anillo  $j = 1, 2$ . Todo este procedimiento se puede extender sistemáticamente para considerar soluciones a ordenes más altos en  $\phi_1^{\text{ac}}, \phi_2^{\text{ac}}$ .

### Un anillo débilmente acoplado a los reservorios

En el caso de un único anillo, una posible manera de calcular la función de Green retardada, consiste en comenzar a partir del límite en el que el anillo esta completamente desacoplado de los reservorios. El correspondiente Hamiltoniano puede ser escrito como

$$H_r(t) = -w \sum_k \varepsilon_k(\phi(t)) c_k^\dagger c_k, \quad (6.14)$$

donde  $c_k = 1/\sqrt{N} \sum_{l=1}^N e^{-ikl} c_l$ , con  $k = 2m\pi/N$ ,  $-N/2 \leq m < N/2$  y  $\varepsilon_k(\phi(t)) = -2w \cos(k + \phi(t))$ .

La función de Green retardada exacta para este problema es

$$\begin{aligned} g_{l,l'}^R(t, t') &= \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(l-l')} g_k^R(t, t'), \\ g_k^R(t, t') &= -i\Theta(t-t') \exp\left\{-i \int_{t'}^t dt_1 \varepsilon_k(\phi(t_1))\right\}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

En el límite de  $\phi^{\text{ac}}$  pequeño, y manteniendo solamente los términos hasta primer orden en este parámetro, podemos expresar

$$g_k^R(t, t') = \sum_{n=-1}^1 e^{-in\omega_0 t} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} g_k(n, \omega), \quad (6.16)$$

siendo

$$\begin{aligned} g_k(0, \omega) &= g_k^0(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k(\phi^{\text{dc}}) + i\eta}, \\ g_k(\pm 1, \omega) &= \pm \frac{\phi^{\text{ac}} v_k(\phi^{\text{dc}})}{2\omega_0} [g_k^0(\omega) - g_k^0(\omega \pm \omega_0)], \end{aligned} \quad (6.17)$$

con

$$\begin{aligned} \varepsilon_k(\phi^{\text{dc}}) &= -2w \cos(k + \phi^{\text{dc}}), \\ v_k(\phi^{\text{dc}}) &= 2w \sin(k + \phi^{\text{dc}}). \end{aligned} \quad (6.18)$$

La función de Green incluyendo ahora el acoplamiento con los reservorios es la solución de la siguiente ecuación de Dyson

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}(m, \omega) &= \hat{g}(m, \omega) + \sum_n \hat{\mathcal{G}}(m-n, \omega + n\omega_0) \\ &\quad \times \hat{\Sigma}(\omega + n\omega_0) \hat{g}(n, \omega), \end{aligned} \quad (6.19)$$

donde la matriz  $\hat{g}(n, \omega)$  tiene elementos  $g_{l,l'}(n, \omega)$ . Esta ecuación puede ser resuelta en forma exacta o puede ser utilizada para obtener soluciones perturbativas, en el acoplamiento con los reservorios.

## 6.2. Condiciones para bombeo adiabático

Nuestro primer paso es analizar las condiciones para tener bombeo en el régimen adiabático, lo cual implica un coeficiente  $G_{\text{dc}}^a$  no nulo. Podemos comenzar identificando el primer término de la expansión (6.7) con la función de Green congelada introducida en el capítulo anterior Sec. 5.4

$$\hat{G}^0(n, \omega) = \int_0^\tau \frac{dt}{\tau} \hat{G}^f(t, \omega) e^{in\Omega_0 t}. \quad (6.20)$$

Reemplazando esta expresión en el coeficiente adiabático de la Ec.(6.6), se obtiene

$$G_{\text{dc}}^a = \sum_{\beta=L,R} \Gamma_\beta(\mu) \Gamma_\alpha(\mu) \times \frac{1}{2\pi} \int_0^\tau dt \text{Im} \left( G_{l_\alpha, l_\beta}^f(t, \mu) \partial_t G_{l_\alpha, l_\beta}^{f*}(t, \mu) \right), \quad (6.21)$$

En la Ref. [1] se mostró que son necesarios al menos dos parámetros para generar bombeo adiabático. En lo que sigue, vamos a mostrar que, en este contexto, esto implica al menos dos anillos diferentes atravesados por dos flujos magnéticos distintos.

### 6.2.1. Un solo anillo

La primera pregunta que surge es acerca de la posibilidad de implementar en un anillo conducción con un campo magnético caracterizado por uno o dos parámetros. Esta posibilidad correspondería a un anillo atravesado por un flujo magnético que tenga muchos armónicos de la forma  $\Phi(t) = \Phi^{\text{dc}} + \sum_{m=1}^M \Phi^{ac,(m)} \cos(m\omega_0 t + \delta_m)$ . En este caso, podemos reescribir el Hamiltoniano del anillo como

$$\hat{H}_r(t) = e^{i\phi(t)} \hat{W} + e^{-i\phi(t)} \hat{W}^\dagger, \quad (6.22)$$

donde  $W_{l,l'} = -w\delta_{l',l+1}$ , con  $l = 1, N$  y  $N + 1 \equiv 1$ .

Ahora, a partir de este Hamiltoniano, podemos expresar la función de Green congelada que aparece en la Ec. 6.21 en término de matrices  $T$

$$\hat{G}^f(t, \omega) = \hat{g}^f(\omega) + \hat{g}^f(\omega) \hat{T}^f(t, \omega) \hat{g}^f(\omega), \quad (6.23)$$

siendo  $\hat{g}^f(\omega) = \left[ \omega \hat{1} - \hat{\Sigma}(\omega) \right]^{-1}$ , y

$$\hat{T}^f(t, \omega) = \hat{H}_r(t) + \hat{H}_r(t) \hat{g}^f(\omega) \hat{H}_r(t) + \dots \quad (6.24)$$

Reemplazando (6.22) es posible verificar que la matriz  $T$  tiene la siguiente estructura

$$\hat{T}^f(t, \omega) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \hat{T}^{(n)}(\omega) e^{in\phi(t)}, \quad (6.25)$$

y cuando se sustituye esta última ecuación en (6.23), se puede ver que  $\hat{G}^f(t, \omega)$  queda representada como serie de potencias de  $e^{i\phi(t)}$ ,

$$\hat{G}^f(t, \omega) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\phi(t)} \hat{G}^{(n)}(\omega). \quad (6.26)$$



Así, la integral en el tiempo de (6.21) queda proporcional a

$$\sum_{n,m} \int_0^\tau dt \frac{d\phi(t)}{dt} n e^{i(n-m)\phi(t)} G_{l_\alpha, l_\beta}^{(m)}(\mu) \left[ G_{l_\alpha, l_\beta}^{(n)}(\mu) \right]^*, \quad (6.27)$$

que se anula para cualquier  $\phi(t)$  periódico, implicando un coeficiente adiabático  $G_{dc}^a$  nulo. A partir de este análisis, concluimos que no es posible generar una corriente de bombeo adiabática mediante la aplicación en un anillo de flujos magnéticos puramente armónicos.

### 6.2.2. Dos anillos

Para amplitudes chicas de las componentes alternas de los flujos magnéticos, podemos considerar el Hamiltoniano (6.9) para encontrar que la función de Green congelada a primer orden en  $\phi_j(t)$  es

$$\hat{G}^f(t, \omega) = \hat{G}^0(\omega) + \sum_{j=1}^2 \phi_j(t) \hat{G}^0(\omega) \hat{J}_j \hat{G}^0(\omega), \quad (6.28)$$

siendo  $\hat{G}^0(\omega)^{-1} = \hat{1}\omega - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}$ , con  $H_0$  definido en (6.11), y

$$\hat{J}_j = i \left( \hat{W}_j e^{i\phi_j^{dc}} - \hat{W}_j^\dagger e^{-i\phi_j^{dc}} \right), \quad (6.29)$$

define una matriz asociada al operador de corriente persistente del anillo  $j$ .

Utilizando la Ec.(6.28), se obtiene el siguiente coeficiente adiabático

$$G_{dc}^a = \frac{\lambda^{(1)}}{2\pi} \int_0^\tau dt \phi_1^{ac}(t) \frac{d\phi_2^{ac}(t)}{dt} + \frac{\lambda^{(2)}}{2\pi} \int_0^\tau dt \phi_2^{ac}(t) \frac{d\phi_1^{ac}(t)}{dt}, \quad (6.30)$$

con

$$\begin{aligned} \lambda^{(1)} &= \sum_{\beta=L,R} \Gamma_\beta(\mu) \Gamma_\alpha(\mu) \text{Im} \left[ \Lambda_1(\mu)_{l_\alpha, l_\beta} \Lambda_2(\mu)_{l_\alpha, l_\beta}^* \right], \\ \lambda^{(2)} &= \sum_{\beta=L,R} \Gamma_\beta(\mu) \Gamma_\alpha(\mu) \text{Im} \left[ \Lambda_2(\mu)_{l_\alpha, l_\beta} \Lambda_1(\mu)_{l_\alpha, l_\beta}^* \right], \end{aligned} \quad (6.31)$$

y

$$\hat{\Lambda}_j(\mu) = \hat{G}^0(\mu) \hat{J}_j \hat{G}^0(\mu), \quad (6.32)$$

Estas ecuaciones nos permiten identificar dos condiciones para tener una corriente adiabática no nula. De hecho, luego de hacer los cálculos explícitamente de la Ec. (6.30), resulta fácil verificar que  $G_{dc}^a \propto \phi_1^{ac} \phi_2^{ac} \sin(\delta_1 - \delta_2)$ . Entonces, la primer condición es una diferencia de fase para los flujos ac,  $\delta_1 - \delta_2 \neq n\pi$ . La otra condición se determinada pidiendo que los elementos de matriz  $\Lambda_j(\mu)_{l_\alpha, l_\beta}$  sean no nulos, lo que implica que los flujos magnéticos dc que atraviesan ambos anillos satisfagan  $2\pi\Phi_j^{dc} \neq n\pi$ . Estas dos condiciones están en acuerdo con los resultados para dos anillos de la Ref.[2], en la que los campos magnéticos armónicos que atraviesan los anillos oscilan con una diferencia de fase entre sí e igual amplitud. En la Fig. 6.2 mostramos que estas condiciones también siguen siendo válidas para amplitudes de las componentes ac arbitrarias, no necesariamente chicas. Observamos que a medida que la amplitud de las componentes ac aumenta,  $G_{dc}^a$  como

función de  $\delta_1 - \delta_2$  muestra una estructura un poco más compleja que la simple senoide predicha por el resultado para pequeñas amplitudes de la Ec.(6.30). Sin embargo, la condición de que se anule el coeficiente adiabático cuando la diferencia de fases coincide con un valor entero de  $\pi$  se verifica en todos los casos. Como función del campo magnético, se observa también que a medida que las amplitudes ac de los flujos aumentan, hay cambios de signo en el comportamiento de la corriente de bombeo. Pero a su vez, esta corriente se anula para  $2\pi\Phi_j^{\text{dc}} = n\pi$ . Detalles más profundos sobre el comportamiento de  $G_{\text{dc}}^a$  como función de  $\Phi_j^{\text{dc}}$  van a ser analizados en la próxima sección.

## 6.3. Dependencia de la corriente bombeada con el flujo magnético estático

### 6.3.1. Un solo anillo

Como se discutió en la sección anterior, no es posible generar en este caso una corriente de bombeo dentro del régimen adiabático. El coeficiente de transporte no adiabático  $G_{\text{dc}}^{ma}$  es sin embargo no nulo, y a lo largo de esta sección vamos a estudiar su comportamiento como función del flujo magnético dc. En particular, estamos interesados en analizar si la corriente bombeada no adiabática tiene una paridad definida como función del flujo magnético dc. En el límite de acoplamiento débil entre el anillo y los reservorios y amplitudes pequeñas de los flujos ac, es posible encontrar una expresión analítica para  $G_{\text{dc}}^{ma}$ . Evaluar la corriente continua  $J_{\alpha}^{\text{dc}}$  a orden más bajo en los acoplamientos  $|w_{\alpha}|^2$ , corresponde a considerar  $\hat{\Sigma}(\omega) \rightarrow 0$  en (6.19). Esto implica que  $\hat{\mathcal{G}}(m, \omega) \sim \hat{g}(m, \omega)$ . Para frecuencias bajas  $\omega_0$ , si se hace la expansión de la Ec.(6.7) en estas funciones de Green se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{l_{\alpha}, l_{\beta}}^0(\pm 1, \omega) &= -\frac{\phi^{\text{ac}}}{2N} \sum_k v_k(\phi^{\text{dc}}) \frac{dg_k^0}{d\omega} e^{-ik(l_{\alpha} - l_{\beta})}, \\ \mathcal{G}_{l_{\alpha}, l_{\beta}}^1(\pm 1, \omega) &= \mp \frac{\phi^{\text{ac}}}{4N} \sum_k v_k(\phi^{\text{dc}}) \frac{d^2 g_k^0}{d\omega^2} e^{-ik(l_{\alpha} - l_{\beta})}. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Reemplazando estas expresiones en el coeficiente no adiabático (6.6) se tiene

$$\begin{aligned} G_{\text{dc}}^{ma} &= \Gamma_L(\mu) \Gamma_R(\mu) \frac{(\phi^{\text{ac}})^2}{4N^2} \sum_{k, k'} v_k(\phi^{\text{dc}}) v_{k'}(\phi^{\text{dc}}) \times \\ &2\text{Re} \left[ \frac{dg_k^0}{d\omega} \frac{d^2 g_{k'}^{0*}}{d\omega^2} (1 + e^{i(k-k')(l_L - l_R)}) \right] \Big|_{\omega=\mu}, \end{aligned} \quad (6.34)$$

donde  $l_L$  y  $l_R$  son los sitios del anillo en donde se conectan los reservorios izquierdo y derecho respectivamente. La dependencia de este coeficiente en el flujo magnético dc es a través de las energías  $\varepsilon_k(\phi^{\text{dc}})$  y las corrientes  $v_k(\phi^{\text{dc}})$  dadas en la Ec.(6.18). En el caso en el que los reservorios están simétricamente conectados al anillo, tenemos  $l_R - l_L = N/2$ , que corresponde a  $e^{i(k-k')(l_L - l_R)} = e^{in\pi}$ . La suma en (6.34) es, invariante ante el cambio  $k \rightarrow -k$  y  $k' \rightarrow -k'$ . Como  $\varepsilon_{-k}(-\phi^{\text{dc}}) = \varepsilon_k(\phi^{\text{dc}})$  y  $v_{-k}(-\phi^{\text{dc}}) = -v_k(\phi^{\text{dc}})$  podemos concluir que el coeficiente no adiabático  $G_{\text{dc}}^{ma}$  es una función par en el flujo magnético dc  $\Phi^{\text{dc}}$  cuando los reservorios están simétricamente conectados. Sin embargo, cuando los reservorios están conectados en posiciones arbitrarias, el factor de fase  $e^{i(k-k')(l_L - l_R)}$  ya no es más invariante ante inversiones de  $k$ . Entonces, el coeficiente  $G_{\text{dc}}^{ma}$  no tiene una simetría definida como función de  $\Phi^{\text{dc}}$ .

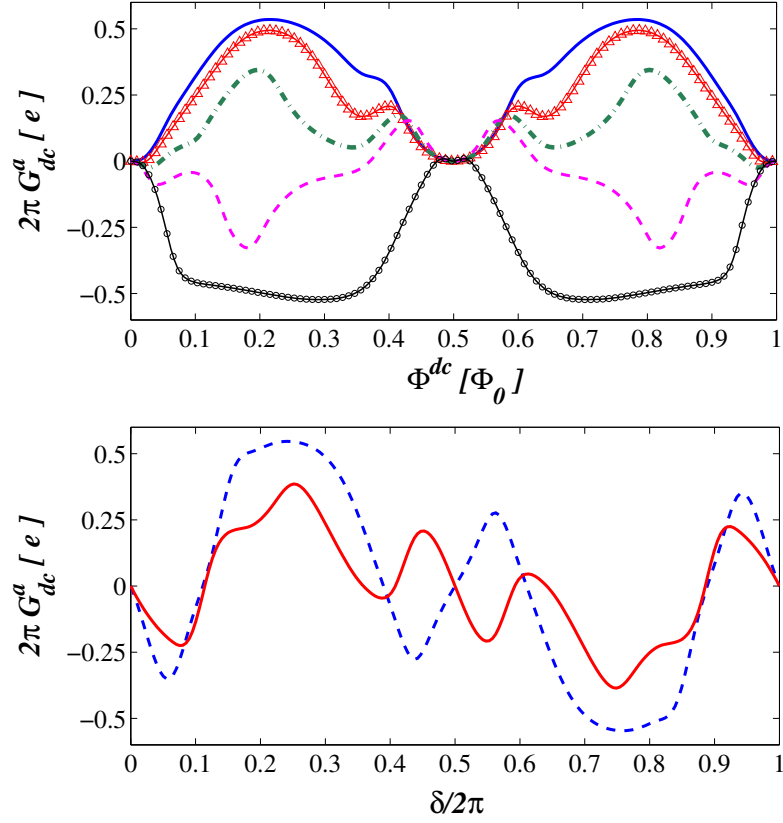


Figura 6.2: Carga media transmitida en un dado período,  $Q_{dc} = 2\pi G_{dc}^a$ , como función de la componente continua del campo magnético  $\Phi^{dc}$ , para dos anillos con  $N = 10$  sitios conectados a  $l_1 = 6$  y  $l_2 = 1$  con  $w_c = 1$ . Los contactos son conectados al anillo en forma simétrica con  $w_L^2 = 0,5$  y  $w_R^2 = 0,2$ . Los potenciales químicos son los mismos para los dos reservorios,  $\mu_L = \mu_R = 0,18$ , los cuales se encuentran entre dos niveles resonantes del anillo cuando  $\Phi^{dc} = 0$ . Las energías están en unidades del elemento de salto  $w$ . Consideramos  $\Phi^{dc} = \Phi_1^{dc} = \Phi_2^{dc}$ . El flujo ac del anillo de la izquierda está fijo en  $\Phi_1^{ac} = 0,32$ , mientras que  $\Phi_2^{ac}$  es variado. Las fases de los flujos son  $\delta_1 = 0$  y  $\delta_2 = \pi/2$ . Línea sólida, triángulos, línea con punto y raya, línea punteada y círculos corresponden respectivamente a  $\Phi_2^{ac} = 0,7, 0,6, 0,56, 0,47, 0,32$ . Segundo panel:  $2\pi G_{dc}^a$  como función de la diferencia de fases entre los flujos ac  $\delta_2 - \delta_1 = \delta$  dividido por  $2\pi$ . La componente ac de los flujos son  $\Phi_1^{ac} = 0,32$ ,  $\Phi_2^{ac} = 0,8$ , y los flujos dc de los anillos son iguales. Línea punteada y sólida corresponden a  $\Phi^{dc} = 0,22, 0,6$ . Todos los flujos están expresados en unidades del cuanto de flujo  $\Phi_0 = hc/e$ .

En la Fig. 6.3 mostramos el comportamiento de la corriente bombeada no adiabática como función de  $\Phi^{dc}$ , para un anillo atravesado por un flujo magnético con una componente alterna  $\Phi^{ac}$  y reservorios conectados en posiciones simétricas y asimétricas. Estos resultados los obtuvimos resolviendo numéricamente la ecuación de Dyson (2.78) en el límite de  $\phi^{ac}$  pequeños. Para obtener una corriente de bombeo no nula, es necesario romper la simetría de inversión espacial, [3] que en nuestro caso se obtiene conectando los reservorios con diferentes amplitudes  $w_L \neq w_R$ . Estos resultados muestran que la con-

clusión anterior sobre el comportamiento de la corriente de bombeo como función de  $\Phi^{\text{dc}}$  sigue siendo válida para acoplamientos arbitrarios entre el anillo y los reservorios. De hecho, la corriente de bombeo es una función par de  $\Phi^{\text{dc}}$  cuando los reservorios se encuentran acoplados en posiciones simétricas a lo largo del anillo, y no tiene ninguna simetría en particular cuando el acople es asimétrico.

Otra característica a remarcar, que se observa en algunos casos con acoplamiento entre los reservorios asimétrico (mirar la curva con círculos en Fig. 6.3), es el hecho de que la corriente dc cambia como función de la frecuencia  $\omega_0$  de un comportamiento paramagnético (caracterizado por una amplitud nula en  $\Phi^{\text{dc}} = 0$  para bajas  $\omega_0$ ) a uno diamagnético (caracterizado por una amplitud apreciable en  $\Phi^{\text{dc}} = 0$ ). Hemos verificado que este cambio en el comportamiento tiene lugar para frecuencias  $\hbar\omega_0/\Delta \sim 1$ , que corresponde a una resonancia con el espaciado medio entre niveles, y entonces es causado por efectos de interferencia introducidos por los flujos ac .

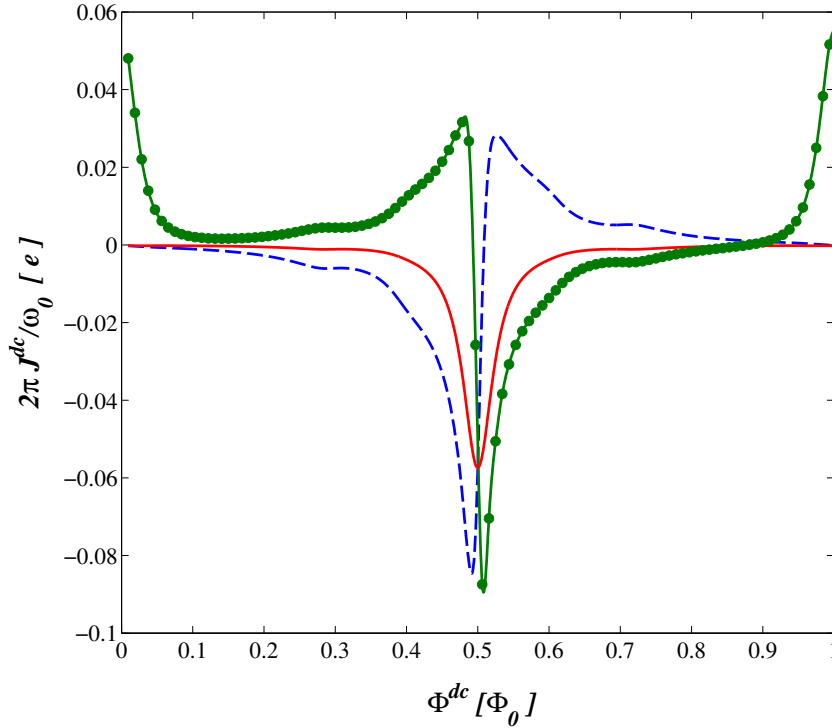


Figura 6.3: Corriente de bombeo para un anillo multiplicada por el período del flujo oscilante  $2\pi/\omega_0$ , como función de la componente dc del flujo  $\Phi^{\text{dc}}$ . Esta magnitud está relacionada con la carga media transmitida en un dado período. La frecuencia del flujo ac  $\omega_0$  está en resonancia con el espaciado entre niveles del anillo típico  $\Delta$ ,  $\hbar\omega_0/\Delta = 1$ . La componente ac del flujo magnético es  $\Phi^{\text{ac}} = 0,03$  y  $\delta = 0$ . Los flujos están en unidades de  $\Phi_0$ . La línea sólida corresponde a reservorios conectados en posiciones simétricas del anillo, mientras que la línea punteada y los círculos corresponden a acoplamientos asimétricos con  $l_R - l_L = 4$  y  $l_R - l_L = 7$ , respectivamente. Los otros detalles son los mismos que en la Fig. 6.2.

### 6.3.2. Dos anillos

En la sección previa mostramos que, en el caso de dos anillos, es posible generar una corriente de bombeo finita dentro del régimen adiabático. El correspondiente coeficiente de transporte está dado en la Ec.(6.30), y ahora nos vamos a enfocar en sus propiedades de simetría como función de las componentes dc de los flujos  $\Phi_j^{\text{dc}}$ . La dependencia de  $G_{\text{dc}}^a$  en  $\Phi_j^{\text{dc}}$  está dentro de los coeficientes  $\lambda^{(j)}$  a través de los elementos de matriz  $\Lambda_j(\mu)_{l_\alpha, l_\beta}$ . Esta matriz está definida en la Ec. (6.32). El operador de energía cinética para cada anillo,  $\hat{W}_j e^{i\phi_j^{\text{dc}}} + \hat{W}_j^\dagger e^{-i\phi_j^{\text{dc}}}$  de la función de Green  $\hat{G}^0(\omega)$  es una función par ante la transformación  $\mathcal{S}_j : \phi_j^{\text{dc}} \rightarrow -\phi_j^{\text{dc}}, (l, j) \rightarrow (-l, j)$ , que corresponde a la inversión simultánea de los flujos  $\phi_j^{\text{dc}}$  y una inversión espacial a lo largo de la circunferencia del anillo. Mientras que el operador corriente  $\hat{J}_j$  es impar ante esta transformación.

Curiosamente, para reservorios conectados simétricamente, el coeficiente de transporte  $G_{\text{dc}}^a$  y la correspondiente corriente adiabática son funciones impares en cada uno de los flujos dc considerados independientes uno del otro. Esto está ilustrado en el primer panel de la Fig. 6.4. Sin embargo, este coeficiente de transporte es una función par del flujo magnético dc cuando es simultáneamente variado en los dos anillos, como se muestra en el segundo panel de la Fig. 6.4. Para acoplamientos arbitrarios entre los anillos y los reservorios, la corriente de bombeo no tiene una simetría particular como función de los flujos dc. Esto es ilustrado en la Fig. 6.5, donde se muestra el coeficiente de transporte adiabático para el caso de dos anillos conectados a los reservorios en forma asimétrica.

## 6.4. Flujo magnético alterno y diferencia de voltaje entre terminales

En esta sección completamos el análisis de las propiedades de simetría de la corriente continua como función de la componente dc del flujo magnético, agregando el efecto de una diferencia de voltaje entre los dos reservorios.

### 6.4.1. Un solo anillo

En este caso, hemos mostrado en la Sec.6.2 que el coeficiente adiabático es  $G_{\text{dc}}^a = 0$ . Un análisis similar conduce a que  $G_{\text{dc}}^{\text{mix}} = 0$ , lo que significa que para pequeños voltajes  $V$  y frecuencias  $\omega_0$  el voltaje y el bombeo contribuyen a la corriente dc independientemente. Es sabido que la conductancia lineal estacionaria obedece relaciones de Onsager-Casimir, independientemente de los detalles sobre los contactos a los reservorios, implicando un comportamiento simétrico ante inversiones del campo magnético (ver Ec. (4.6)). Entonces, a partir del análisis presentado en la sección anterior, concluimos que la corriente continua total presenta simetrías ante inversión del campo magnético solo en el caso en que los reservorios son conectados en forma simétrica.

En la Fig. 6.6, mostramos el comportamiento de la corriente continua total  $J^{\text{dc}} = G_{\text{dc}}^V V + J^{\text{pump}}$ , como función del flujo magnético dc para un anillo conectado a los reservorios simétricamente, y bajo el efecto combinado de una diferencia pequeña de voltaje  $V$  y un flujo magnético oscilante de baja amplitud  $\Phi^{\text{ac}}$  y frecuencias  $\omega_0$  fuera del régimen adiabático. La corriente de bombeo es cuadrática en la frecuencia de oscilación del campo  $J^{\text{pump}} \sim G_{\text{dc}}^{\text{na}} \Omega_0^2$ , ya que como se discutió en la Sec.6.2, el coeficiente adiabático es nulo.

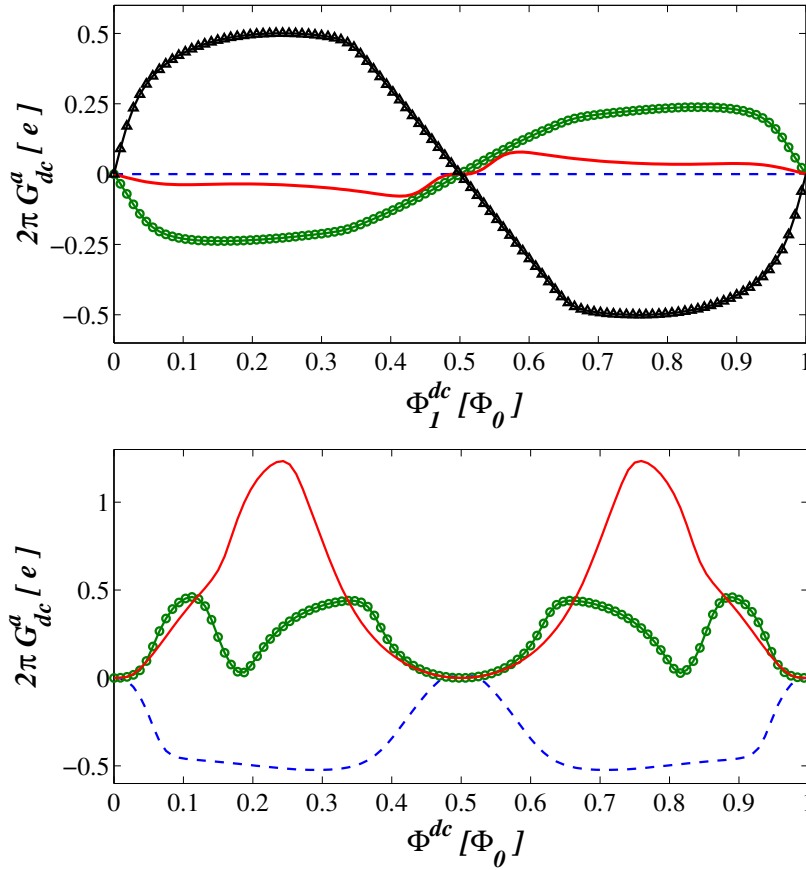


Figura 6.4: Carga media transmitida en un dado período,  $Q_{dc} = 2\pi G_{dc}^a$ , para dos anillos conectados con los reservorios en forma simétrica, como función de las componentes dc de los flujos magnéticos (expresado en unidades de  $\Phi_0$ ). En ambos paneles, las fases de los flujos ac son  $\delta_1 = 0$  y  $\delta_2 = \pi/2$ . Primer panel: el flujo dc del anillo derecho se deja fijo y se varía el del anillo de la izquierda  $\Phi_1^{dc}$ . Los flujos ac son  $\Phi_1^{ac} = \Phi_2^{ac} = 0,32$ . Línea punteada, círculos, línea sólida y triángulos corresponden respectivamente a  $\Phi_2^{dc} = 0, 0,1, 0,47, 0,85$ . Segundo panel: Los dos flujos dc son variados simultáneamente  $\Phi_1^{dc} = \Phi_2^{dc} = \Phi^{dc}$ . Línea sólida, círculos, y línea punteada corresponden a  $\Phi_1^{ac} = \Phi_2^{ac} = 0,6, 0,47, 0,32$ . Otros detalles son los mismos que en la Fig.6.2.

En el primer panel mostramos la conductancia lineal dc  $G_{dc}^V$ , la cual es una función par del flujo dc  $\Phi^{dc}$ ; y luego en el panel del medio se encuentra la corriente continua total dividida por el voltaje  $J^{dc}/V$ . En este último caso, se dividió la corriente por  $V$  con el fin de mostrar una cantidad que tenga las mismas unidades que la conductancia lineal usual  $G_{dc}^V$  del panel de arriba. Para conexiones simétricas y cuando  $V = 0$ , la corriente de bombeo  $J^{pump}$  es una función par de  $\Phi^{dc}$  para todas las frecuencias consideradas (ver el último panel de la Fig. 6.6). Por consiguiente, la corriente total  $J^{dc}$  es también una función par de  $\Phi^{dc}$ .

El comportamiento correspondiente al caso de conexiones con los reservorios asimétricas se muestra en la Fig. 6.7. En este caso, a pesar de que la conductancia lineal presentada en el primer panel es una función par de  $\Phi^{dc}$ , la corriente bombeada que se encuentra en el último panel no tiene una simetría bien definida. Por lo tanto, la corriente dc total que

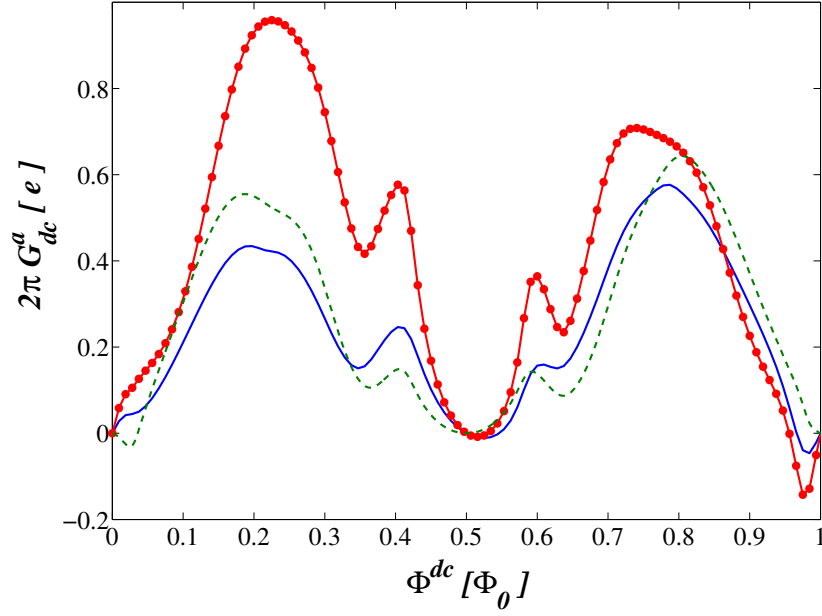


Figura 6.5:  $Q_{dc} = 2\pi G_{dc}^a$  para dos anillos conectados a los reservorios de manera asimétrica, como función de la componente dc de los flujos magnéticos. Los dos flujos dc son simultáneamente variados  $\Phi_1^{dc} = \Phi_2^{dc} = \Phi^{dc}$ . Las componentes ac de los flujos son  $\Phi_1^{ac} = 0,32$  y  $\Phi_2^{ac} = 0,6$ , y las fases son  $\delta_1 = 0$  y  $\delta_2 = \pi/2$ . Los flujos están en unidades de  $\Phi_0$ . Los círculos corresponden a los reservorios conectados en  $l_L = 10$  y  $l_R = 2$ , la línea punteada corresponde a  $l_L = 5$  y  $l_R = 9$ , mientras la línea sólida corresponde a  $l_L = 1$  y  $l_R = 2$ . Los otros parámetros son los mismos que en la Fig.6.2.

se muestra en el panel del medio de la Fig. 6.7 no tiene tampoco una simetría definida como función de  $\Phi^{dc}$ .

Es interesante notar que  $J^{dc}/V$  en los paneles del medio de las Figs. 6.6 y 6.7 puede ser significativamente mayor que el cuanto de conductancia  $e^2/h$  esperado para sistemas de un solo canal, como en este caso (ver en los paneles superiores que la conductancia máxima corresponde a  $\sim 0,8e^2/h$ ). Este comportamiento ha sido también discutido en el contexto de sistemas con potenciales puramente alternos en Refs. [4, 5]. En este caso, es una consecuencia de que la corriente dc es inducida tanto por la diferencia de voltaje como por la componente ac del flujo magnético. De este modo, ambos efectos se combinan aumentando significativamente esta cantidad.

### 6.4.2. Dos anillos

En el caso de dos anillos bajo el efecto combinado de un voltaje dc  $V$  aplicado entre terminales y la presencia un flujo magnético ac, la corriente continua total para pequeños  $V$  y  $\omega_0$  puede ser expresada como  $J^{dc} = G_{dc}^V V + \omega_0 G_{dc}^a + \omega_0 V G_{dc}^{mix}$ . En término de la función de Green congelada, el coeficiente de transporte mezcla puede ser escrito como

$$G_{dc}^{mix} = - \sum_{\substack{\beta=L,R \\ \beta \neq \alpha}} \Gamma_{\beta}(\mu) \Gamma_{\alpha}(\mu) \int_0^{\tau} \frac{dt}{2\pi} \partial_{\omega} \text{Im} \left( G_{l_{\alpha}, l_{\beta}}^f(t, \omega) \partial_t G_{l_{\alpha}, l_{\beta}}^{f*}(t, \omega) \right) \Big|_{\omega=\mu}. \quad (6.35)$$

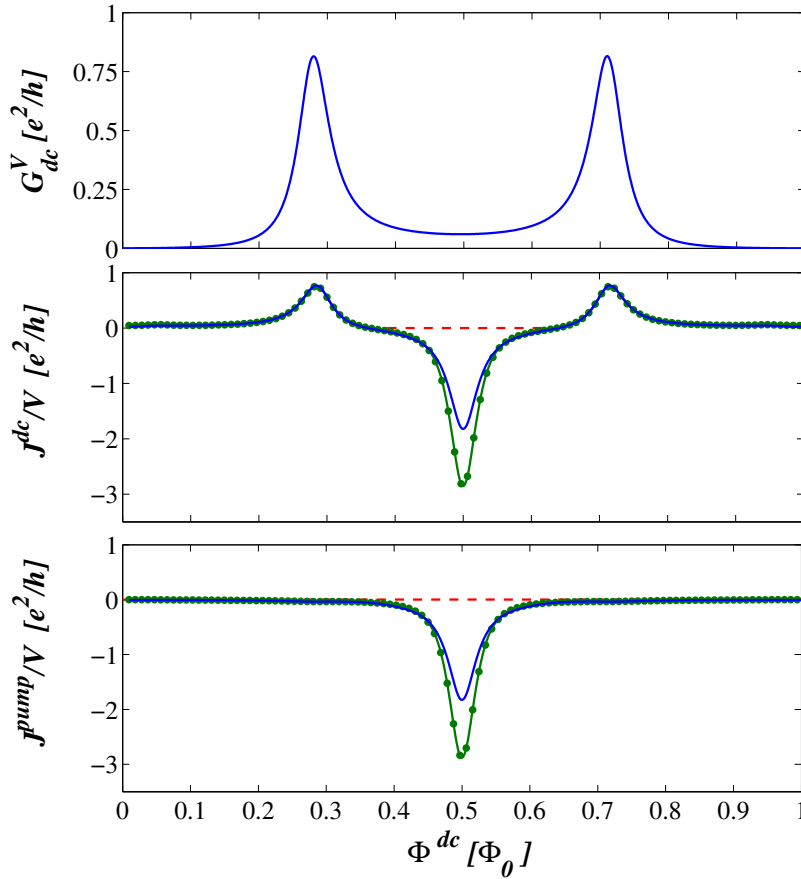


Figura 6.6: Panel superior  $G_{\text{dc}}^V$  en unidades de  $e^2/h$  como función de la componente dc del flujo magnético  $\Phi^{\text{dc}}$ , para un solo anillo con  $N = 20$  sitios. Los potenciales químicos son  $\mu_R = \mu + eV$  y  $\mu_L = \mu$ , con  $\mu = 0,18$  y  $eV/\Delta = 0,005$ . Los reservorios son acoplados al anillo en forma simétrica, y los parámetros de contacto son los mismos que en la Fig. 6.3. En el panel del medio e inferior, la línea punteada, círculos y línea sólida corresponden respectivamente a  $\hbar\omega_0/\Delta = 0,4, 0,7, 1$ . Último panel: corriente bombeada dc dividida por el voltaje  $V$  para  $\mu_L = \mu_R = \mu$ . La corriente dc que resulta de los efectos combinados del flujo ac y de voltaje dc se muestra en el panel del medio. Otros detalles son los mismos que en la Fig. 6.3.

En el límite de pequeñas amplitudes de  $\phi_j^{\text{ac}}$ , un tratamiento y análisis similar al realizado en la Sec.6.2 nos lleva a concluir que este coeficiente de transporte tiene las mismas propiedades de simetría como función de  $\Phi_j^{\text{dc}}$  que  $G_{\text{dc}}^a$ . Es decir que para una configuración simétrica de anillos y reservorios, este coeficiente es impar ante la inversión de uno de los flujos y par ante la inversión simultánea de los dos flujos dc. Por otro lado,  $G_{\text{dc}}^V$  es en este caso una función simétrica ante la inversión de cualquiera de los dos flujos dc  $\Phi_j^{\text{dc}}$ , y también ante la inversión simultánea de los dos. Entonces, en presencia de una diferencia de voltaje y en una configuración simétrica, esperamos que la corriente total dc no tenga una simetría particular cuando un solo flujo es invertido, mientras que cuando los flujos dc son simultáneamente variados se comporte como una función par.

Esto es ilustrado en la Fig. 6.8, donde consideramos flujos alternos con las mismas amplitudes para los dos anillos. Dejamos fijo el valor de la componente dc del flujo que



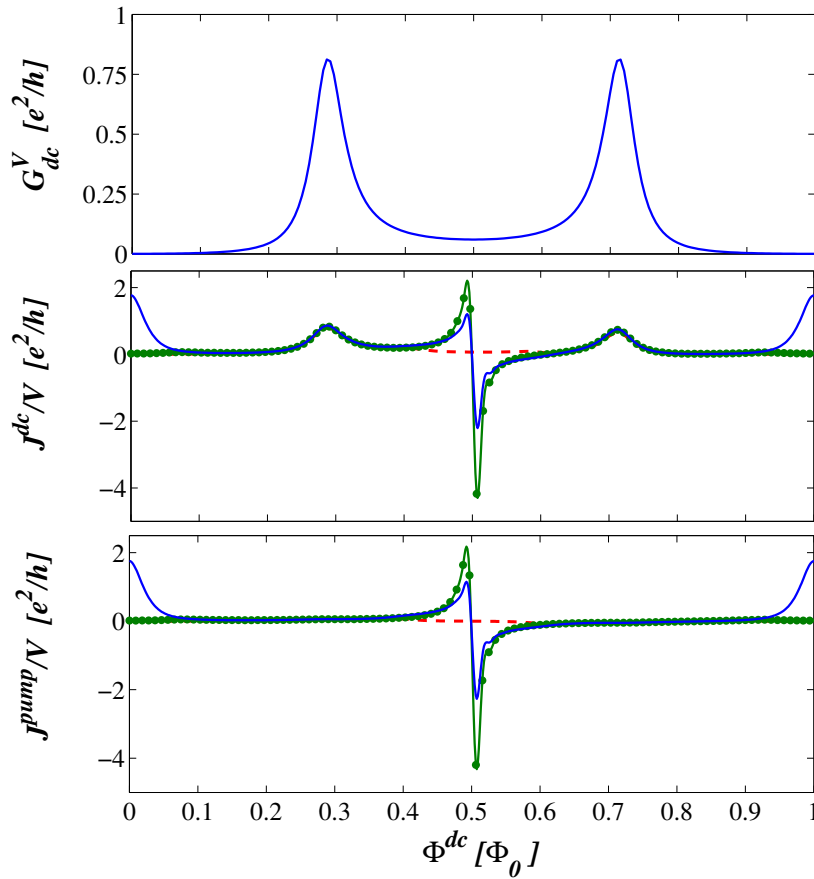


Figura 6.7: Lo mismo que en la Fig. 6.6 para reservorios conectados en forma asimétrica en  $l_L = 1$  y  $l_R = 10$ .

atraviesa el anillo derecho y analizamos el comportamiento de la corriente continua cuando el flujo dc del anillo izquierdo es variado. En el panel superior de la figura mostramos la corriente continua inducida por una diferencia de voltaje, dividida por dicha diferencia  $V$ ,  $G_{dc}^V + G_{dc}^{mix} \omega_0$ . En el panel del medio mostramos la contribución del coeficiente de mezcla  $G_{dc}^{mix} \omega_0$ , y en el último panel se encuentra la corriente total dividida por el voltaje  $J^{dc}/V$ . El coeficiente adiabático correspondiente ha sido mostrado en la Fig. 6.4. En acuerdo con el análisis para amplitudes ac pequeñas, no se observa una simetría particular de la corriente total como función de  $\Phi_1^{dc}$ . En la Fig. 6.9 mostramos resultados para el mismo dispositivo considerado en la Fig. 6.8, pero en este caso variamos los dos flujos magnéticos ac simultáneamente,  $\Phi_1^{dc} = \Phi_2^{dc} = \Phi^{dc}$ . Podemos ver que en este caso, todos los coeficientes de transporte son funciones pares de  $\Phi^{dc}$  ( $G_{dc}^a$  se muestra en Fig. 6.4), siendo entonces la corriente total dc una función simétrica ante la inversión de la componente continua del flujo magnético. El comportamiento de la corriente total se muestra en el último panel de la Fig. 6.9, donde se puede ver que, de acuerdo a las relaciones de Onsager-Casimir (4.6), tiene las mismas simetrías que la conductancia lineal estacionaria.

En el caso de dos anillos conectados asimétricamente,  $G_{dc}^V$  es una función par de  $\Phi_j^{dc}$ ,  $j = 1, 2$ , pero la componente adiabática no tiene una simetría definida (ver Fig. 6.5) y hemos verificado que esto también le ocurre al coeficiente que describe la mezcla de los efectos. Entonces, la corriente continua total no tiene una simetría particular como función

de la componente dc del flujo magnético.

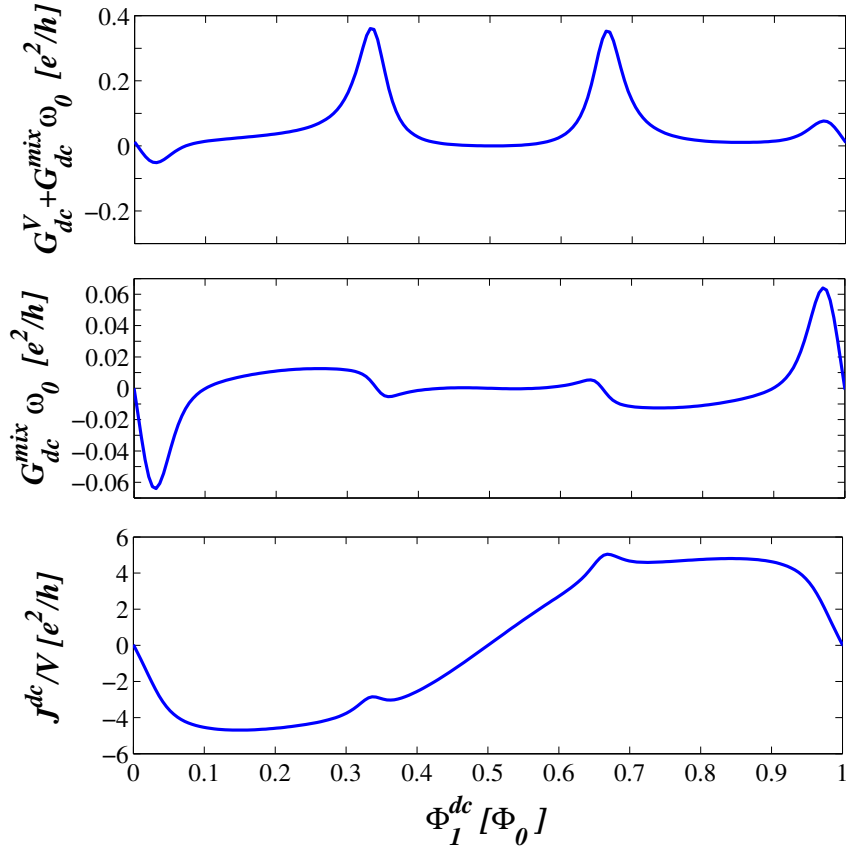


Figura 6.8: Panel superior: Corriente dc inducida por una diferencia de voltaje entre terminales, dividida por  $V$ ,  $G_{dc}^V + G_{dc}^{mix} \omega_0$ . Consideramos un sistema formado por dos anillos conectados simétricamente. Se varía la componente dc del flujo magnético del anillo izquierdo  $\Phi_1^{dc}$  y se deja fijo el flujo que atraviesa el anillo derecho  $\Phi_2^{dc} = 0,1$ . Panel del medio: El coeficiente de transporte  $G_{dc}^{mix}$  multiplicado por la frecuencia  $\omega_0$ . Último panel: corriente continua total que resulta de combinar un flujo magnético alterno con una diferencia de voltaje dc  $V$ , cuando  $\hbar\omega_0/\Delta = 0,05$ . En este caso, ya que consideramos anillos idénticos,  $\Delta$  corresponde al espaciado típico entre niveles de uno de los anillos. La diferencia de voltaje dc es  $eV/\Delta = 0,0025$ , y las componentes ac de los flujos son  $\Phi_1^{ac} = \Phi_2^{ac} = 0,32$ . Las fases de los flujos ac son  $\delta_1 = 0$  y  $\delta_2 = \pi/2$ . Los otros parámetros son los mismos que en la Fig. 6.2.

## 6.5. Conclusiones

En este capítulo estudiamos las propiedades de transporte de carga de uno y dos anillos atravesados por flujos magnéticos con componentes dc y ac, con y sin diferencia de voltaje dc aplicada entre las terminales. Hemos desarrollado diferentes estrategias teóricas para resolver el problema en diferentes límites, y a su vez definimos los coeficientes relevantes para caracterizar el transporte en el límite de pequeñas diferencias de voltajes y bajas frecuencias de las componentes alternas de los flujos magnéticos.

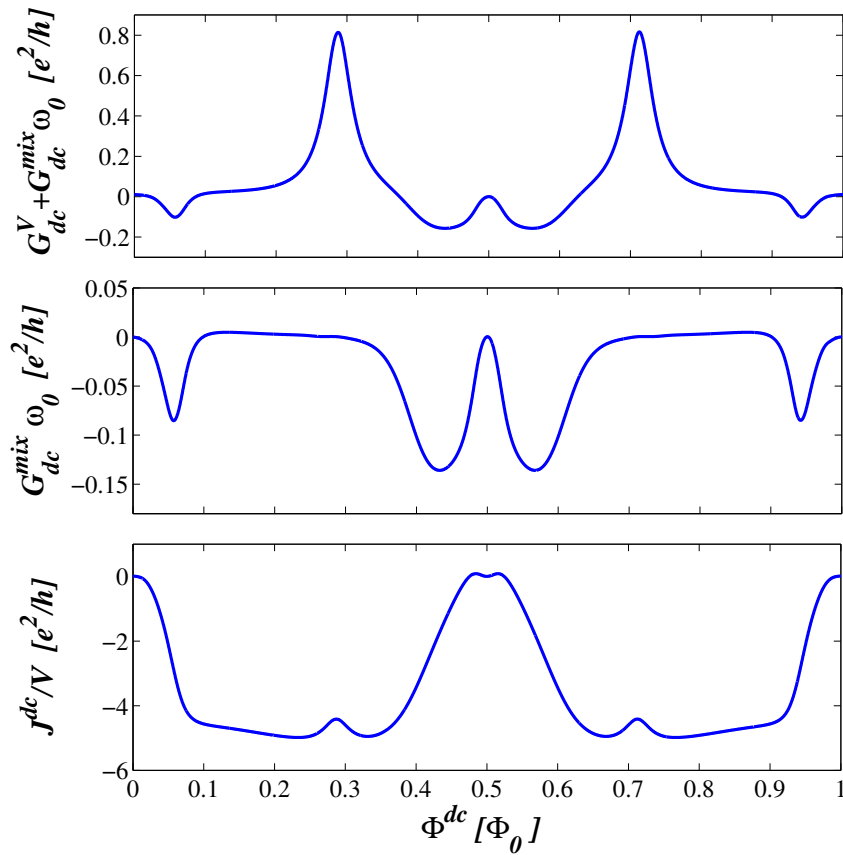


Figura 6.9: Lo mismo que en la Fig. 6.8 para el caso en que las componentes dc de los flujos magnéticos son variadas simultáneamente  $\Phi_1^{\text{dc}} = \Phi_2^{\text{dc}} = \Phi^{\text{dc}}$ .

También mostramos que no es posible generar bombeo adiabático en un solo anillo mediante la aplicación de flujos magnéticos puramente alternos, incluso para flujos magnéticos que tengan oscilando muchos armónicos con distintas fases. Este resultado contrasta con el comportamiento de un anillo atravesado por un flujo magnético que depende linealmente del tiempo. En ese caso, se puede generar una corriente en el régimen adiabático incluso cuando el flujo magnético tiene un solo parámetro relevante [6]. En el caso de dos anillos hemos mostrado que es posible generar bombeo adiabático cuando los dos flujos magnéticos tienen una componente dc y oscilan con una diferencia de fase, lo cual está de acuerdo con resultados de trabajos previos [2].

Finalmente, analizamos el comportamiento de las corrientes dc en sistemas con uno y dos anillos como función de las componentes dc de los flujos magnéticos, con y sin diferencia de voltaje aplicada entre terminales. Para el caso de un solo anillo encontramos que la corriente de bombeo no adiabática no tiene en general una simetría particular como función del flujo dc, indicando que no mantiene, de acuerdo con las relaciones de Onsager-Casimir, las mismas simetrías que la conductancia lineal. Un acoplamiento arbitrariamente pequeño con los reservorios es suficiente para romper las simetrías de Onsager, a excepción de la situación de conexiones perfectamente simétricas ante inversión espacial. Encontramos un comportamiento similar en el caso de dos anillos y bombeo de carga en el régimen adiabático. Para el caso particular de conexiones con los reservorios perfectamente simétricas, la corriente bombeada es una función par del flujo magnético

dc cuando es el mismo para los dos anillos, mientras que es una función antisimétrica si solamente se varía el que atraviesa un anillo y se deja al otro fijo.

El hecho de que no se espera que las simetrías de Onsager-Casimir para respuesta lineal en  $V$  sigan siendo válidas en general en el régimen adiabático y no adiabático, puede estar relacionado con que el bombeo en estos sistemas es como mínimo un proceso de segundo orden en las amplitudes de los flujos ac, como se muestra explícitamente en la Ec.(6.34) para un anillo y en Ec.(6.30) para dos. Sin embargo, en el régimen adiabático la corriente dc es lineal en la frecuencia de bombeo a pesar de ser no lineal en el campo. En este sentido, la situación se asemeja al caso donde solamente se aplica una diferencia de potencial dc y se rompen las simetrías de Onsager más allá de la respuesta lineal en  $V$ . Sin embargo en ese caso, la explicación del motivo por el cual se produce esta ruptura recurre al efecto de las interacciones, [7–11] mientras que en nuestro caso es un efecto puramente dinámico que tiene lugar incluso en sistemas no interactuantes.

Cuando a su vez se aplica una diferencia de voltaje dc, la corriente continua que resulta de la combinación de los efectos de la parte ac del flujo y del voltaje dc es una función par en el flujo magnético dc solamente en el caso de conexiones simétricas. Para otras configuraciones más generales, no presenta una simetría en particular. La falta de simetría de la corriente dc como función de flujos magnéticos ya ha sido discutida en sistemas bombeados por voltajes de gate [12–15]. En nuestro caso hemos mostrado que algunos de estos comportamientos también tienen lugar con campos magnéticos oscilantes.

Con respecto a la posibilidad de observar experimentalmente los diferentes regímenes y mecanismos descritos en este capítulo, notamos que las técnicas de nanolitografía sobre heteroestructuras de GaAs/AlGaAs, permiten la fabricación de arreglos de anillos mesoscópicos (ver por ejemplo Refs. [16–20]). En particular en Ref. [16], el anillo mesoscópico atravesado por un flujo magnético que se estudia, está integrado en un pequeño sustrato de algunos cientos de  $\mu\text{m}$  con un dispositivo SQUID utilizado para detectar corrientes persistentes en el anillo.

Entonces, encontramos que la situación experimental actual permite el estudio de los sistemas presentados en este capítulo. En los experimentos, los anillos tienen diámetros típicos desde algunos cientos de nm hasta unos pocos  $\mu\text{m}$ , y tienen un espaciado medio entre niveles  $\Delta \sim 0,5\text{meV}$  [18]. En arreglos de anillos el espaciado típico entre niveles se estima que es menor  $\Delta \sim 0,001\text{meV}$  [19]. Esto correspondería a frecuencias resonantes del orden de  $\Delta/h \sim 1 - 500\text{GHz}$ . Por otro lado, el rango de frecuencias dentro del régimen adiabático está determinado por el ancho típico de los picos resonantes del anillo. Esto, a su vez, depende del grado de acoplamiento a los reservorios y también de la longitud del anillo, pero es significativamente menor que la separación típica entre niveles. Si asumimos que este ancho es como mucho  $10^{-3}\Delta$ , podemos concluir que el régimen adiabático va a corresponder a frecuencias por debajo de algunos cientos de  $\text{MHz}$ . En ausencia de voltaje dc, estas frecuencias inducen corrientes continuas que van desde los  $0,1\text{nA}$  hasta unos pocos nA. Estas corrientes son pequeñas, pero dentro del rango observado en experimentos con anillos Aharonov-Bohm (ver [17–21]).

Para finalizar, mencionamos otras características interesantes de las propiedades de transporte en estos sistemas. En particular, nos gustaría enfatizar como cambia la corriente de bombeo en un anillo a medida que aumenta la frecuencia. Pasa de un comportamiento “paramagnético”, caracterizado por una corriente continua nula en ausencia de flujos magnéticos dc, a uno “diamagnético”, caracterizado por una corriente finita para un flujo dc nulo. Esta característica es similar a la observada experimentalmente en el

comportamiento de las corrientes persistentes en anillos atravesados por flujos alternos [17].

## Bibliografía

- [1] P. W. Brouwer, Phys. Rev. B **58**, R10135 (1998).
- [2] D. Shin and J. Hong, Phys. Rev. B **70**, 073301 (2004).
- [3] L. Arrachea, Phys. Rev. B **72** 121306 (2005).
- [4] F. Foieri, L. Arrachea and M. J. Sánchez, Phys. Rev. Lett. **99**, 266601 (2007).
- [5] J. Sau, T. Kitagawa, and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **85**, 155425 (2012).
- [6] L. Arrachea, Phys. Rev. B **66**, 045315 (2002); *ibid* **70** 155407 (2004);
- [7] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [8] D. Sánchez and M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **93**, 106802 (2004).
- [9] M. L. Polianski and M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **96**, 156804 (2006).
- [10] D. Sánchez and K. Kang, Phys. Rev. Lett **100**, 036806 (2008).
- [11] A. R. Hernández and C. H. Lewenkopf, Phys. Rev. Lett. **103**, 166801 (2009).
- [12] T. A. Shutenko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **61**, 10 366 (2000).
- [13] I. L. Aleiner, B. L. Altshuler, and A. Kamenev, Phys. Rev. B **62**, 10 373 (2000).
- [14] M. Vavilov, V. Ambegaokar, and I. L. Aleiner, Physical Review B **63**, (2001).
- [15] M. Moskalets, M. Büttiker, Phys. Rev. B **72**, 035324 (2005).
- [16] D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, Phys. Rev. Lett. **70**, 2020 (1992).
- [17] R. Deblock, R. Bel, B. Reulet, H. Bouchiat, and D. Mailly, Phys. Rev. Lett. **89**, 206803 (2002).
- [18] M. Cassé, Z. D. Kvon, G. M. Gusev, E. B. Olshanetskii, L. V. Litvin, A. V. Plotnikov, D. K. Maude and J. C. Portal, Phys. Rev. B **62**, 2624 (2000).
- [19] R. Deblock, Y. Noat, B. Reulet, H. Bouchiat, D. Mailly, Phys. Rev. B **65**, 075301 (2002).
- [20] W. Rabaud, L. Saminadayar, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Etienne, Phys. Rev. Lett. **86**, 3124 (2001).
- [21] A. A. Bykov, Z. D. Kvon, L. V. Litvin, Yu. V. Nastaushev, V. G. Mansurov, V. P. Migal', and S. P. Moshchenko, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **58**, 7, 538-541 (1993).



# Capítulo 7

## Transferencia dinámica de energía en sistemas con potenciales ac

*M. F. Ludovico, J. S. Lim, M. Moskalets, L. Arrachea, and D. Sánchez, (2014). Dynamical energy transfer in ac-driven quantum systems. Physical Review B Rapid Communication, 89(16), 161306.*

*M. F. Ludovico, J. S. Lim, M. Moskalets, L. Arrachea, and D. Sánchez, (2014, December). Time resolved heat exchange in driven quantum systems. In Journal of Physics: Conference Series (Vol. 568, No. 5, p. 052017). IOP Publishing*

En este capítulo nos enfocamos en el estudio de la producción de energía como función del tiempo y su redistribución en sistemas cuánticos coherentes de electrones. Mostramos que el acoplamiento entre las diferentes partes del sistema no solo provee un mecanismo necesario para el intercambio de partículas, sino que también contribuye al transporte de energía. Si bien el promedio temporal de esta energía es nulo, su almacenamiento temporal no lo es, teniendo así la región del contacto solo un aporte dinámico a la energía. Por último, discutimos qué porción del flujo de energía dependiente del tiempo puede ser identificado como calor, de acuerdo con las leyes fundamentales de la termodinámica.

El capítulo está organizado de la siguiente manera. En la Sec.7.1 presentamos el modelo teórico e identificamos las contribuciones a la energía total correspondientes a las distintas partes del sistema, en la Sec. 7.2 calculamos los flujos de energía, es decir energía por unidad de tiempo. La siguiente sección está destinada a discutir el significado físico del flujo de energía en el contacto, y por último en las Secs. 7.4 y 7.5 se identifica la porción de la energía que corresponde al calor de acuerdo a las leyes fundamentales de la termodinámica.

### 7.1. Modelo

Para ser más precisos, consideramos un sistema general y simple que consiste en un modelo con un nivel resonante como el de la Fig.7.1. El mismo describe a un fermión localizado (la impureza) acoplado a una banda fermiónica de densidad de estados constante (el reservorio). Este modelo ha sido muy usado en distintas disciplinas para estudiar simetrías en el espectro atómico [1], efectos disipativos en mecánica cuántica [2] y heteroestructuras semiconductoras [3] entre otras. Además, es un modelo simple que contiene los ingredientes necesarios para entender el intercambio dinámico de energía en capacitores cuánticos que se comportan como emisores de partículas individuales.

Consideramos el caso en el que el nivel está acoplado a una fuente armónica, como en

la Fig.7.1. Entonces, el Hamiltoniano del sistema total es

$$H = H_C + H_T + H_D(t), \quad (7.1)$$

donde  $H_C = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k$  corresponde a un continuo (C) de estados de electrones con vector de onda  $k$  y banda de energías  $\varepsilon_k$ . El operador  $H_T = \sum_k (w_k d^\dagger c_k + \text{h.c.})$ , con una amplitud de acoplamiento  $w_k$ , describe la hibridización entre los electrones que se propagan y el fermión localizado. Por último  $H_D(t) = \varepsilon_d(t) d^\dagger d$  representa a la impureza con un nivel de energía dependiente del tiempo  $\varepsilon_d(t) = \varepsilon_0 + V_{ac} \cos(\omega_0 t)$ . La energía del nivel desnudo es  $\varepsilon_0$ . Este modelo puede ser implementado utilizando una terminal electrónica acoplada a un punto cuántico que actúa como una impureza artificial [4, 5], y que interactúa capacitivamente con un potencial de gate armónico  $V_{ac} \cos(\omega_0 t)$ .

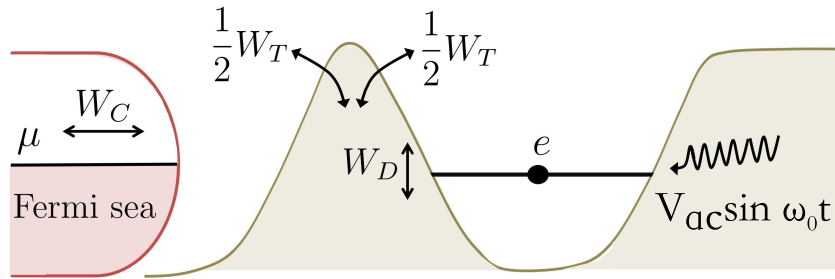


Figura 7.1: Diagrama de energía del sistema bajo consideración. Un único nivel electrónico (la impureza de carga  $e$ ) acoplado a un mar de Fermi (el reservorio) con potencial químico  $\mu$ . La energía es suministrada al sistema por una fuente alterna (de amplitud  $V_{ac}$  y frecuencia  $\omega_0$ ) acoplada al nivel cuántico. Entonces, las tasas de energía son creadas en la impureza ( $W_D$ ) y también en el reservorio ( $W_C$ ) y en la región del contacto ( $W_T$ ).

Nuestro modelo es también relevante para el caso de gases de fermiones de átomos fríos [6] en redes ópticas [7]. Por definición, tomamos un único reservorio de electrones sin espín, pero el modelo puede ser generalizado para tener en cuenta múltiples contactos y electrones con grado de libertad de espín.

## 7.2. Flujos de energía dependientes del tiempo

Analizando la evolución en el tiempo de la energía total, vemos que el Hamiltoniano de la Ec.(7.1) conserva el número de partículas, pero no la energía total. Podemos escribir,

$$\frac{d\langle H \rangle}{dt} = W_C(t) + W_T(t) + W_D(t) + P(t), \quad (7.2)$$

donde los flujos de energía (energía por unidad de tiempo) son  $W_C(t) = i\langle [H, H_C] \rangle / \hbar$ ,  $W_T(t) = i\langle [H, H_T] \rangle / \hbar$  y  $W_D(t) = i\langle [H, H_D] \rangle / \hbar$ , y cumplen  $W_C(t) + W_T(t) + W_D(t) = 0$ . El término  $P(t) = \langle \partial H_D / \partial t \rangle$  es la potencia desarrollada por las fuerzas alternas. Es importante notar que, en comparación con el transporte de carga, el transporte de energía contiene un término adicional debido al contacto. La conservación de la carga se escribe  $J_C(t) + J_D(t) = 0$ , donde las corrientes electrónicas (carga por unidad de tiempo) son respectivamente, en el reservorio y el nivel cuántico  $J_C(t) = ie\langle [H, \sum_k c_k^\dagger c_k] \rangle / \hbar$  y  $J_D(t) = ie\langle [H, d^\dagger d] \rangle / \hbar$ .



Como se puede ver en la ecuación para la conservación de la carga, no hay un flujo de partículas asociado al Hamiltoniano de acoplamiento  $H_T$  a pesar de que las corriente deben ser por supuesto calculadas en la presencia del contacto. En contraste, el flujo de energía en el continuo (reservorio)  $W_C(t)$ , no puede ser solamente inferido a partir del de la impureza  $W_D(t)$ . Es necesario el conocimiento de cómo la energía es absorbida o emitida en la región del contacto,  $W_T(t)$ . Este hecho crucial introduce algún tipo de ambigüedad en la definición de la corriente de calor, como se va a mostrar más adelante.

Los diferentes flujos de energía involucrados en la Ec.(7.2) pueden ser computados en términos de las funciones de Green retardada  $G^R(t, t') = -i\theta(t - t')\langle\{d(t), d^\dagger(t')\}\rangle$  y menor  $G^<(t, t') = i\langle d^\dagger(t')d(t)\rangle$ . Siguiendo el procedimiento del Capítulo 5 Sec. 5.2 para las corrientes de energía en sistemas con potenciales periódicos, encontramos que el flujo de energía que entra en el reservorio a tiempo  $t$  es

$$W_C = -2\text{Re} \int \frac{d\varepsilon}{h} \Gamma(\varepsilon) [iG^R(t, \varepsilon)f(\varepsilon)\varepsilon + G^<(t, \varepsilon)\Theta(\varepsilon)] , \quad (7.3)$$

donde  $G(t, t') = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon(t-t')} G(t, \varepsilon)$  y  $\Theta(\varepsilon) = \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\varepsilon'}{\varepsilon - \varepsilon' - i0^+}$ . En la Ec.(7.3),  $f(x) = 1/[1 + e^{(x-\mu)/k_B T}]$  es la distribución de Fermi-Dirac a temperatura  $T$  y potencial químico  $\mu$ , y  $\Gamma(\varepsilon) = 2\pi \sum_k |w_k|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$  es el ancho de la resonancia debido al acoplamiento con el reservorio. Para el continuo consideramos un modelo con una densidad de estados plana, que corresponde a  $\Gamma$  constante. Queremos enfatizar que la Ec.(7.3) es completamente general y válida a todo orden en  $\omega_0$  y  $V_{ac}$ .

Siguiendo el mismo procedimiento, encontramos que el flujo de energía para la impureza es

$$W_D(t) = -\varepsilon_d(t)J_C(t)/e, \quad (7.4)$$

donde

$$J_C(t) = -2e\text{Re} \int d\varepsilon/h\Gamma(\varepsilon)[iG^R(t, \varepsilon)f(\varepsilon) + G^<(t, \varepsilon)\theta(\varepsilon)], \quad (7.5)$$

es la corriente de carga en el reservorio calculada en el Capítulo 5 Sec. 5.1, con  $\theta(\varepsilon) = \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon' - i0^+}$ . La Ec.(7.4) tiene una simple interpretación. Siendo  $n_d(t)$  el valor de expectación del número de partículas en el sitio localizado, la tasa de cambio de energía total es  $d[\varepsilon_d(t)n_d(t)]/dt$ . Este cambio consiste en dos términos, uno es la potencia de la fuente ac  $P(t) = n_d(t)d\varepsilon_d/dt$  y el otro es el flujo de energía  $W_D = \varepsilon_d(t)dn_d/dt = -\varepsilon_d(t)J_C(t)/e$ , ya que  $J_D(t) \equiv edn_d/dt = -J_C(t)$ .

Finalmente, determinamos el flujo de energía asociado a la región que mezcla al continuo con los estados localizados  $W_T = -W_C - W_D$  (ver Capítulo 5 Sec. 5.3 para los detalles del cálculo),

$$W_T(t) = 2\text{Re} \int \frac{d\varepsilon}{h} \partial_t G^R(t, \varepsilon)\Gamma f(\varepsilon), \quad (7.6)$$

con  $G^R(t, \varepsilon) = \sum_n e^{-in\omega_0 t} \mathcal{G}(n, \varepsilon)$ . Es fácil verificar que la Ec.(7.6) es una contribución puramente ac, que se anula en el límite  $\omega_0 \rightarrow 0$ . Entonces, para campos magnéticos estáticos aplicados o en promedio temporal, esta contribución al flujo de energía del sistema es nula. La cantidad  $W_T$  va a ser finita solamente para sistemas que exhiban una respuesta dinámica. En un sistema con un punto cuántico, y una barrera túnel que lo acople al reservorio, va a almacenar y emitir energía periódicamente en respuesta de un campo ac que mueva sus niveles de energía .

### 7.3. Comparación con el formalismo de la matriz de scattering

Para ganar una mejor comprensión del significado físico de  $W_T$ , recurrimos al formalismo de la matriz de scattering aplicado al transporte cuántico presentado en el Capítulo 2, Sec. 2.2, Subsec.2.2.5. En Ref.[8] se probó la equivalencia entre funciones de Green y el enfoque con matrices de scattering para cantidades promediadas temporalmente. Pero precisamente como  $W_T$  se anula en el límite estacionario, analizamos el flujo de energía dependiente del tiempo considerando el operador densidad de energía  $\rho_E = \Psi^* H \Psi$ , donde  $H = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m + U(t, \vec{r})$ . Esta es la versión en primera cuantificación de la Ec.(7.1) y  $U$  es el potencial electrónico total que incluye los potenciales externos dependientes del tiempo aplicados sobre el sistema. Entonces,  $\rho_E$  satisface la ecuación de continuidad [9]

$$\partial_t \rho_E + \nabla \cdot W_E = S_E, \quad (7.7)$$

donde  $W_E = (\hbar/4mi)[\Psi^* H \nabla \Psi - \nabla \Psi^* H \Psi + \text{h.c.}]$  es el flujo de energía simetrizado y  $S_E = \Psi^* \partial_t U \Psi$  es el término de las fuentes que tiene en cuenta la dependencia explícita en el tiempo de  $U$ . Como se hace usualmente (ver por ejemplo, Ref.[10]), introducimos el operador de campo  $\hat{\Psi} \sim \int d\varepsilon e^{-i\varepsilon t/\hbar} [e^{+ikx} \hat{a}(\varepsilon) + e^{-ikx} \hat{b}(\varepsilon)]$  con  $x$  siendo la posición a través de la cual se mide el flujo. Luego, el flujo de energía queda expresado como

$$W_E(t) = \sum_{n,q} e^{-in\omega_0 t} \int d\varepsilon \frac{\varepsilon_q + \varepsilon_{n+q}}{2\hbar} S^{F*}(\varepsilon_q, \varepsilon) S^F(\varepsilon_{n+q}, \varepsilon) \times [f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon)], \quad (7.8)$$

donde la matriz de scattering en la representación de Floquet  $S^F$ , relaciona los operadores de flujo de salida  $\hat{b}$  con los de entrada  $\hat{a}$  via  $\hat{b}(\varepsilon) = \sum_n S^F(\varepsilon, \varepsilon_n) \hat{a}(\varepsilon_n)$  y  $\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\omega_0$ .

Si ahora insertamos la relación de Fisher-Lee generalizada de la Ec.(2.106)[8, 11]  $S^F(\varepsilon_m, \varepsilon_n) = \delta_{m,n} - i\Gamma \mathcal{G}(m - n, \varepsilon_n)$  en la Ec.(7.8) (para más detalles ver Apéndice A) encontramos

$$W_E(t) = W_C(t) + \frac{1}{2} W_T(t). \quad (7.9)$$

Esta relación establece que, en presencia de campos dependientes del tiempo, el flujo de energía que predice la teoría de scattering y en enfoque con funciones de Green sorprendentemente difieren en el término  $\frac{1}{2} W_T$ . Hay que remarcar que esto ocurre solamente para transporte de energía dinámico. En el caso de corrientes de partículas dependientes del tiempo o flujos de energía promediados temporalmente, la correspondencia entre los dos enfoques teóricos es exacta, es decir  $\overline{W_E} = \overline{W_C}$ , donde usamos la notación  $\overline{(\dots)} = \int_0^\tau (\dots) dt / \tau$ , con  $\tau = 2\pi/\omega_0$ .

Entonces la pregunta que surge ahora es sobre el origen de la discrepancia en la Ec.(7.9). Para eso podemos primero volver a la Fig.7.1 y examinar el rol que cumple la región del contacto. Mientras que con la matriz de scattering se consideran electrones que se propagan con una energía potencial descrita por la función  $U$ , el modelo del nivel resonante separa las diferentes contribuciones a la energía (como en la Ec. (7.1)). Claramente, el Hamiltoniano de mezcla  $H_T$  contiene operadores de creación y destrucción asociados a grados de libertad de los electrones del continuo y del estado localizado. Cuando se separa el sistema completo en un reservorio y una parte localizada con potenciales alternos aplicados, es natural repartir  $H_T$  simétricamente, contribuyendo de igual

manera a estas dos piezas. El punto para resaltar aquí es que la Ec.(7.9) nos muestra que uno debe examinar cuidadosamente, antes de realizar una comparación detallada con la teoría, la manera en que los flujos de calor son medidos en una configuración.

Una pregunta asociada con este análisis es qué parte del flujo de energía puede ser interpretado como calor. En sistemas estacionarios, donde el transporte de calor está acompañado por transporte de partículas, el flujo de calor entre el sistema localizado y el reservorio queda definido a partir de la resta entre el cambio en la energía almacenada en el reservorio y el término convectivo originado por el flujo de partículas [12]. Esta definición fue también adoptada para la componente dc del flujo de calor en sistemas dependientes del tiempo, obteniendo la misma descripción con el enfoque de funciones de Green y el formalismo de la matriz de scattering. Sin embargo, existe una ambigüedad en la definición del calor en el dominio temporal. Específicamente, Ec. (7.8) sugiere que la definición apropiada es

$$\dot{Q}(t) = W_E(t) - \mu J_C(t)/e = W_C(t) + \frac{1}{2}W_T(t) - \mu J_C(t)/e, \quad (7.10)$$

mientras que la Ec.(7.3) podría sugerir que el flujo de calor sea definido como  $\dot{\tilde{Q}} = W_C(t) - \mu J_C(t)/e$ .

Para argumentar que la Ec.(7.10) ofrece la definición del flujo de calor en el dominio temporal más significativa, recurrimos a los principios básicos de la termodinámica. Ya que el reservorio es un sistema macroscópico, una adecuada interpretación de las diferentes partes de su energía interna debería conducir a la definición del calor. Procedemos, siguiendo el libro de texto de la Ref. [13], identificando del Hamiltoniano  $H$  los términos correspondientes al reservorio como aquellos que contienen los operadores operadores  $c_k^\dagger, c_k$ , y los del sistema localizado como los que dependen de  $d^\dagger, d$ . La parte que corresponde a la región del contacto, la barrera túnel de Hamiltoniano  $H_T$ , contiene ambos operadores, entonces es natural considerar la división simétrica  $H_E = H_C + \frac{1}{2}H_T$  para describir al reservorio y  $H_S(t) = H_D(t) + \frac{1}{2}H_T$  para definir al sistema. Luego, evaluamos la tasa de cambio de la energía interna  $\langle \dot{H}_E \rangle = \langle \dot{H}_C \rangle - \frac{1}{2} \sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_d(t)] \dot{n}_k$ , con  $n_k = \langle c_k^\dagger c_k \rangle$ . Esto nos conduce a interpretar la cantidad  $\delta H_T = - \sum_k [\varepsilon_k - \varepsilon_d(t)] \delta n_k$  como el trabajo químico debido al flujo de partículas a través del contacto. Por lo tanto, y en acuerdo con la primera ley de la termodinámica, una definición apropiada del intercambio de calor en el reservorio inducido por pequeñas variaciones del sistema es  $\delta Q = \delta \langle H_C \rangle + \delta \langle H_T \rangle / 2 - \mu \delta N_C$ , con  $N_C = \sum_k n_k$ , como sugiere la Ec.(7.10). A continuación también mostramos que esta expresión está en acuerdo con la segunda ley de la termodinámica, a diferencia de la definición  $\dot{\tilde{Q}}$ .

## 7.4. Flujo de calor para bajas frecuencias $\omega_0$ (régimen adiabático)

Ahora nos enfocamos en el régimen de bajas frecuencias introducido en el Capítulo 5 Sec. 5.4, y por simplicidad a temperatura  $T = 0$ . En este caso, se puede hacer un análisis en potencias de  $\omega_0$  mediante la función de Green retardada congelada  $G^f(t, \varepsilon)$  de la Ec.(5.13), que en este caso es  $G^f(t, \varepsilon) = [\varepsilon - \varepsilon_d(t) + i\Gamma/2]^{-1}$ . Esta función de Green describe el régimen en el que el electrón ajusta instantáneamente su potencial al del campo ac. Considerando entonces la expansión de  $G^R$  hasta orden  $\mathcal{O}(\omega_0)$ , se obtienen los flujos

de calor hasta  $\mathcal{O}(\omega_0^2)$  (ver Apéndice B). Encontramos  $\dot{Q}(t) = \dot{Q}^{(1)}(t) + \dot{Q}^{(2)}(t)$ , donde los términos a primer y segundo orden en  $\omega_0$  son respectivamente,

$$\dot{Q}^{(1)}(t) = \int \frac{d\varepsilon}{h} (\mu - \varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt}, \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}^{(2)}(t) = & -\frac{1}{2} \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left\{ (\mu - \varepsilon) \frac{d}{dt} \left[ [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right] \right. \\ & \left. + \left[ \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Aquí  $\rho^f(t, \varepsilon) = -2\text{Im}[G^f(t, \varepsilon)] = |G^f(t, \varepsilon)|^2 \Gamma = -i\partial_\varepsilon S^f S^{f*}$  es la densidad local de estados y  $S^f(t, \varepsilon)$  la matriz de scattering congelada, es decir, la matriz de scattering estacionaria con parámetros dependientes del tiempo.

Tanto el término de primer orden  $\dot{Q}^{(1)}(t)$  como el primer término de  $\dot{Q}^{(2)}(t)$  son nulos a  $T = 0$ , ya que  $-\partial_\varepsilon f = \delta(\varepsilon - \mu)$ . La componente  $\dot{Q}^{(2)}(t)$ , que es de segundo orden en  $\omega_0$ , representa la potencia disipada en el reservorio. A temperatura cero, la Ec.(7.12) se reduce a  $\dot{Q}^{(2)}(t) = [\rho^f(t, \mu) \frac{d\varepsilon_d}{dt}]^2 / 2$ . Por otro lado, evaluando la corriente hasta primer orden en  $\omega_0$ , encontramos que  $J_C^{(1)}(t) = -(e/h)\rho^f(t, \mu) \frac{d\varepsilon_d}{dt}$ , que implica que

$$\dot{Q}^{(2)}(t) = R_q [J_C^{(1)}(t)]^2, \quad (7.13)$$

con  $R_q = h/2e^2$  el cuanto de resistencia. Esta última ecuación es importante porque muestra que el flujo de calor sigue instantáneamente una ley de Joule con una resistencia universal. Ya que  $R_q$  es una cantidad positiva a todo tiempo, el flujo de calor dado por la Ec.(7.10) representa el calor disipado en el reservorio frío cuando el sistema se encuentra acoplado a fuentes alternas. Entonces, esto quiere decir que la Ec.(7.10) está de acuerdo con la segunda ley de la termodinámica.

Ahora reforzamos nuestra conclusión comparando con la tasa de cambio del calor dada por  $\dot{\dot{Q}}$ . Entonces, evaluamos  $W_T$  hasta segundo orden en  $\omega_0$ :

$$\begin{aligned} W_T^{(1)}(t) &= 2 \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left[ \rho^f(t, \varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_d(t)) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right], \\ W_T^{(2)}(t) &= - \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \frac{d}{dt} \left[ [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 (\varepsilon - \varepsilon_d(t)) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right]. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Dentro de este régimen,  $\dot{\dot{Q}}(t) = \dot{Q}(t) - [W_T^{(1)}(t) + W_T^{(2)}(t)]/2$ , que a  $T = 0$  contiene contribuciones  $\propto \omega_0$  y  $\propto \omega_0^2$ . Definiendo la resistencia  $\tilde{R}(t)$  a partir de la relación  $\dot{\dot{Q}}(t) = [J_C^{(1)}(t)]^2 \tilde{R}(t)$ , encontramos que  $\tilde{R}(t)$  no es universal y depende del tiempo. De hecho, ni siquiera es una cantidad positiva, y entonces  $\dot{\dot{Q}}(t)$  no puede ser interpretado como calor disipado. En la Fig.7.2 mostramos el comportamiento de las dos expresiones del flujo de calor para diferentes amplitudes del potencial ac  $V_{ac}$  para reservorios a  $T = 0$  y frecuencias bajas. El recuadro muestra que, como función del tiempo,  $\dot{Q}(t)$  es siempre positiva mientras que  $\dot{\dot{Q}}(t)$  puede tomar valores negativos. En el panel principal se encuentra  $\dot{Q}(t)$  y  $\dot{\dot{Q}}(t)$  como función de  $J_C(t)^2$ . En el primer caso, observamos una función lineal con una pendiente universal  $R_q$ . En contraste, la segunda definición tiene un comportamiento no universal, incluyendo valores negativos de  $\tilde{R}(t)$ . Las dos definiciones de

calor, sin embargo, conducen al *mismo* resultado cuando son promediadas en el tiempo,  $\overline{\dot{Q}} = \overline{\dot{Q}} = \overline{P}$  y por lo tanto, solo una medición puramente *dinámica* podría distinguirlas.

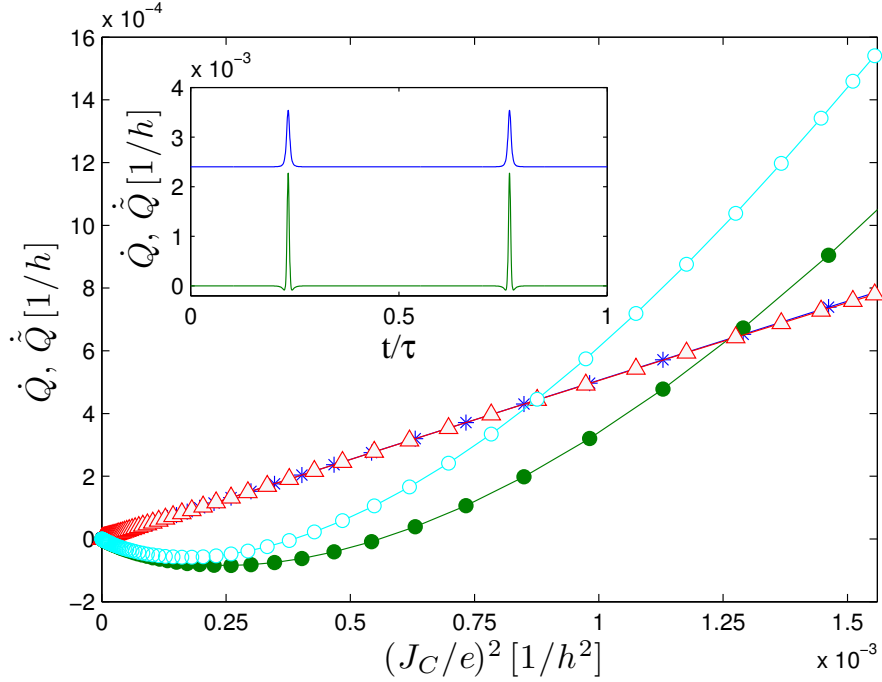


Figura 7.2: (Color online). Flujos de calor  $\dot{Q}(t)$  (estrellas y triángulos) y  $\overline{\dot{Q}}(t)$  (círculos sólidos y abiertos) como función de la corriente  $J_C(t)^2$  en el régimen de bajas frecuencias para dos amplitudes  $V_{ac} = 10, 12$ , respectivamente. Claramente, solo el calor  $\dot{Q}(t)$  satisface  $\dot{Q}(t)/J_C(t)^2 = R$  con  $R$  una constante independiente del tiempo. Parámetros:  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_0 = -1, 2$ ,  $T = 0$  y  $\hbar\omega_0 = 10^{-3}$ . Las energías fueron expresadas en unidades de  $\Gamma$ . Recuadro:  $\dot{Q}(t)$  (curva azul) y  $\overline{\dot{Q}}(t)$  (curva verde) como función del tiempo.

## 7.5. Flujo de calor fuera del régimen adiabático

En la sección anterior, dentro del régimen de bajas frecuencias, mostramos que la definición presentada en la Ec. (7.10) es positiva a temperatura  $T = 0$ , indicando que el reservorio solo puede absorber calor (como se espera para un sistema macroscópico a temperatura cero), y sigue una ley de Joule con una resistencia universal. En función de estos resultados concluimos que esta cantidad puede ser interpretada como el calor disipado. El objetivo de esta sección es explorar si este comportamiento tan interesante de la corriente de calor se mantiene incluso para frecuencias más altas, fuera del régimen adiabático.

Para ello, partimos de la expresión para  $\dot{Q}$  de la Ec. (7.10), y evaluamos todos los flujos de energía y la corriente de carga en termino de la la función de Green  $G(t, \varepsilon)$ , de acuerdo a las Ecs. (7.3), (7.5) y (7.6). Luego, pasamos a la representación de Floquet para potenciales periódicos y resolvimos la ecuación de Dyson en forma perturbativa para amplitudes  $V_{ac}$  pequeñas, como se explica en la Sec.2.2.3. Esto nos permite, a diferencia de

la sección anterior donde trabajamos expandiendo a bajas frecuencias, hacer un estudio del comportamiento del calor para frecuencias mayores.

En la Fig. 7.3 se muestran algunos resultados de la corriente  $\dot{Q}(t)$  para diferentes frecuencias  $\omega_0$ . Por simplicidad, nos enfocamos también en este caso a temperatura  $T = 0$ . Mostramos que si bien, para frecuencias bajas (círculos sólidos) la corriente de calor es una función lineal de  $J_C(t)^2$  con una pendiente constante  $R_q = h/2e^2$ , no ocurre lo mismo para frecuencias más altas. Mostramos que la corriente de calor inducida, para frecuencias del potencial externo fuera del régimen adiabático, se aparta de una ley de Joule. Además, toma valores negativos en algunos tiempos, contradiciendo así la segunda ley de la termodinámica. Este resultado, consecuencia de la dinámica fuera del equilibrio del sistema, plantea un interrogante sobre la correcta formulación de la segunda ley de la termodinámica para sistemas que se encuentran fuertemente fuera del equilibrio. Para frecuencias bajas, la corriente de calor se comporta como se espera en sistemas estacionarios (es positiva y sigue una ley de Joule), y las leyes de la termodinámica clásica siguen siendo válidas. Sin embargo, a altas frecuencias, la falta de equilibrio y los efectos cuánticos se vuelven relevantes. En particular, la relación de incertidumbre entre el tiempo y la energía podría jugar un papel.

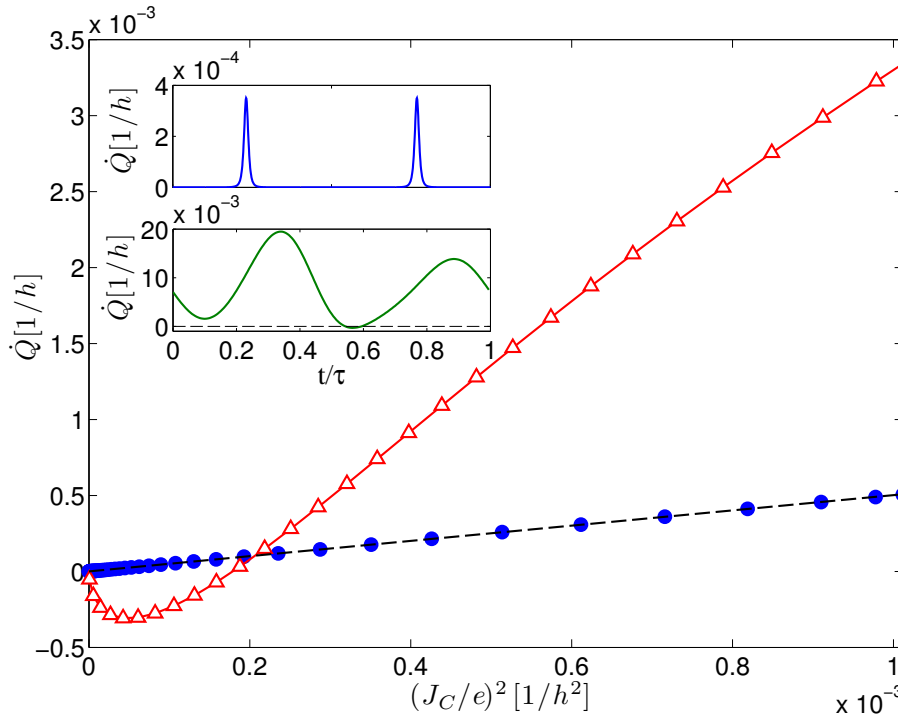


Figura 7.3: Flujos de calor  $\dot{Q}(t)$  como función de la corriente de carga el cuadrado  $J_C^2(t)$  para dos frecuencias  $\omega_0$  diferentes. Los triángulos corresponden a una frecuencia de  $\hbar\omega_0 = 0,3$  fuera del régimen adiabático,  $\mu = 0,2$ ,  $\varepsilon_0 = 0$ ,  $V_{ac} = 0,6$ , y  $T = 0$ . Los círculos corresponden a frecuencias bajas  $\hbar\omega_0 = 10^{-3}$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_0 = -1,2$ ,  $V_{ac} = 10$ , y  $T = 0$ . Las energías están expresadas en unidades de  $\Gamma$ . La línea punteada representa la relación de disipación de Joule con una resistencia  $R = h/2e^2$ . Recuadro: El panel de arriba muestra  $\dot{Q}(t)$  dentro del régimen adiabático; el panel de abajo  $\dot{Q}(t)$  para el régimen no adiabático.

## 7.6. Conclusiones

En conclusión, hemos discutido para un sistema con nivel resonante la generación de calor dinámico debido al acoplamiento con potenciales externos dependientes del tiempo. También hemos analizado el importante rol que cumple la energía asociada a la región de contacto con el reservorio, que tiene lugar solamente en transporte de energía dinámico.

Recurriendo a la expansión adiabática válida para potenciales que varían lentamente en el tiempo, encontramos que la expresión apropiada del flujo de calor dinámico, en acuerdo con los principios de la termodinámica, requiere que se tome en cuenta el trabajo asociado a las partículas fluyendo a través de la región del contacto con los reservorios. Es importante el hecho de que el flujo de calor sigue *instantáneamente* una ley de Joule con una resistencia universal.

Por último, también analizamos la generación de calor para frecuencias dentro del régimen no adiabático. En este caso, a diferencia del comportamiento a bajas frecuencias, el flujo de calor toma valores negativos, debido a la dinámica fuera del equilibrio. Sin embargo, se necesitan análisis más profundos para entender mejor este fenómeno.

## Bibliografía

- [1] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [2] F. Guinea, V. Hakim, and A. Muramatsu, Phys. Rev. B **32**, 4410 (1985).
- [3] A.-P. Jauho, N.S. Wingreen, and Y. Meir, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).
- [4] J. Gabelli, G. Fève, J.-M. Berroir, B. Plaçais, A. Cavanna, B. Etienne, Y. Jin, and D.C. Glattli, Science **313**, 49 (2006).
- [5] G. Fève, A. Mahé A, J.M. Berroirm, T. Kontos, B. Plaçais, D.C. Glattli, A. Cavanna, B. Etienne and Y. Jin, Science **316** 1169 (2007).
- [6] J.-P. Brantut, J. Meineke, D. Stadler, S. Krinner, and T. Esslinger, Science **337**, 1069 (2012).
- [7] T. Salber, S. Kling, T. Hecking, C. Geckeler, L. Morales-Molina, and M. Weitz, Science **326**, 1241 (2009).
- [8] L. Arrachea and M. Moskalets, Phys. Rev. B **74**, 245322 (2006).
- [9] W.N. Mathews, Jr., Am. J. Phys. **42**, 214 (1974).
- [10] M.V. Moskalets, *Scattering Matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport* (World Scientific, London, 2012).
- [11] D.S. Fisher and P.A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [12] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College, Philadelphia, PA, 1976. G. D. Mahan, Many-particle physics, Plenum, New York.
- [13] R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics*, Vol. I, Springer, Berlin-Heidelberg, 1991–2007.





# Capítulo 8

## Respuesta adiabática y teoría termoeléctrica generalizada para sistemas con potenciales ac

*M. F. Ludovico, F. Battista, F. von Oppen, and L. Arrachea, (2015). Adiabatic response and quantum thermoelectrics for ac driven quantum systems. arXiv preprint arXiv:1506.08617.*

En este capítulo extendemos la teoría de respuesta lineal (Capítulos 3 y 4) a sistemas bajo la acción de potenciales adiabáticos, incluyendo al flujo de energía entre los electrones y las fuerzas ac en pie de igualdad con las corrientes de carga y calor. La extensión de esta teoría nos permite describir la forma en que opera un dispositivo genérico con dos terminales, como el que se encuentra en la Fig.8.1. Este sistema cuántico genérico puede operar como un motor, un generador (Fig.8.1 a), una máquina térmica o un bombeador de calor (Fig.8.1 b). Específicamente, derivamos relaciones de Onsager no convencionales presentando una teoría termoeléctrica generalizada con una apropiada figura de mérito para sistemas bajo la acción de potenciales alternos, gradientes de temperatura y diferencias de potencial químico. Para ilustrar estos conceptos, presentamos un ejemplo de un dispositivo operando como motor y también en su modo inverso, como generador. Usamos como modelo un simple bombeador cuántico.

En la Sec.8.1 extendemos la teoría de respuesta lineal para sistemas modulados por potenciales dependientes del tiempo adiabáticos y derivamos relaciones de reciprocidad de Onsager no convencionales para los coeficientes de transporte. Luego, en la Sec.8.2 generalizamos la teoría termoeléctrica y caracterizamos el funcionamiento de máquinas cuánticas en términos de eficiencias y figuras de mérito. Por último en la Sec.8.3 presentamos resultados para un modelo simple de bombeador cuántico operando en el modo motor y generador.

### 8.1. Respuesta adiabática y relaciones de reciprocidad

Cosideramos un sistema genérico conectado a dos terminales como el que se esquematiza en la Fig.8.1, que bombea carga mediante la aplicación de potenciales externos ac  $V_i(t)$ . Estos parámetros externos pueden ser, por ejemplo, simples voltajes de gate aplicados en algunos sitios del sistema o un flujo magnético dependiente del tiempo. Empezamos evaluando en la aproximación adiabática las corrientes y las fuerzas inducidas por el set de parámetros periódicos en el tiempo. Colectamos los parámetros  $V_i(t)$  del Hamiltoniano

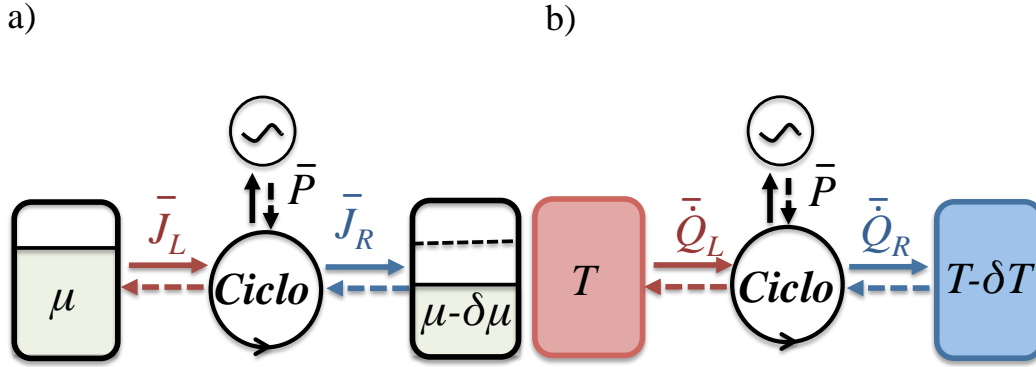


Figura 8.1: Esquema de la configuración que consideramos. Un conductor cuántico coherente es conducido por potenciales periódicos en el tiempo, y está conectado a dos reservorios con (a) una diferencia de potencial químico  $\delta\mu$ , (b) un gradiente de temperatura  $\delta T$ , o ambos. La corriente de carga es  $\bar{J}_\alpha$ , la de calor  $\bar{Q}_\alpha$  ( $\alpha = L, R$ ) y la potencia de las fuentes externas ac  $\bar{P}$ . La flechas sólidas (punteadas) indican (a) que el dispositivo esta operando en el modo motor (generador), y (b) corresponde al modo máquina térmica (bombeador de calor).

$\hat{H}$  dentro del vector  $\mathbf{V}(t) = \mathbf{V}(t + \tau) = (V_1(t), V_2(t), \dots)$ , con  $\tau = 2\pi/\omega_0$  el período de los potenciales alternos. De esta manera podemos escribir el Hamiltoniano del sistema como

$$\hat{H}(\mathbf{V}(t)) = \hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_j \hat{F}_j V_j(t), \quad (8.1)$$

donde  $\mathcal{H}_0$  es la parte del hamiltoniano independiente del tiempo, y  $F_j$  son operadores hermíticos correspondientes a las fuerzas generalizadas  $\hat{F}_j(t) = -\frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial V_j(t)}$ .

A orden más bajo en la aproximación adiabática, el sistema es descrito por la matriz densidad congelada  $\hat{\rho}_t$  para el Hamiltoniano  $\hat{H}_t = \hat{H}(\mathbf{V}(t))$  con  $t$  tratado como un parámetro. Computando la variación temporal de  $\mathbf{V}(t)$  a orden más bajo, podemos aproximar al operador evolución temporal como  $\hat{U}(t, t_0) \simeq \text{T exp}\{-i\hat{H}_t(t - t_0) - i\int_{t_0}^t dt'(t - t')\hat{\mathbf{F}} \cdot \dot{\mathbf{V}}(t)\}$  en términos de la fuerza generalizada  $\hat{\mathbf{F}}(t) = -\frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial \mathbf{V}(t)}$ . A orden lineal en la pequeña “velocidad”  $\dot{\mathbf{V}}(t)$ , podemos seguir los pasos usuales de la teoría de respuesta lineal presentados en el Capítulo 3 y entonces expresar el valor de expectación  $O(t)$  de un observable  $\hat{O}$  a tiempo  $t$  como

$$\begin{aligned} O(t) &\simeq \langle \hat{O} \rangle_t - i \int_{t_0}^t dt'(t - t') \langle [\hat{O}(t), \hat{\mathbf{F}}(t')] \rangle_t \dot{\mathbf{V}}(t) \\ &= \langle \hat{O} \rangle_t + \boldsymbol{\Lambda}_t^{O\mathbf{F}} \cdot \dot{\mathbf{V}}(t). \end{aligned} \quad (8.2)$$

Aquí, los operadores  $\hat{O}(t)$  y  $\hat{\mathbf{F}}(t')$  están definidos en la representación de Heisenberg con respecto al Hamiltoniano congelado  $H_t$  y  $\langle \dots \rangle_t$  denota el valor de expectación con respecto a la matriz densidad congelada  $\hat{\rho}_t$ . Los coeficientes  $\boldsymbol{\Lambda}_t^{O\mathbf{F}}$  pueden ser expresados a través de la susceptibilidad retardada adiabática  $\chi_t^{O,\mathbf{F}}(t - t') = -i\theta(t - t') \langle [\hat{O}(t), \hat{\mathbf{F}}(t')] \rangle_t$ .

Ahora, podemos expandir los promedios congelados a primer orden en la diferencia de potencial  $\delta\mu$ , siendo  $\langle \hat{O} \rangle_t \simeq \Lambda_t^{Oc} \delta\mu$ , donde el coeficiente de respuesta lineal  $\Lambda_t^{Oc}$  está dado por la fórmula de Kubo usual. Aplicando específicamente este procedimiento a la corriente de carga  $J^c(t)$  y las fuerzas  $\mathbf{F}(t)$  (y posponiendo las corrientes de calor y los gradientes térmicos para más adelante), obtenemos

$$\begin{pmatrix} J^c(t) \\ \mathbf{F}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_t^c \\ \mathbf{F}_t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Lambda_t^{cc} & \Lambda_t^{cf} \\ \Lambda_t^{fc} & \hat{\Lambda}_t^{ff} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mu \\ \dot{\mathbf{V}}(t) \end{pmatrix}, \quad (8.3)$$

a orden lineal en  $\delta\mu$  y  $\dot{\mathbf{V}}(t)$ .

Los distintos términos en la Ec.(8.3) tienen una clara interpretación física. El primer término del lado derecho colecta las corrientes y fuerzas evaluadas a partir de la matriz densidad congelada  $\hat{\rho}_t$  en equilibrio (*i.e.*, for  $\delta\mu = 0$ ). Estos términos tienen promedio temporal nulo sobre el período de los campos ac. Las fuerzas  $\mathbf{F}_t$  pueden pensarse como fuerzas conservativas y expresadas como un gradiente de la energía de equilibrio del sistema con respecto a  $\mathbf{V}(t)$ . Para muchos potenciales, este término podría describir el intercambio de trabajo entre las diferentes fuerzas  $F_j$  en ausencia de disipación. Estos procesos fueron considerados en Refs.[1] y [2].

Por otro lado, el bombeo adiabático de carga mediante la aplicación de potenciales ac es descrito por  $\Lambda_t^{cf}$ , mientras que  $\Lambda_t^{fc}$  captura la modificación de las fuerzas por una diferencia de potencial químico  $\delta\mu$ . Ambas contribuciones son generalmente distintas de cero al ser promediadas sobre el período, implicando que la contribución a la fuerza por parte de  $\Lambda_t^{fc}$  es no conservativa. Esto justamente fue discutido para sistemas de electrones no interactuantes acoplados a sistemas nanomecánicos [3, 4] y nano-magnéticos [5]. Por último, las componentes diagonales describen la conductancia usual mediante  $\Lambda_t^{cc}$  y la fuerza dependiente de la velocidad por  $\hat{\Lambda}_t^{ff}$ . En sistemas con simetría de inversión temporal, esta última es simétrica en sus índices y describe la fuerza de fricción. Sin simetría de inversión temporal,  $\hat{\Lambda}_t^{ff}$  puede tener una contribución antisimétrica que es análoga a la fuerza de Lorentz [4].

Como mencionamos anteriormente, estos coeficientes pueden ser calculados en término de susceptibilidades. Por ejemplo, los elementos de matriz  $\Lambda_t^{cf}$  son

$$\Lambda_j^{cf} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' (t - t') \theta(t - t') \langle [\hat{J}^c(t), \hat{F}_j(t')] \rangle_t \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{T} \mathcal{T} \chi_t^{J, F_j}(\mathcal{T}), \quad (8.4)$$

donde la susceptibilidad retardada es  $\chi_t^{J, F_j}(\mathcal{T}) = -i\theta(\mathcal{T}) \langle [\hat{J}^c(\mathcal{T}), \hat{F}_j(0)] \rangle_t$ . En el paso siguiente, utilizamos el hecho de que, para evoluciones con el operador  $U(\mathcal{T}) = e^{-i\mathcal{T}\hat{H}_t}$ , el argumento temporal del integrando de (8.4) es  $\mathcal{T} = t - t'$ . Representando la susceptibilidad en términos de la transformada de Fourier, la expresión anterior se puede escribir también como

$$\begin{aligned} \Lambda_j^{cf} &= \text{Re} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{T} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} e^{-i\omega\mathcal{T}} \partial_\omega \chi_t^{J, F_j}(\omega) \right] = \text{Re} \left[ -i \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \partial_\omega \chi_t^{J, F_j}(\omega) \delta(\omega) \right] \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \left[ \chi_t^{J, F_j}(\omega) \right]}{\omega}, \end{aligned} \quad (8.5)$$

donde usamos que la función espectral  $\text{Im} \left[ \chi_t^{J, F_j}(\omega) \right]$  es impar en  $\omega$ , por lo tanto  $\text{Im} \left[ \chi_t^{J, F_j}(0) \right] = 0$  [6].

De manera análoga, los elementos de matriz  $\hat{\Lambda}_t^{ff}$  pueden ser escritos como

$$\begin{aligned}\Lambda_{ij}^{ff} &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt'(t-t')\theta(t-t')\langle [\hat{F}_i(t), \hat{F}_j(t')] \rangle_t = \text{Re} \left[ -i \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \partial_\omega \chi_t^{F_i, F_j}(\omega) \delta(\omega) \right] \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \left[ \chi_t^{F_i, F_j}(\omega) \right]}{\omega},\end{aligned}\quad (8.6)$$

donde  $\chi_t^{F_i, F_j}(\omega)$  es la transformada de Fourier de  $\chi_t^{F_i, F_j}(\mathcal{T}) = -i\theta(\mathcal{T})\langle [\hat{F}_i(\mathcal{T}), \hat{F}_j(0)] \rangle_t$ .

El cálculo de la conductividad sigue el procedimiento usual de la fórmula de Kubo presentada en el Capítulo 3, Sec. 3.3. Comenzamos considerando una perturbación extra debida al acoplamiento con el campo eléctrico  $E(t) = \partial_t A(t)$ . En el dominio de Fourier la perturbación extra es  $\mathcal{H}'(\omega) = \mathcal{J} \cdot E(\omega)/(i\omega)$ , que nos conduce a la definición de la conductancia de

$$\Lambda^{cc} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \left[ \chi_t^{J, J}(\omega) \right]}{\omega},\quad (8.7)$$

donde  $\chi_t^{J, J}(\omega)$  es la transformada de Fourier de  $\chi_t^{J, J}(\mathcal{T}) = -i\theta(\mathcal{T})\langle [\hat{J}(\mathcal{T}), \hat{J}(0)] \rangle_t$ .

De manera similar, evaluando las fuerzas en respuesta lineal con respecto a  $\delta\mu$

$$\Lambda_j^{fc} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \left[ \chi_t^{F_j, J}(\omega) \right]}{\omega},\quad (8.8)$$

donde  $\chi_t^{F_j, J}(\omega)$  es la transformada de Fourier de  $\chi_t^{F_j, J}(\mathcal{T}) = -i\theta(\mathcal{T})\langle [\hat{F}_j(\mathcal{T}), \hat{J}(0)] \rangle_t$ .

La ecuación (8.3) tiene una importante consecuencia. Como acabamos de mostramos, sus coeficientes están relacionados a susceptibilidades evaluadas en un estado de equilibrio congelado  $\rho_t$ , y por lo tanto podemos aplicar argumentos basados en la micro-reversibilidad para estudiar la relación que hay entre ellos. Las susceptibilidades  $\chi_t^{O_i, O_j}$ , con  $\hat{O}_i$  un operador genérico, satisfacen micro-reversibilidad con respecto a  $\tau$ . Es posible verificar directamente que  $\chi_t^{O_i, O_j}(-\tau) = -i\theta(-\tau)\langle [\hat{O}_i(-\tau), \hat{O}_j(0)] \rangle_t = i\theta(-\tau)\langle [\hat{O}_j(\tau), \hat{O}_i(0)] \rangle_t = -i\theta(-\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega/(\pi) \text{Im}[\chi_t^{O_j, O_i}(\omega)]e^{-i\omega\tau}$ . Por lo que ante la inversión  $\tau \rightarrow -\tau$  el coeficiente  $\Lambda_{ij}$  transforma como

$$\Lambda_{ij}^{O_i, O_j} \xrightarrow{\tau \rightarrow -\tau} \text{Re} \left[ i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im}[\chi_t^{O_j, O_i}(\omega)] \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \tau \theta(-\tau) e^{-i\omega\tau} \right] = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \left[ \chi_t^{O_j, O_i}(\omega) \right]}{\omega} = \Lambda_{ji}^{O_j, O_i}.\quad (8.9)$$

En presencia de un campo magnético  $B$ , una transformación de inversión temporal implica también cambiar  $B \rightarrow -B$  en el Hamiltoniano  $\mathcal{H}_t$  que define la matriz densidad congelada  $\hat{\rho}_t$  utilizada para calcular los valores de expectación. Esta propiedad conduce a las siguientes relaciones de Onsager para las susceptibilidades usuales en presencia de  $B$ ,  $\chi_t^{O_i, O_j}(B, \omega) = s_i s_j \chi_t^{O_j, O_i}(-B, \omega)$ , donde los signos  $s_i, s_j = \pm$  dependen de la paridad de los operadores  $\hat{O}_i, \hat{O}_j$  bajo una transformación de inversión temporal. Por lo tanto, teniendo en cuenta (8.9), podemos ver que los coeficientes  $\Lambda_{ij}^{ff}$  satisfacen las siguientes relaciones de reciprocidad de Onsager

$$\Lambda_{ij}^{ff}(B) = s_i s_j \Lambda_{ji}^{ff}(-B),\quad (8.10)$$

donde  $s_i, s_j = \pm$  dependen de la paridad ante el cambio  $B \rightarrow -B$  de los operadores  $\hat{F}_i(B), \hat{F}_j(B)$ . Usando exactamente los mismos argumentos, podemos probar que

$$\Lambda_j^{cf}(B) = s_j \Lambda_j^{fc}(-B). \quad (8.11)$$

El caso con  $s_j = +$  corresponde a los operadores del tipo densidad, como en el ejemplo que vamos a considerar luego, mientras que  $s_j = -$  para operadores del tipo corriente como en el caso de sistemas con campos magnéticos dependientes del tiempo.

En conclusión, como consecuencia de la micro-reversibilidad, los coeficientes de respuesta  $\Lambda_t^{ij}$  satisfacen relaciones de Onsager generalizadas

$$\begin{aligned} \Lambda_t^{cc}(B) &= \Lambda_t^{cc}(-B) \quad , \quad \hat{\Lambda}_{ij}^{ff}(B) = s_i s_j \hat{\Lambda}_{ji}^{ff}(-B) \\ \Lambda_j^{cf}(B) &= s_j \Lambda_j^{fc}(-B). \end{aligned} \quad (8.12)$$

En particular, la segunda línea impone una relación entre el bombeo cuántico adiabático de carga y la fuerza no conservativa. Esta relación fue encontrada previamente en motores cuánticos adiabáticos a temperatura cero y  $B = 0$  [7]. Hay que resaltar que la demostración de la existencia de estas relaciones no convencionales es totalmente general, independiente de los detalles del sistema, de la presencia de interacciones de muchos cuerpos y de la temperatura; es por eso que hasta aquí no sugerimos una forma explícita para el Hamiltoniano.

## 8.2. Teoría termoeléctrica generalizada

El marco termoeléctrico convencional introducido en el Capítulo 4 considera las corrientes de carga y calor en respuesta a diferencias de potencial químico y temperatura entre los distintos reservorios. En presencia de potenciales ac, como en los dispositivos de la Fig.8.1, debemos incluir no solo el bombeo de carga y calor sino también el trabajo desarrollado por las fuentes ac. Para desarrollar la correspondiente teoría termoeléctrica cuántica, primero consideramos la producción de entropía del sistema. En un ciclo, es decir promediando sobre el período de los potenciales ac, la disipación neta ocurre solamente en los electrodos, y entonces podemos escribir

$$\bar{S} = \frac{\bar{Q}_L}{T_L} + \frac{\bar{Q}_R}{T_R}, \quad (8.13)$$

donde el flujo de calor promedio en el reservorio  $\alpha$  está dado por  $\bar{Q}_\alpha = \overline{W_\alpha^E} - \mu_\alpha \bar{J}_\alpha$ . El flujo de energía  $W_\alpha^E$  y el de partículas  $J_\alpha$  satisfacen las siguientes leyes de conservación

$$\bar{J}_R = -\bar{J}_L, \quad \overline{W_L^E} + \overline{W_R^E} = \bar{P}. \quad (8.14)$$

Mientras que la conservación de partículas toma la misma forma que en la teoría termoeléctrica usual, la conservación de la energía tiene en cuenta el trabajo adicional  $P$  que realizan los potenciales ac sobre el sistema de electrones. La correspondiente potencia puede ser expresada como  $P = -\sum_j F_j(t) \dot{V}_j(t)$ , siendo la producción de entropía a orden lineal en la diferencia de potencial químico  $\delta\mu = \mu_L - \mu_R$  y en la temperatura  $\delta T = T_L - T_R$ .

$$\bar{S} = \bar{J}_R \frac{\delta\mu}{T} + \bar{Q}_R \frac{\delta T}{T^2} - \sum_j \overline{F_j(t) \frac{\dot{V}_j(t)}{T}} \quad (8.15)$$

Notar que luego de promediar sobre un período, las fuerzas conservativas de la Ec. (8.3) no contribuyen a la producción de entropía. Luego, la potencia puede ser expresada en respuesta lineal y para  $\delta T = 0$  como

$$\bar{P} = - \sum_j \left( \overline{(\hat{\Lambda}_t^{fc})_j \dot{V}_j(t)} \delta\mu + \sum_l \overline{(\hat{\Lambda}_t^{ff})_{jl} \dot{V}_j(t) \dot{V}_l(t)} \right). \quad (8.16)$$

Aquí, el primer término del lado derecho de la ecuación describe el trabajo realizado por las fuerzas no conservativas originadas por una diferencia de voltaje  $\delta\mu$  ( $\delta T$  va a contribuir de manera similar), y el segundo término es la potencia disipada.

En el marco termoeléctrico usual, uno define los flujos de partículas y de calor  $J_1 = \overline{J_R}$  y  $J_2 = \overline{\dot{Q}_R}$ , así como también las afinidades asociadas  $X_1 = \delta\mu/T$  y  $X_2 = \delta T/T^2$  [8, 9]. Para extender la teoría termoeléctrica en esta situación, necesitamos identificar flujos y afinidades apropiadas para los términos de origen ac.

A primera vista, Ec. (8.15) sugiere que definamos  $-F_j$  como flujos y  $\dot{V}_j/T$  como las afinidades asociadas. Sin embargo, se obtiene la Ec. (8.15) cuando se promedia sobre un período. Sin valor medio, como se discutió en el Capítulo 7, las leyes de conservación involucran términos adicionales debido a la energía almacenada en la región de los contactos y en el sistema central [10]. Las fuerzas  $F_j(t)$  contienen contribuciones que son conservativas y el flujo de calor  $\dot{Q}_R$  tiene incluido la mitad de la energía almacenada en el contacto, de acuerdo con la definición (7.10).

A partir de (8.15) podemos identificar una apropiada afinidad notando que el primer término en la Ec. (8.16) es proporcional a  $\omega_0$ , mientras que el segundo lo es a  $\omega_0^2$ . Es entonces natural definir la afinidad  $X_3 = \hbar\omega_0/T$ , con un flujo asociado  $J_3 = \overline{P}/(\hbar\omega_0)$ . Esto nos permite escribir la producción de entropía como

$$\bar{\dot{S}} = \sum_j J_j X_j \quad (8.17)$$

Completamos ahora nuestro esquema termoeléctrico mediante relaciones en respuesta lineal entre los flujos y las afinidades,

$$J_i = \sum_k L_{ik} X_k. \quad (8.18)$$

Comparando estas relaciones con la Ecs. (8.3) y (8.16), se puede ver que los coeficientes termoeléctricos generalizados  $L_{ij}$  son promedios temporales de combinaciones de las matrices  $\Lambda_t^{ij}$ . Entonces es fácil ver que gracias a las relaciones de reciprocidad de la Ec. (8.12), los coeficientes  $L_{ij}$  también satisfacen relaciones de Onsager, es decir

$$L_{ii}(B) = L_{ii}(-B) \quad , \quad L_{ij}(B) = \pm L_{ji}(-B), \quad (8.19)$$

con  $i \neq j$ .

La expresiones explícitas de los coeficientes  $L_{ij}$  dependen del sistema particular bajo consideración, siendo las relaciones que satisfacen válidas para sistemas con o sin interacciones o a temperatura finita. Por ejemplo, para sistemas no interactuantes, pueden ser calculados en términos de matrices de scattering [11] o funciones de Green [1, 12, 13] (ver Sec. 8.3), como en los Capítulos 6 y 7.

Este formalismo termoeléctrico generalizado, nos permite describir y caracterizar, a partir de eficiencias y figuras de mérito, los distintos modos operacionales de máquinas cuánticas, como motores, generadores, máquinas térmicas y bombes de calor. Las siguientes subsecciones van a estar destinadas a la caracterización de dichos modos.

### 8.2.1. Motores y generadores

Primero consideramos la situación en la que se aplican al sistema fuerzas ac y una diferencia de potencial químico  $\delta\mu$ , y la temperatura  $T$  es uniforme. Luego, el dispositivo de la Fig. 8.1 (a) puede operar como un motor cuántico o como un generador. Cuando los potenciales ac bombean partículas hacia el reservorio con menor potencial químico, la ganancia en energía eléctrica puede ser utilizada para hacer trabajo sobre las fuentes de los potenciales ac. Esto ocurre para  $L_{31}\delta\mu/T < 0$  y corresponde a un motor, ya que el trabajo realizado puede ser luego transformado en trabajo mecánico [7]. Cuando se cambia el signo de  $\delta\mu$  y se tiene  $L_{31}\delta\mu/T > 0$ , los potenciales ac bombean partículas hacia el reservorio de mayor potencial químico y entonces se tiene un generador. Usando que  $X_2 = 0$  al no considerarse gradiente térmico, la tasa de producción de entropía es

$$\bar{S} = L_{11}X_1^2 + L_{33}X_3^2 + (L_{13} + L_{31})X_1X_3. \quad (8.20)$$

El último término del lado derecho describe la disipación debido a efectos de interferencia entre la fuente dc (una diferencia de voltaje), y las fuentes ac (los potenciales adiabáticos). Es entonces interesante analizar en qué situaciones el término  $(L_{13}(B) + L_{31}(B))$  contribuye a la producción de entropía. Recordando la definición del coeficiente de transporte adiabático  $G_{dc}^a$  introducido en el Capítulo 6, podemos ver que el coeficiente de Onsager relacionado con la corriente bombeada satisface  $L_{13} = G_{dc}^a T/\hbar = Q_{dc}T/h$ , con  $Q_{dc}$  la carga bombeada por ciclo. Si además utilizamos las relaciones de Onsager  $L_{31}(B) = -L_{13}(-B)$ , el último término de la Ec. (8.20) queda  $\propto (Q_{dc}(B) - Q_{dc}(-B))$ . En el Capítulo 6 mostramos que solamente en el caso particular de tener un sistema con conexiones a los reservorios espacialmente simétrica vale que  $Q_{dc}(B) = Q_{dc}(-B)$ , y en consecuencia estos efectos no aportarían a la producción de entropía. Este es un caso muy particular, pero en sistemas más generales en los que  $Q_{dc}(B) \neq Q_{dc}(-B)$ , se puede lograr una contribución de efectos cruzados entre fuentes ac y dc, aumentando eventualmente la eficiencia [14, 15].

En lo que sigue a continuación nos vamos a enfocar en el caso con campo magnético nulo  $B = 0$ ,  $L_{13} = -L_{31}$ , y por lo tanto los coeficientes  $L_{13}$  y  $L_{31}$  no afectan a la producción de entropía. Como consecuencia, en este caso, la segunda ley de la termodinámica impone que  $L_{11} > 0$  y  $L_{33} > 0$ .

Estamos ahora preparados para caracterizar el funcionamiento de motores cuánticos o generadores en término de eficiencias y figuras de mérito. La eficiencia  $\eta^{\text{mot}}$  de un motor se estima mediante el cociente entre el trabajo por unidad de tiempo  $-\bar{P}$  desarrollado por los potenciales ac y la potencia  $\bar{J}_R\delta\mu/e$  inyectada por la fuente de voltaje. De manera similar, la eficiencia del generador  $\eta^{\text{gen}}$  está dada por la inversa de este ratio,

$$\eta^{\text{mot}} = \frac{1}{\eta^{\text{gen}}} = \frac{-\bar{P}}{\bar{J}_R\delta\mu/e}. \quad (8.21)$$

Combinando la Ec. 8.13, con  $\bar{Q}_\alpha = \bar{W}_\alpha^E - \mu_\alpha\bar{J}_\alpha$  y la Ec. (8.14), tenemos

$$\bar{P} = T\bar{S} - \frac{\delta\mu}{e}\bar{J}_R. \quad (8.22)$$

Sustituyendo la Ec. (8.22) dentro de la Ec. (8.21) llegamos a

$$\eta^{\text{mot}} = \frac{1}{\eta^{\text{gen}}} = 1 - \frac{T\bar{S}}{\bar{J}_R\delta\mu/e}. \quad (8.23)$$

Como el segundo principio de la termodinámica implica  $\overline{S} > 0$ , las eficiencias deben cumplir  $\eta^{\text{mot/gen}} \leq 1$ .

En lo siguiente, nos enfocamos en el régimen de respuesta lineal, con lo que la Ec. (8.21) se puede expresar como:

$$\eta^{\text{mot}} = \frac{1}{\eta^{\text{gen}}} = -\frac{X_3 J_3}{X_1 J_1}. \quad (8.24)$$

Con el objetivo de encontrar cuál es la máxima eficiencia del motor/generador cuántico, asumimos  $X_3$  constante y encontramos que el valor de  $X_1$  que maximiza la eficiencia es

$$X_1 = \frac{L_{11}L_{33} \pm \sqrt{L_{11}L_{33}\det(\hat{L})}}{L_{11}L_{13}} X_3, \quad (8.25)$$

con el signo  $+(-)$  para motores (generadores). Alternativamente, se puede asumir  $X_1$  constante y maximizar la eficiencia respecto de  $X_3$ . En este caso encontramos

$$X_3 = \frac{-L_{11}L_{33} \pm \sqrt{L_{11}L_{33}\det(\hat{L})}}{L_{33}L_{13}} X_1, \quad (8.26)$$

donde de nuevo  $+(-)$  corresponde a motores (generadores). Luego, sustituyendo las Ecs. (8.25, 8.26) dentro de la Ec. (8.24), la eficiencia máxima se puede escribir como

$$\eta^{\text{max}} = \frac{\sqrt{1+\zeta}-1}{\sqrt{1+\zeta}+1} \quad (8.27)$$

e identificar la figura de mérito

$$\zeta = \frac{L_{13}^2}{L_{11}L_{33}}. \quad (8.28)$$

por lo tanto  $\eta^{\text{max}}$  y  $\zeta$  son válidas para ambos, motores y generadores. Al contrastar las Ecs. (8.27) y (8.28) con el marco termoelectrico convencional, más precisamente con las ecuaciones (4.9) y (4.10) del Capítulo 4, vemos que tanto la eficiencia máxima como la figura de mérito satisfacen expresiones análogas. En la teoría convencional aparece además la eficiencia de Carnot como factor multiplicativo de la eficiencia, y la figura de mérito tiene el valor familiar  $ZT = L_{12}^2/\det L$ . La ausencia de la eficiencia de Carnot en la Ec. (8.27) refleja que la energía eléctrica puede ser totalmente convertida en otras formas de energía, por eso  $\eta^{\text{mot}}$  está acotada superiormente por uno. Este límite es alcanzado cuando  $\zeta \rightarrow \infty$ , es decir, cuando uno de los dos coeficientes disipativos  $L_{11}$  o  $L_{33}$  tienden a cero. La forma diferente de la figura de mérito puede remontarse al hecho de que  $L_{13}$  y  $L_{31}$  no afectan la producción de entropía.

### 8.2.2. Máquinas térmicas y bombes de calor

Se obtienen resultados análogos cuando se aplica una diferencia de temperatura  $\delta T$  entre los reservorios, manteniendo constante el potencial químico ( $X_1 = 0$ , ver Fig.8.1). Cuando el sistema opera como una máquina térmica, es decir para  $L_{32}\delta T/T^2 < 0$ , el calor fluye al reservorio frío y el sistema realiza trabajo sobre los potenciales ac. A la inversa, el dispositivo opera como un bombeador de calor cuando  $L_{32}\delta T/T^2 > 0$ . En este caso, el



calor es bombeado por los potenciales ac hacia el reservorio caliente. Como resultado de la simetría de Onsager  $L_{23} = -L_{32}$  para  $B = 0$ , encontramos nuevamente que la segunda ley de la termodinámica impone que  $L_{22} > 0$  y  $L_{33} > 0$ .

Una medida apropiada de la eficiencia  $\eta^{\text{he}}$  de una máquina térmica es el cociente entre la potencia neta desarrollada por el sistema de electrones contra las fuerzas ac y el calor que sale del reservorio caliente  $\dot{Q}^{\text{hot}}$  (que en respuesta lineal es  $-\dot{Q}^{\text{cold}}$ ). En el caso de un bombeador de calor, la eficiencia  $\eta^{\text{hp}}$  queda determinada por la inversa del cociente anterior. Por consiguiente, tomando como positiva la corriente de calor que entra al reservorio y  $T_R = T_L - \delta T$ .

$$\eta^{\text{he}} = \frac{1}{\eta^{\text{hp}}} = \frac{\bar{P}}{\bar{Q}_L}. \quad (8.29)$$

Combinando la Ec. (8.13), con  $\bar{Q}_\alpha = \bar{W}_\alpha^E - \mu_\alpha \bar{J}_\alpha$  y la Ec. (8.14), encontramos

$$\eta_c \bar{Q}_L = -T_R \bar{S} + \bar{P}, \quad (8.30)$$

donde  $\eta_c = \delta T/T_L$  es la eficiencia de Carnot para una máquina térmica. Sustituyendo la Ec. (8.30) dentro de (8.29)

$$\eta^{\text{he}} = \frac{1}{\eta^{\text{hp}}} = \eta_c \left[ 1 - \frac{T_R \bar{S}}{T_R \bar{S} - \bar{P}} \right] = -\eta_c \frac{X_3 J_3}{X_2 J_2}. \quad (8.31)$$

Como este dispositivo convierte calor en energía mecánica y viceversa, la eficiencia se encuentra acotada por la de Carnot  $\eta_c = \delta T/T$  para la máquina térmica o  $T/\delta T$  para el bombeador cuántico, como debe ser.

Maximizando la eficiencia como antes, encontramos nuevamente las Ecs. (8.25, 8.26), donde ahora  $X_2$  toma el lugar de la afinidad  $X_1$ . Entonces la eficiencia máxima toma una forma similar

$$\eta^{\text{max}} = \eta_c \frac{\sqrt{1 + \tilde{\zeta}} - 1}{\sqrt{1 + \tilde{\zeta}} + 1} \quad (8.32)$$

con figura de mérito

$$\tilde{\zeta} = \frac{L_{23}^2}{L_{22} L_{33}}. \quad (8.33)$$

### 8.3. Ejemplo: Sistema con dos terminales y sin interacciones

Como se mencionó anteriormente, los coeficientes de transporte  $L_{ij}$  pueden ser directamente calculados a partir de los coeficientes  $\Lambda$ , evaluados por medio de las susceptibilidades  $\chi_t(\omega)$ . Para sistemas sin interacciones, otra posibilidad totalmente equivalente es calcularlos en términos de funciones de Green o de la matriz de scattering.

Empezamos considerando un modelo simple para la configuración genérica de la Fig. 8.1 sin interacciones. La pieza central esta conectada a dos reservorios de electrones, con potenciales químicos  $\mu_\alpha$  y temperaturas  $T_\alpha$ ,  $\alpha = L, R$ . A la parte central también se le aplican potenciales externos dependientes del tiempo caracterizados por un conjunto

de parámetros periódicos  $\mathbf{V}(t) \equiv (V_1(t), \dots, V_N(t))$  oscilando con una frecuencia  $\omega_0$ . El Hamiltoniano del sistema completo es:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_c(t) + \hat{H}_{res} + \hat{H}_T. \quad (8.34)$$

El primer término corresponde al conductor central, que es descrito por un modelo discreto con  $N$  sitios con energías locales  $\varepsilon_m$  y potenciales aplicados  $V_m(t)$ . Lo sitios se encuentran conectados a sus vecinos con amplitudes de salto  $w$ .

$$\hat{H}_c(t) = \sum_{m=1}^N \left[ (\varepsilon_m + V_m(t)) d_m^\dagger d_m + \sum_{m=1}^{N-1} w d_m^\dagger d_{m+1} \right] + \text{h.c.} \quad (8.35)$$

Los reservorios son representados por Hamiltonianos de electron libre,

$$\hat{H}_{res} = \sum_{\alpha=L,R,k_\alpha} \varepsilon_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}. \quad (8.36)$$

El Hamiltoniano  $\hat{H}_T$  representa el contacto entre los reservorios y el sistema,

$$\hat{H}_T = - \sum_{\alpha,k_\alpha,n_\alpha} [w_\alpha d_{n_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha} + \text{h.c.}], \quad (8.37)$$

donde  $n_\alpha$  es el sitio de la estructura central que está en contacto con el reservorio  $\alpha$ .

En el Capítulo 2 Sec. 2.2 mostramos que la corriente de carga  $\overline{J}_\alpha$  y el flujo de energía  $\overline{W}_\alpha^E$  promediados en un período, pueden ser calculados en términos de las componentes de Floquet de la función de Green retardada de la estructura central. La expresiones que resultan son

$$\overline{J}_\alpha = \frac{e}{h} \int d\varepsilon \sum_{n,\beta} [f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0)] |\hat{\mathcal{G}}_{\alpha\beta}(n, \varepsilon)|^2 \hat{\Gamma}_\beta \hat{\Gamma}_\alpha, \quad (8.38)$$

y

$$\overline{W}_\alpha^E = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \sum_n \varepsilon [f_\beta(\varepsilon) - f_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0)] |\hat{\mathcal{G}}_{\alpha\beta}(n, \varepsilon)|^2 \hat{\Gamma}_\beta \hat{\Gamma}_\alpha. \quad (8.39)$$

La corriente de calor puede ser calculada entonces a partir de la relación

$$\overline{Q}_\alpha = \overline{W}_\alpha^E - \mu_\alpha \frac{\overline{J}_\alpha}{e}. \quad (8.40)$$

Mediante un procedimiento similar, el trabajo realizado por los potenciales ac puede ser escrito como

$$\overline{P} = -\frac{1}{h} \sum_{\alpha,l,n} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon n\hbar\omega_0 f_\alpha(\varepsilon) \text{Im}\{\text{Tr} [\hat{V}(n) \hat{\mathcal{G}}(n+l, \varepsilon) \hat{\Gamma}_\alpha \hat{\mathcal{G}}^\dagger(l, \varepsilon)]\}, \quad (8.41)$$

donde  $\hat{V}(n)$  son las componentes de Fourier de  $\hat{V}(t) = \sum_n \hat{V}(n) e^{in\omega_0 t}$ , siendo  $\hat{V}(t)$  una matriz cuyos elementos diagonales son  $V_m(t)$ . Para la matriz de hibridización  $\hat{\Gamma}_\alpha$  consideramos el límite de ancho de banda infinito, por lo que es constante. En lo que sigue a

continuación vamos a considerar solamente términos de las corrientes  $J_1 = \overline{J_R}$ ,  $J_2 = \overline{\dot{Q}_R}$  y  $J_3 = \overline{P}/(\hbar\omega_0)$  hasta orden  $\mathcal{O}(\hbar\omega_0)$ . Preferimos trabajar en esta representación porque muestra claramente que  $\hbar\omega_0$  aparece solamente en las funciones de Fermi de los integrandos de las corrientes. En la función de Fermi, esta energía aparece en pie de igualdad con el potencial químico  $\mu$ , lo cual sugiere que tiene sentido identificar  $\hbar\omega_0/T$  como una afinidad.

Otro posible enfoque es el formalismo de la matriz de scattering de Floquet utilizado por ejemplo en la Ref. [11] y presentado en el Capítulo 2, Sec. 2.2, Subsec. 2.2.5. Los elementos  $S_{ij}^F(\varepsilon_m, \varepsilon_n)$  de la matriz de Floquet con  $\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\omega_0$ , son las amplitudes de que un electrón pase del reservorio  $i$  al  $j$  adquiriendo  $m - n$  cuantos de energía  $\hbar\omega_0$ .

La relación entre los elementos de la matriz de scattering de Floquet y los coeficientes de Fourier de las funciones de Green es la formula generalizada de Fisher-Lee de la Ec. (2.106)[12], que para un sistema central con más de un nivel es

$$S_{ij}^F(\varepsilon_m, \varepsilon_n) = \delta_{ij}\delta_{mn} - i\sqrt{\Gamma_i\Gamma_j}\mathcal{G}_{ij}(m - n, \varepsilon_n). \quad (8.42)$$

### 8.3.1. Respuesta lineal

Para calcular las corrientes  $J_l$ ,  $l = 1, 2, 3$  hasta orden lineal en  $\hbar\omega_0$ ,  $\delta\mu$  y  $\delta T$  realizamos la siguiente expansión de la función de Fermi en los integrandos de las Ecs. (8.38), (8.40) y (8.41)

$$f_\alpha(\varepsilon + n\hbar\omega_0) \sim f_\alpha(\varepsilon) + n\hbar\omega_0\partial_\varepsilon f_\alpha(\varepsilon) - \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}(\mu_\alpha - \mu) - \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon} \frac{(\varepsilon - \mu)}{T}(T_\alpha - T). \quad (8.43)$$

También necesitamos evaluar  $\mathcal{G}(n, \varepsilon)$  hasta orden lineal en  $\omega_0$ . Esto se puede hacer expandiendo la ecuación de Dyson en potencias de  $\omega_0$  (ver Capítulo 5, Sec. 5.4). La solución entonces se puede escribir como

$$\hat{G}(t, \varepsilon) \sim \hat{G}^f(t, \varepsilon) + i\hat{G}^{(1)}(t, \varepsilon), \quad (8.44)$$

en término de la función de Green congelada

$$\hat{G}^f(t, \varepsilon) = \left[ \hat{1}\varepsilon - \hat{H}_c^t + i\frac{\hat{\Gamma}}{2} \right]^{-1} \quad (8.45)$$

correspondiente al Hamiltoniano congelado a tiempo  $t$ ,  $\hat{H}_c^t = \hat{H}_c(t)$  ( $\hat{\Gamma}$  colecta las funciones de hibridización de los dos reservorios). El segundo término es

$$\hat{G}^{(1)}(t, \varepsilon) = \frac{\hbar}{2}\partial_\varepsilon\partial_t\hat{G}^f(t, \varepsilon) + \hat{\mathcal{A}}(t, \varepsilon), \quad (8.46)$$

donde

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{\hbar}{2} \left( \partial_\varepsilon\hat{G}^f(t, \varepsilon)\frac{d\hat{V}}{dt}\hat{G}^f(t, \varepsilon) - \hat{G}^f(t, \varepsilon)\frac{d\hat{V}}{dt}\partial_\varepsilon\hat{G}^f(t, \varepsilon) \right). \quad (8.47)$$

También se puede hacer un tratamiento similar para la matriz de scattering de Floquet, de manera que hasta primer orden en la frecuencia es

$$S_{ij}^F(\varepsilon, \varepsilon_n) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{-in\omega_0 t} [S_{ij}^f(t, \varepsilon) + \frac{n\hbar\omega_0}{2}\partial_\varepsilon S_{ij}^f(t, \varepsilon) + \hbar\omega_0 A_{ij}(t, \varepsilon)]. \quad (8.48)$$

Aquí  $S_{ij}^f(t, \varepsilon)$  es la matriz de scattering congelada. Los elementos de matriz  $A_{ij}(t, \varepsilon)$  son la corrección a primer orden de la matriz de scattering adiabática. Tanto  $S_{ij}^f(t, \varepsilon)$  como  $A_{ij}(t, \varepsilon)$  no cambian significativamente en las escalas de energía  $\hbar\omega_0$  y  $T$ , y su forma explícita depende de los detalles del sistema. De todos modos, se puede mostrar que, debido a la unitariedad de la matriz de scattering de Floquet y de su correspondiente matriz congelada, se tiene que cumplir la relación [11]

$$\hbar\omega_0[\hat{S}^{f\dagger}\hat{A} + \hat{A}^\dagger\hat{S}^f] = \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial\hat{S}^{f\dagger}}{\partial t} \frac{\partial\hat{S}^f}{\partial\varepsilon} - \frac{\partial\hat{S}^{f\dagger}}{\partial\varepsilon} \frac{\partial\hat{S}^f}{\partial t} \right). \quad (8.49)$$

La Ec. (8.42) define una relación explícita para  $\hat{A}$  y  $\hat{A}$  [8].

### 8.3.2. Coeficientes de transporte

Sustituyendo las expansiones para la función de Fermi, Eq. (8.43), y para la función de Green, Eq. (8.44), dentro de las Ecs. (8.38), (8.40) y (8.41); y colectando luego los términos hasta primer orden en las afinidades  $X_1 = \frac{\delta\mu}{T}$ ,  $X_2 = \frac{\delta T}{T^2}$  y  $X_3 = \frac{\hbar\omega_0}{T}$  obtenemos:

$$\begin{aligned} L_{11} &= -\frac{T}{\hbar\tau} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} |\hat{G}_{RL}^f(t, \varepsilon)|^2 \hat{\Gamma}_L \hat{\Gamma}_R \\ L_{12} &= L_{21} = -\frac{T}{\hbar\tau} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \frac{df}{d\varepsilon} |\hat{G}_{RL}^f(t, \varepsilon)|^2 \hat{\Gamma}_L \hat{\Gamma}_R \\ L_{13} &= -L_{31} = -\frac{T}{2\pi\hbar} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \text{Im} \left\{ \left[ \hat{G}^f(t, \varepsilon) \hat{\Gamma} \frac{\partial\hat{G}^{f\dagger}(t, \varepsilon)}{\partial t} \hat{\Gamma} \right]_{RR} \right\} \\ L_{22} &= -\frac{T}{\hbar\tau} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^2 \frac{df}{d\varepsilon} |\hat{G}_{RL}^f(t, \varepsilon)|^2 \hat{\Gamma}_L \hat{\Gamma}_R \\ L_{23} &= -L_{32} = -\frac{T}{2\pi\hbar} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \frac{df}{d\varepsilon} \text{Im} \left\{ \left[ \hat{G}^f(t, \varepsilon) \hat{\Gamma} \frac{\partial\hat{G}^{f\dagger}(t, \varepsilon)}{\partial t} \hat{\Gamma} \right]_{RR} \right\} \\ L_{33} &= -\frac{T\tau}{8\pi^2\hbar} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \text{Re} \left\{ \text{Tr} \left[ \frac{\partial\hat{G}^f(t, \varepsilon)}{\partial t} \hat{\Gamma} \frac{\partial\hat{G}^{f\dagger}(t, \varepsilon)}{\partial t} \hat{\Gamma} \right] \right\}. \quad (8.50) \end{aligned}$$

En el formalismo de la matriz de scattering los coeficientes quedan

$$\begin{aligned}
L_{11} &= -\frac{T}{h\tau} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} |\hat{S}^f_{RL}(t, \varepsilon)|^2 \\
L_{12} &= L_{21} = -\frac{T}{h\tau} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \frac{df}{d\varepsilon} |\hat{S}^f_{RL}(t, \varepsilon)|^2 \\
L_{13} &= -L_{31} = -\frac{T}{2\pi h} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \text{Im} \left\{ \left[ \hat{S}^f(t, \varepsilon) \frac{\partial \hat{S}^{f\dagger}(t, \varepsilon)}{\partial t} \right]_{RR} \right\} \\
L_{22} &= -\frac{T}{h\tau} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^2 \frac{df}{d\varepsilon} |\hat{S}^f_{RL}(t, \varepsilon)|^2 \\
L_{23} &= -L_{32} = -\frac{T}{2\pi h} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \frac{df}{d\varepsilon} \text{Im} \left\{ \left[ \hat{S}^f(t, \varepsilon) \frac{\partial \hat{S}^{f\dagger}(t, \varepsilon)}{\partial t} \right]_{RR} \right\} \\
L_{33} &= -\frac{T\tau}{8\pi^2 h} \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \text{Tr} \left[ \frac{\partial \hat{S}^f(t, \varepsilon)}{\partial t} \frac{\partial \hat{S}^{f\dagger}(t, \varepsilon)}{\partial t} \right].
\end{aligned} \tag{8.51}$$

Las matrices  $\hat{A}$  en el lenguaje de funciones de Green, y  $\hat{A}$  con matriz de scattering, en principio parecen contribuir al coeficiente de transporte  $L_{33}$ . En particular, aparecen como

$$\sum_{ij} 2\text{Im} \left\{ A_{ij}(t, \varepsilon) \frac{\partial S_{ij}^{f*}(t, \varepsilon)}{\partial t} \right\}. \tag{8.52}$$

Sin embargo, como se muestra en la Ref. [4], debido a la condición de unitariedad de la matriz de scattering congelada  $\hat{S}^f \hat{S}^{f\dagger} = 1$  y la propiedad (8.49) este término se anula. De hecho, puede ser también escrito como

$$\begin{aligned}
2\text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[ \partial_t \hat{S}^{f\dagger} \hat{A} \right] \right\} &= -i \text{Tr} \left[ \partial_t \hat{S}^{f\dagger} \hat{A} - \hat{A}^\dagger \partial_t \hat{S}^f \right] \\
&= -i \text{Tr} \left[ \left( \hat{S}^{f\dagger} \hat{A} + \hat{A}^\dagger \hat{S}^f \right) \partial_t \hat{S}^{f\dagger} \hat{S}^f \right] = \frac{1}{2\omega_0} \text{Tr} \left[ \left( \partial_t \hat{S}^{f\dagger} \partial_\varepsilon \hat{S}^f - \hat{S}^{f\dagger} \partial_\varepsilon \hat{S}^f \partial_t \hat{S}^{f\dagger} \hat{S}^f \right) \partial_t \hat{S}^{f\dagger} \hat{S}^f \right] = 0.
\end{aligned} \tag{8.53}$$

### 8.3.3. Resultados

Para ilustrar estos conceptos, consideramos un punto cuántico con un único nivel y acoplado a dos reservorios, como se muestra en la Fig.8.2 (a). Tanto el nivel del punto cuántico como las barreras son moduladas en el tiempo mediante potenciales de gate ac  $V_m(t) = V_m^0 \cos(\omega_0 t + \delta_m)$ , con  $m = 1, 3$  para las barreras y  $m = 2$  para el nivel del medio. Este modelo tiene los ingredientes necesarios para poder describir una fuente de electrones de a uno, similar al bombeador realizado experimentalmente en la Ref.[16].

Consideramos una diferencia de potencial químico  $\delta\mu$  aplicada a  $T = 0$ , es decir que el dispositivo opera en régimen de motor o generador. Calculamos los coeficientes de transporte  $L_{ij}$  para este caso específico. En la Fig. 8.2(b) mostramos los coeficientes de

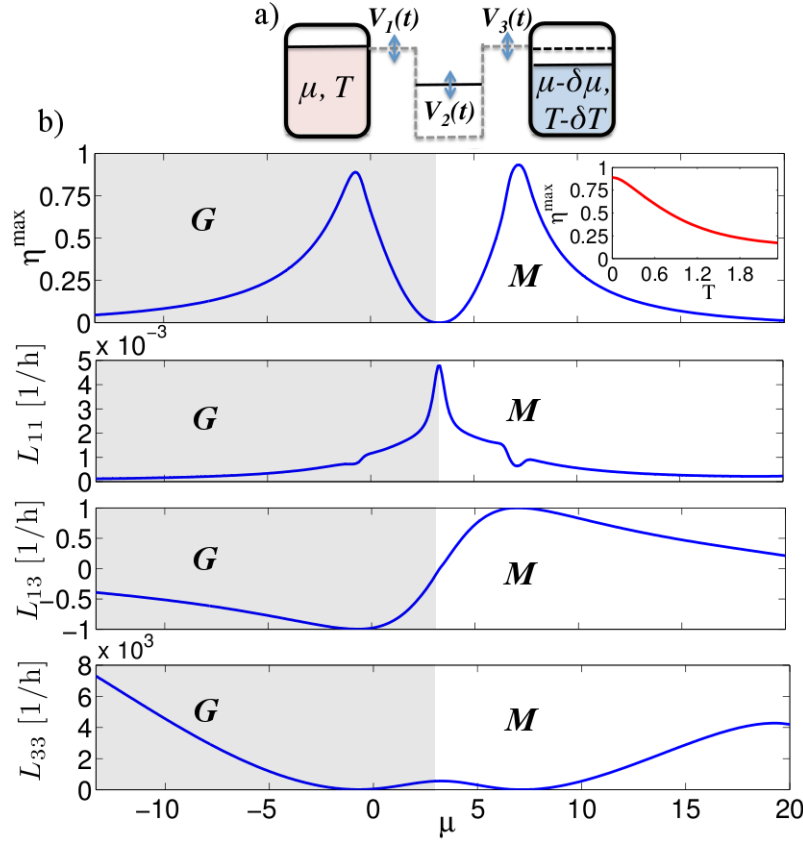


Figura 8.2: (a) Esquema del dispositivo. Un punto cuántico de un nivel ( $m = 2$ ) y sus barreras túnel ( $m = 1, 3$ ) representadas por un modelo discreto con energías locales  $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 3,3$  y  $\varepsilon_2 = -1$ . Las barreras y el nivel son moduladas por potenciales de gate periódicos  $V_m(t) = V_j^0 \cos(\omega_0 t + \delta_m)$ , con  $V_1^0 = V_3^0 = 4$ ,  $V_2^0 = 23$ ,  $\delta_1 = 0$ ,  $\delta_2 = \pi/2$ , y  $\delta_3 = \pi$ . La amplitud de salto entre las barreras y el punto cuántico es  $w = 1$  y  $w_L = w_R = 0,7$  entre las barreras y los reservorios. Los reservorios tienen  $\mu_L = \mu$ ,  $\mu_R = \mu - \delta\mu$  y temperatura  $T$ . (b) Eficiencia máxima  $\eta^{\max}$  y coeficientes de transporte a  $T = 0$  para los modos motor ( $M$ ) y generador ( $G$ ). Recuadro:  $\eta^{\max}$  para el generador/motor con  $\mu = -0,7$  ( $\mu = 7,2$ ).

transporte y la eficiencia máxima  $\eta^{\max}$  en función del potencial químico  $\mu$  del reservorio izquierdo. Los valores grandes de la figura de mérito requieren que el coeficiente de transporte correspondiente al bombeo de carga  $L_{13}$  sea grande y que  $L_{33}$  o  $L_{11}$  sean chicos, es decir baja fricción o conductancia. Si el punto cuántico central no es modulado por un potencial ac ( $V_2(t) = 0$ ), la conductancia llega a su pico cerca de  $L_{11} = 1$  cuando  $\mu$  es resonante con el nivel del centro. Modular el nivel central con una diferencia de fase con las barreras oscilantes ( $\delta_2 - \delta_m \neq 0$  para  $m = 1, 3$ ) favorece el bombeo de carga y decrece la conductancia. En este camino, se pueden lograr eficiencias altas a pesar de los grandes valores de  $L_{33}$ .

A medida que el potencial químico pasa el nivel del punto cuántico, el coeficiente de bombeo cambia de signo, y el sistema pasa de operar en el modo motor [ $L_{13}\delta\mu/T > 0$ ; ver región  $M$  en la Fig. 8.2 (b)] al modo generador [ $L_{13}\delta\mu/T < 0$ , ver región  $G$  en la Fig. 8.2(b)]. La eficiencia es mínima cuando el potencial químico está en resonancia con

el nivel central, donde la conductancia es máxima y el bombeo de carga tiende a cero por simetrías de electrón- agujero.

El dispositivo puede operar también como una máquina térmica o un bombeador de calor cuando se impone un gradiente de temperatura. Como esto requiere que  $T$  no sea nula, los efectos cuánticos son menos pronunciados y entonces las eficiencias alcanzadas son menores que las que se muestran en la Fig. 8.2. Sin embargo, encontramos que para parámetros apropiados éstas pueden ser tan altas como  $\approx 0,4\eta_c$ .

## 8.4. Conclusiones

Motivado en parte por la desigualdad de Jarzynski's [17] y el teorema de Crook's [18], ha habido recientemente mucho interés en la termodinámica cuántica, incluyendo relaciones de fluctuación y la descripción termodinámica de sistemas fuertemente acoplados [19–21]. Aquí, hemos provisto un marco termoeléctrico generalizado para analizar la termodinámica de sistemas de escala nano modulados en el tiempo por potenciales ac. La presencia de estos potenciales da lugar a efectos de bombeo cuántico y a la presencia de fuerzas no conservativas. Estas fuerzas entran en la teoría a través de un flujo adicional con una afinidad asociada, que hemos identificado. También derivamos las correspondientes relaciones de Onsager generalizadas, definiendo las eficiencias y figuras de mérito apropiadas para motores cuánticos, generadores, máquinas térmicas y bombeadores de calor. Luego, ilustramos estos conceptos para el caso de un dispositivo simple con bombeo cuántico.

## Bibliografía

- [1] L. Arrachea, M. Moskalets, and L. Martin-Moreno, Phys. Rev. B **75**, 245420 (2007).
- [2] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **80**, 081302(R) (2009).
- [3] J. T. Lu, M. Brandbyge, and P. Hedegard, Nano Lett. **10**, 1657 (2010).
- [4] N. Bode, S. Viola Kusminskiy, R. Egger, and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **107**, 036804 (2011).
- [5] N. Bode, L. Arrachea, G. S. Lozano, T. S. Nunner, and F. von Oppen, Phys. Rev. B **85**, 115440 (2012) .
- [6] D. Cohen, PRB **68**, 155303 (2003).
- [7] R. Bustos-Marun, G. Refael and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **111**, 060802 (2013).
- [8] H. Callen, Phys. Rev. **73**, 1349 (1948).
- [9] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Statistical Physics, Vol.5, Pergamon press, London-Paris (1959).
- [10] M. F. Ludovico, J. S. Lim, M. Moskalets, L. Arrachea and D. Sanchez, Phys. Rev. B **89**, 161306 (R) (2014).
- [11] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **69**, 205316 (2004).

- 
- [12] L. Arrachea and M. Moskalets, *Phys. Rev. B* **74**, 245322 (2006).
  - [13] M. F. Ludovico and L. Arrachea, *Phys. Rev. B* **87**, 115408 (2013).
  - [14] P. P. Hofer and B. Sothmann. *Phys. Rev. B*, 91(19), 195406 (2015).
  - [15] R. Sánchez, S. Björn, and N. J. Andrew *Phys. Rev. Lett.* 114.14 (2015): 146801
  - [16] M. D. Blumenthal, B. Kaestner, L. Li, S. Giblin, T. J. B. M. Janssen, M. Pepper, D. Anderson, G. Jones, and D. A. Ritchie, *Nature Phys.* **3**, 343 (2007).
  - [17] C. Jarzynski, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2690 (1997).
  - [18] G. E. Crooks, *Phys. Rev. E* **60**, 2721 (1999).
  - [19] J. Kurchan, *J. Stat. Mech.* P07005 (2007).
  - [20] M. Esposito, U. Harbola and S. Mukamel, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1665 (2009).
  - [21] M. Campisi, P. Hänggi and P. Talkner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 771 (2011).



# Capítulo 9

## Conclusiones

En esta tesis estudiamos las propiedades de transporte de carga y energía en sistemas de escala mesoscópica que se encuentran fuera del equilibrio debido a la acción de potenciales dependientes del tiempo. Con el objetivo de estudiar las propiedades termodinámicas y fenómenos termoeléctricos en estos sistemas, en esta tesis nos enfocamos en describir la relación entre corrientes de partículas y de energía. En primer lugar, comenzamos estudiando las propiedades de transporte eléctrico dc en sistemas de tipo Aharonov-Bohm con anillos mesoscópicos conectados a dos electrodos y atravesados por campos magnéticos alternos del tipo  $\Phi(t) = \Phi^{dc} + \Phi^{ac}\cos(\omega_0 t + \delta)$ . Desarrollamos diferentes estrategias teóricas para resolver el problema en diferentes límites, amplitudes chicas del flujo ac  $\Phi^{ac}$  y bajas frecuencias  $\omega_0$ . A su vez definimos los coeficientes relevantes para caracterizar el transporte de carga.

Mediante el análisis de estos coeficientes, mostramos que no es posible generar bombeo adiabático en un solo anillo mediante la aplicación de flujos magnéticos puramente alternos, incluso para flujos magnéticos que tengan oscilando muchos armónicos con distintas fases. Este resultado contrasta con el comportamiento de un anillo atravesado por un flujo magnético que depende linealmente del tiempo, en el que si se puede generar una corriente en el régimen adiabático incluso cuando el flujo magnético tiene un solo parámetro relevante. En el caso de dos anillos hemos mostrado que es posible generar bombeo adiabático cuando los dos flujos magnéticos tienen una componente dc y oscilan con una diferencia de fase, lo cual está de acuerdo con resultados de trabajos previos.

En el régimen de respuesta lineal en la diferencia de voltaje aplicada  $V$  entre terminales y bajo condiciones de microreversibilidad, la corriente inducida resulta ser una función par ante la inversión de  $\Phi^{dc}$ . Como mostramos en el Capítulo 4, las relaciones de Onsager-Casimir en respuesta lineal establecen relaciones de simetría ante inversiones del campo magnético para la conductancia eléctrica y térmica. En cambio, para voltajes  $V$  más grandes, fuera de respuesta lineal, no hay razón para esperar tal simetría y por consiguiente se tiene una ruptura de las relaciones de Onsager. La ruptura de simetría ante inversión del campo magnético estático tiene en general consecuencias sobre la eficiencia de máquinas cuánticas desarrolladas con este tipo de sistemas. Es por esto que, luego de estudiar bajo qué condiciones es posible la generación de una corriente en el régimen adiabático, analizamos el comportamiento de las corrientes dc en sistemas con uno y dos anillos como función de las componentes estáticas de los flujos magnéticos, con y sin diferencia de voltaje aplicada entre terminales.

Para el caso de un solo anillo encontramos que la corriente de bombeo no adiabática

no tiene en general una simetría particular como función del flujo dc, indicando que no mantiene, de acuerdo con las relaciones de Onsager-Casimir, las mismas simetrías que la conductancia lineal. Un acoplamiento arbitrariamente pequeño con los reservorios es suficiente para romper las simetrías de Onsager, a excepción de la situación de conexiones perfectamente simétricas ante inversión espacial. Encontramos un comportamiento similar en el caso de dos anillos y bombeo de carga en el régimen adiabático. Para el caso particular de conexiones con los reservorios perfectamente simétricas, la corriente bombeada es una función par del flujo magnético dc cuando es el mismo para los dos anillos, mientras que es una función antisimétrica si solamente se varía el que atraviesa un anillo y se deja al otro fijo.

El hecho de que no se espera que las simetrías de Onsager-Casimir para respuesta lineal en  $V$  sigan siendo válidas en general en el régimen adiabático y no adiabático, puede estar relacionado con que el bombeo en estos sistemas es como mínimo un proceso de segundo orden en las amplitudes de los flujos ac. Sin embargo, en el régimen adiabático la corriente dc es lineal en la frecuencia de bombeo a pesar de ser no lineal en el campo. En este sentido, la situación se asemeja al caso donde solamente se aplica una diferencia de potencial dc y se rompen las simetrías de Onsager más allá de la respuesta lineal en  $V$ . Sin embargo en ese caso, la explicación del motivo por el cual se produce esta ruptura recurre al efecto de las interacciones, mientras que en nuestro caso es un efecto puramente dinámico que tiene lugar incluso en sistemas no interactuantes.

Cuando a su vez se aplica una diferencia de voltaje dc, la corriente continua que resulta de la combinación de los efectos de la parte ac del flujo y del voltaje dc es una función par en el flujo magnético dc solamente en el caso de conexiones simétricas. Para otras configuraciones más generales, no presenta una simetría en particular. La falta de simetría de la corriente dc como función de flujos magnéticos ya ha sido discutida en sistemas bombeados por voltajes de gate. En nuestro caso hemos mostrado que algunos de estos comportamientos también tienen lugar con campos magnéticos oscilantes.

La relación que existe entre las corrientes de carga y energía representa el corazón de la teoría termoeléctrica, la cual permite describir y caracterizar en términos de eficiencias y figuras de mérito el funcionamiento de máquinas térmicas. Es por eso que en la segunda parte de esta tesis, habiendo ya estudiado el comportamiento de las corrientes de carga en la primera parte, nos enfocamos en el estudio de transporte dependiente del tiempo de energía y calor en sistemas con voltajes alternos aplicados. Consideramos el caso de un sistema con nivel resonante forzado por un potencial alterno y acoplado a un continuo fermiónico, ya que tiene los ingredientes necesarios para entender el funcionamiento de sistemas que se comportan como capacitores cuánticos. En esta parte discutimos la generación de calor dinámico debido al acoplamiento con potenciales externos dependientes del tiempo. También analizamos el importante rol que cumple la energía asociada a la región de contacto con el reservorio, que tiene lugar solamente en transporte de energía dinámico.

Recurriendo a la expansión adiabática válida para potenciales que varían lentamente en el tiempo, encontramos que la expresión apropiada del flujo dinámico de calor, en acuerdo con los principios de la termodinámica, requiere que se tome en cuenta el trabajo asociado a las partículas fluyendo a través de la región del contacto con los reservorios. Es importante el hecho de que el flujo de calor sigue instantáneamente una ley de Joule con una resistencia universal.

---

En el caso de sistemas de escala microscópica o nanoscópica, una adecuada generalización de la teoría termoeléctrica convencional para que incluya efectos cuánticos genuinos como el de bombeo adiabático, da lugar a la caracterización de modos operacionales de máquinas cuánticas tales como motores, generadores, máquinas térmicas y bombeadores de calor. Entonces es la última parte de esta tesis, derivamos una teoría termoeléctrica generalizada para analizar la termodinámica de sistemas de escala nano forzados en el tiempo por potenciales ac. Esta teoría incluye no solo las corrientes de bombeo de carga y calor, como ocurre en la teoría usual, sino también el trabajo intercambiado entre el sistema cuántico y las fuentes externas dependientes del tiempo. La presencia de estos potenciales da lugar a efectos de bombeo cuántico y a la presencia de fuerzas no conservativas. Estas fuerzas entran en la teoría a través de un flujo adicional con una afinidad asociada, que hemos identificado. También derivamos las correspondientes relaciones de Onsager generalizadas, definiendo las eficiencias y figuras de mérito apropiadas para motores cuánticos, generadores, máquinas térmicas y bombeadores de calor. Luego, ilustramos estos conceptos para el caso de un dispositivo simple con bombeo cuántico.



# Lista de trabajos publicados

Los estudios realizados en esta tesis dieron origen a las siguientes publicaciones:

- M. F. Ludovico and L. Arrachea, (2012). Conductance oscillations through a mesoscopic ring threaded by a harmonically time-dependent magnetic flux. *Physica B* 407, 3256-3258
- M. F. Ludovico and L. Arrachea, (2013). Pumping charge with ac magnetic fluxes and the dynamical breakdown of Onsager symmetry. *Physical Review B*, 87(11), 115408.
- M. F. Ludovico, J. S. Lim, M. Moskalets, L. Arrachea, and D. Sánchez, (2014). Dynamical energy transfer in ac-driven quantum systems. *Physical Review B Rapid Communication*, 89(16), 161306.
- M. F. Ludovico, J. S. Lim, M. Moskalets, L. Arrachea, and D. Sánchez, (2014, December). Time resolved heat exchange in driven quantum systems. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 568, No. 5, p. 052017). IOP Publishing
- M. F. Ludovico, F. Battista, F. von Oppen, and L. Arrachea, (2015). Adiabatic response and quantum thermoelectrics for ac driven quantum systems. arXiv preprint arXiv:1506.08617.



# Apéndice A

## Matriz de scattering

Trabajos previos [1, 2] probaron la existencia de una relación simple entre los elementos de la matriz de scattering y las componentes de Fourier de las funciones de Green. Para sistemas con potenciales periódicos, se generalizó la fórmula de Fisher-Lee que ya existía para sistemas estacionarios (Ec.(2.106)),

$$S^F(\varepsilon_m, \varepsilon_n) = \delta_{m,n} - i\Gamma\mathcal{G}(m - n, \varepsilon_n), \quad (\text{A.1})$$

donde  $S^F(\varepsilon, \varepsilon_n)$  son los elementos de la matriz de scattering de Floquet, y  $\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\Omega$ . Esta relación conduce a expresiones para las corrientes de carga y energía promediadas temporalmente que son equivalentes en ambos formalismos. El objetivo de este apéndice es mostrar los detalles en la derivación de la Ec. (7.9)

Para empezar, de acuerdo a la Ref. [3] el flujo de energía dependiente del tiempo en el formalismo de la matriz de scattering es:

$$W_E(t) = \sum_{n,q} e^{-in\Omega t} \int d\varepsilon \frac{\varepsilon_q + \varepsilon_{n+q}}{2\hbar} S^{F*}(\varepsilon_q, \varepsilon) S^F(\varepsilon_{n+q}, \varepsilon) [f(\varepsilon) - f(\varepsilon_q)], \quad (\text{7.8})$$

y teniendo en cuenta la relación de la Ec. (A.1), la expresión anterior puede ser re-escrita en término de la función de Green retardada :

$$\begin{aligned} W_E(t) = & - \sum_l e^{-il\omega_0 t} \int \frac{d\varepsilon}{h} \{ i\mathcal{G}^*(-l, \varepsilon) \Gamma(\varepsilon - \frac{l}{2}\hbar\omega_0) [f(\varepsilon - l\hbar\omega_0) - f(\varepsilon)] - \\ & \sum_n (\varepsilon + \frac{l\hbar\omega_0}{2}) [f(\varepsilon - n\hbar\omega_0) - f(\varepsilon)] \mathcal{G}(l + n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \Gamma^2 \mathcal{G}^*(n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Comparando esta última ecuación con (5.6) en el caso de un solo reservorio, se puede ver que

$$\begin{aligned} W_E(t) - W_C(t) = & \sum_l e^{-il\omega_0 t} \int \frac{d\varepsilon}{h} \{ i\mathcal{G}^*(-l, \varepsilon) \Gamma(-\frac{l}{2}\hbar\omega_0) [f(\varepsilon - l\hbar\omega_0) + f(\varepsilon)] - \\ & \sum_n \frac{l\hbar\omega_0}{2} f(\varepsilon) \mathcal{G}(l + n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \Gamma^2 \mathcal{G}^*(n, \varepsilon - n\hbar\omega_0) \} \\ = & - \sum_l e^{-il\omega_0 t} \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{l\hbar\omega_0}{2} f(\varepsilon) \Gamma \{ i\mathcal{G}(l, \varepsilon) + i\mathcal{G}^*(-l, \varepsilon) \} \\ = & \int \frac{d\varepsilon}{h} f(\varepsilon) \hbar\omega_0 \sum_l l \text{Im} \{ e^{-il\omega_0 t} \mathcal{G}(l, \varepsilon) \Gamma \}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

A partir de la Ec. (5.10) podemos ver que esta diferencia está relacionada con la energía almacenada en el contacto,

$$W_E(t) - W_C(t) = \frac{1}{2}W_T(t). \quad (7.9)$$

Este es un resultado sorprendente porque, además de presentar una discrepancia entre los flujos de energía predichos por la teoría de scattering y los del modelo Hamiltoniano, establece que la diferencia está relacionada con la energía que fluye en el contacto a través de  $\frac{1}{2}W_T(t)$ . Este resultado no contradice la correspondencia exacta dentro del límite estacionario, es decir  $\overline{W_E} = \overline{W_C}$ , porque  $W_T$  tiene promedio temporal nulo.

## Bibliografía

- [1] L. Arrachea and M. Moskalets, Phys. Rev. B **74**, 245322 (2006).
- [2] D. S. Fisher and P.A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [3] M. Moskalets, *Scattering matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport*, World Scientific, London (2012).



# Apéndice B

## Flujos de calor

Para frecuencias bajas, la solución a la ecuación de Dyson hasta orden  $\mathcal{O}(\omega_0)$  se puede obtener expandiendo las funciones de Green en potencias de  $\omega_0$ , como se mostró en el Capítulo 5, Sec. 5.4

$$G^R(t, \varepsilon) = G^f(t, \varepsilon) + \frac{i\hbar}{2} \partial_t \partial_\varepsilon G^f(t, \varepsilon), \quad (\text{B.1})$$

donde  $G^f = [\varepsilon - \varepsilon_d(t) + i\Gamma/2]^{-1}$  es la función de Green congelada, y sus derivadas son

$$\begin{aligned} \partial_\varepsilon G^f(t, \varepsilon) &= -G^f(t, \varepsilon)^2 \\ \partial_t G^f(t, \varepsilon) &= -\partial_\varepsilon G^f(t, \varepsilon) \frac{\varepsilon_d(t)}{dt}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

En este apéndice presentamos las expresiones para las dos definiciones del calor

$$\begin{aligned} \dot{Q}(t) &= W_E(t) - \mu J_C(t)/e \\ \dot{\tilde{Q}}(t) &= W_C(t) - \mu J_C(t)/e = \dot{Q}(t) - \frac{1}{2} W_T(t) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

dentro de esta aproximación.

Entonces, solo necesitamos computar el flujo de energía que entra en el reservorio  $W_E$  y la corriente de carga  $J_C$  a bajas frecuencias. Podemos expresar estas cantidades como una suma de términos lineales y cuadráticos en la frecuencia  $\omega_0$

$$\begin{aligned} W_E(t) &= W_E^{(1)}(t) + W_E^{(2)}(t) \\ J_C(t) &= J_C^{(1)}(t) + J_C^{(2)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

El término de orden cero de estas cantidades es nulo y por eso no está presente en las expresiones anteriores. Luego, expandimos  $f(\varepsilon + n\hbar\omega_0) \sim f(\varepsilon) + (\partial f/\partial \varepsilon)n\hbar\omega_0 + (\partial^2 f/\partial \varepsilon^2)(n\hbar\omega_0)^2/2$  y

$$\mathcal{G}(n, \varepsilon) \sim \mathcal{G}^{(0)}(n, \varepsilon) + \hbar\omega_0 \mathcal{G}^{(1)}(n, \varepsilon) \quad (\text{B.5})$$

con

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(0)}(n, \varepsilon) &= \int_0^\tau \frac{dt}{\tau} G^f(t, \varepsilon) e^{in\omega_0 t} \\ \omega_0 \mathcal{G}^{(1)}(n, \varepsilon) &= \int_0^\tau \frac{dt}{\tau} \frac{i}{2} \partial_t \partial_\varepsilon G^f(t, \varepsilon) e^{in\omega_0 t}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

donde  $\tau = 2\pi/\omega_0$ . Sustituyendo estas expresiones en las Ecs. (7.5) y (A.2), y haciendo la transformada de Fourier inversa, podemos escribir las corrientes de carga y energía en término de la función de Green congelada:

$$\begin{aligned} W_E^{(1)}(t) &= - \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \varepsilon \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \\ W_E^{(2)}(t) &= \frac{1}{2} \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left\{ \varepsilon \frac{d}{dt} \left( [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right) - \left( \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

y

$$\begin{aligned} J_C^{(1)}(t) &= -\frac{e}{h} \int d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \\ J_C^{(2)}(t) &= \frac{e}{2h} \int d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \frac{d}{dt} \left( [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

donde hemos definido la densidad de estados congelada (f)  $\rho^f(t, \varepsilon) = -2\text{Im}\{G^f(t, \varepsilon)\} = \Gamma |G^f(t, \varepsilon)|^2$ .

Ahora, uno puede expandir el flujo de calor  $\dot{Q}(t)$  de la misma manera y obtener a partir de la Ec. (B.3)

$$\dot{Q}^{(1)}(t) = \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} (\mu - \varepsilon) \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \quad (\text{7.11})$$

$$\dot{Q}^{(2)}(t) = -\frac{1}{2} \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left\{ (\mu - \varepsilon) \frac{d}{dt} \left( [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right) + \left( \rho^f(t, \varepsilon) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right)^2 \right\}. \quad (\text{7.12})$$

A temperatura  $T = 0$ , ya que  $\partial_\varepsilon f \sim \delta(\varepsilon - \mu)$ , los términos de primer orden en  $\dot{Q}^{(1)}(t)$  y en  $\dot{Q}^{(2)}(t)$  se anulan. Por otra parte, el último término de la componente de segundo orden en el calor es igual a la potencia  $P(t)$  desarrollada por el voltaje externo,

$$P(t) = \left\langle \frac{\partial H_D}{\partial t} \right\rangle = \frac{d\varepsilon_d}{dt} \langle n_d(t) \rangle, \quad (\text{B.9})$$

que en la aproximación de bajas frecuencias es

$$P(t) = -\frac{d\varepsilon_d}{dt} \frac{1}{2} \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left( [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right). \quad (\text{B.10})$$

Para finalizar, con el fin de calcular la otra posible definición del calor  $\dot{Q}(t)$  en esta aproximación, tenemos que evaluar  $W_T$  hasta segundo orden en  $\omega_0$ . Siguiendo el mismo procedimiento desde la Ec. (7.6) encontramos que:

$$\begin{aligned} W_T^{(1)}(t) &= -2 \int \frac{d\varepsilon}{h} f(\varepsilon) \text{Re} \left\{ \frac{\partial G^f(t, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right\} \Gamma \frac{d\varepsilon_d}{dt} \\ &= 2 \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \left[ \rho^f(t, \varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_d(t)) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right] \\ W_T^{(2)}(t) &= 2 \int \frac{d\varepsilon}{h} f(\varepsilon) \frac{d}{dt} \text{Im} \left\{ G^f(t, \varepsilon) \frac{\partial G^f(t, \varepsilon)}{\partial t} \right\} \Gamma \\ &= - \int \frac{d\varepsilon}{h} \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{d}{dt} \left( [\rho^f(t, \varepsilon)]^2 (\varepsilon - \varepsilon_d(t)) \frac{d\varepsilon_d}{dt} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

donde hemos usado la relación entre la parte real y la imaginaria de la función de Green

$$\text{Re}\{G^f(t, \varepsilon)\} = -2\text{Im}\{G^f(t, \varepsilon)\}(\varepsilon - \varepsilon_d(t)) = \rho^f(t, \varepsilon)(\varepsilon - \varepsilon_d(t)). \quad (\text{B.12})$$