

TESIS DEFENDIDA POR

Irene de Lourdes Maldonado Sánchez

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

Dr. Ernesto Cota Araiza

Codirector del Comité

Dra. Gloria Platero Coello

Codirectora del Comité

Dr. Manuel Herrera Zaldívar

Miembro del Comité

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Miembro del Comité

Dr. Fernando Rojas Íñiguez

Miembro del Comité

Dra. Laura Cecilia Viana Castrillón

*Coordinadora del Programa de
Posgrado en Física de Materiales*

Dr. David Hilario Covarrubias Rosales

Director de Estudios de Posgrado

7 de diciembre de 2011

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE
EDUCACIÓN SUPERIOR DE ENSENADA**



**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS
EN FÍSICA DE MATERIALES**

**SISTEMAS NANOECTROMECÁNICOS SOMETIDOS A CAMPOS
ELÉCTRICOS OSCILANTES**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

IRENE DE LOURDES MALDONADO SÁNCHEZ

Ensenada, Baja California, México, diciembre de 2011

RESUMEN de la tesis de **IRENE DE LOURDES MALDONADO SÁNCHEZ**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS en FÍSICA DE MATERIALES. Ensenada, Baja California, diciembre de 2011.

SISTEMAS NANO ELECTROME CÁNICOS SOMETIDOS A CAMPOS ELÉCTRICOS OSCILANTES

Resumen aprobado por:

Dr. Ernesto Cota Araiza
Codirector de Tesis

Dra. Gloria Platero Coello
Codirectora de Tesis

En el presente trabajo se estudian las propiedades de transporte electrónico en los sistemas nanoelectromecánicos conocidos como *transbordadores de triple punto cuántico* (TDQS por sus siglas en inglés). El TDQS consiste en tres puntos cuánticos conectados en serie con la peculiaridad de que el punto central puede oscilar entre los puntos de los extremos, mientras que estos últimos se encuentran unidos rígidamente a los contactos. Aquí se demuestra, mediante un enfoque puramente cuántico, que la corriente electrónica en un TDQS, en presencia de un campo eléctrico oscilante, exhibe resonancias que pueden ser descritas por relaciones de suma simples. Los resultados son contrastados con el espectro del caso sin ac, el cual exhibe resonancias en voltajes que son múltiplos enteros de la energía del oscilador cuántico. Mediante la sintonización de la intensidad y la frecuencia del campo ac, hemos demostrado que es posible manipular la corriente electrónica en el TDQS, y observar el fenómeno conocido como *destrucción coherente del tuneleo* (CDT por sus siglas en inglés). Además, se incluyen cálculos analíticos y numéricos que involucran una transformación unitaria, la cual permite verificar analíticamente bajo qué condiciones ocurre dicho fenómeno. Se utiliza la teoría de Floquet para estudiar la corriente electrónica en términos del espectro de cuasienergías, así como el fenómeno de CDT en un TDQS simétrico. Debido a la simetría espacial y temporal del sistema, existe una invariancia ante una *transformación generalizada de paridad* que nos permite encontrar expresiones analíticas que describen las propiedades de simetría de los estados de Floquet. Con estas expresiones se demuestra que en la vecindad de la región en donde ocurre CDT, existen cruces en el espectro de cuasienergías asociadas a estados de Floquet con paridad opuesta. Los enfoques teóricos utilizados en este trabajo podrían extenderse para estudiar otros aspectos interesantes, como el del acoplamiento de espines con osciladores mecánicos, lo que conduciría a la creación de nanodispositivos superiores basados en propiedades magnéticas.

Palabras Clave: NEMS, Transbordador Cuántico, teoría de Floquet, CDT

ABSTRACT of the thesis presented by **IRENE DE LOURDES MALDONADO SÁNCHEZ**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of DOCTOR IN SCIENCES in MATERIALS SCIENCES. Ensenada, Baja California, December 2011.

NANOELECTROMECHANICAL SYSTEMS UNDER THE ACTION OF OSCILLATING ELECTRIC FIELDS

In this work we study the electronic transport properties in the nanoelectromechanical systems known as *triple dot quantum shuttles* (TDQS). A TDQS consists on three quantum dots connected in series with the particular feature that the central dot can oscillate between the outer dots, while these are rigidly coupled to the contacts. We show, using a full quantum mechanical approach, that the electron current in a TDQS in the presence of an oscillating electric field, exhibits resonances that can be described by simple sum rules. The results are contrasted with the case without ac spectrum, which exhibits phononic resonances located at multiples of the quantum oscillator energy. By tuning the intensity and frequency of the ac field, we have shown that it is possible to manipulate the characteristics of the electron current, to the extent to see in our device the phenomenon known as *coherent destruction of tunneling* (CDT). Also included, are analytical and numerical calculations involving a unitary transformation, which allows us to verify analytically under what conditions this phenomenon occurs. We use Floquet theory to study the electronic current in terms of the quasienergy spectrum, and also the CDT phenomenon in a symmetric TDQS. Due to the spatial and temporal symmetry of the system, there is invariance under a *generalized parity transformation* and, thus, we find analytical expressions that describe the symmetry properties of the Floquet states. Using these expressions, we show that in the vicinity of the region where CDT occurs, there are crossings in the spectrum of quasienergies corresponding to Floquet eigenstates with opposite parity. The theoretical approaches used in this work could be extended to study other interesting features, like the spin coupling with mechanical oscillators, that would lead to the creation of superior nanodevices based on magnetic properties.

Keywords: NEMS, Quantum Shuttle, Floquet theory, CDT.

A Jorge, por todo y por siempre...

A Ma y a Pa, con mucho cariño...

A Carla y Edna, siempre...

Agradecimientos

Agradezco enormemente al Dr. Ernesto Cota Araiza y a la Dra. Gloria Platero Coello por haberme recibido como tesista y haberme guiado hasta el final. Por su tiempo, paciencia, ayuda y apoyo incondicional. Por todas sus enseñanzas, no sólo con respecto a nuevos conocimientos, sino también en cómo hacer investigación científica.

A los doctores Manuel Herrera, Jesús Maytorena y Fernando Rojas, miembros de mi Comité de Tesis, quienes dedicaron su valioso tiempo para revisar mi progreso a lo largo de esta investigación y por revisar minuciosamente este manuscrito y enriquecerlo con sus sugerencias.

A la Dra. Laura Viana por su apoyo incondicional e invaluable para hacer esto posible.

Al Dr. Jorge Villavicencio por toda su ayuda y tiempo. Por sus consejos certeros y su visión objetiva. Por mostrarme con el ejemplo lo interesante y gratificante que puede ser el trabajo de investigación.

Al Dr. José Manuel Jáuregui por su ayuda extraordinaria y por todas sus enseñanzas.

A mi familia por apoyarme siempre.

Al CICESE, al CNyN y al ICMM por brindarme lo necesario para culminar exitosamente estos estudios. Y, finalmente, al CONACyT por el apoyo económico recibido.

Contenido

	Página
Resumen en español	i
Resumen en inglés	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	vi
Lista de Figuras	viii
I. Introducción	1
I.1 Sistemas electromecánicos	1
I.2 Sistemas micro y nanoelectromecánicos	3
I.2.1 Sistemas microelectromecánicos	3
I.2.2 Sistemas nanoelectromecánicos	5
I.3 Nanoestructuras suspendidas	6
I.4 Retos para los NEMS	6
I.5 Hacia el límite cuántico	8
II. Antecedentes: dispositivos de transbordador	9
III. El transbordador de triple punto cuántico	15
III.1 Acoplamiento con los contactos	19
III.2 Ecuaciones maestras en la base compuesta del oscilador y de los puntos cuánticos.	20
III.2.1 Cálculo del conmutador de H con ρ	23
III.2.2 Cálculo del término disipativo $\dot{\rho}_d$	25
IV. El transbordador de triple punto cuántico bajo la acción de un campo eléctrico oscilante	28
IV.1 El modelo de TDQS en presencia de un potencial ac	28
IV.2 La transformación unitaria: tuneo asistido por fotones	30
V. Teoría de Floquet para transbordadores cuánticos	34
V.1 Teoría de Floquet	35
V.2 Cálculo del espectro de cuasienergías	36
V.3 Teoría de Floquet para sistemas simétricos	37

Contenido (continuación)

	Página
VI. Resultados y discusiones	39
VI.1 Transporte electrónico en un transbordador de triple punto cuántico (sin campo ac)	40
VI.1.1 La corriente electrónica	42
VI.1.2 Eigenvalores y eigenestados	49
VI.1.3 El efecto del acoplamiento con los contactos y el entorno . . .	53
VI.2 Transbordador cuántico en presencia de un campo eléctrico oscilante	56
VI.2.1 La corriente electrónica en presencia de un voltaje ac	57
VI.2.2 Destrucción coherente del tuneo en transbordadores cuánticos	65
VI.3 Análisis de Floquet en TDQS en presencia de un campo ac	67
VI.3.1 Análisis de Floquet para el caso asimétrico	69
VI.3.2 Análisis de Floquet para el caso simétrico	73
VII. Conclusiones y trabajo futuro	81
A. Elementos de matriz de los tuneos	91
B. Ecuación Maestra Reducida	93
C. Espectro de energías para el transbordador de triple punto cuántico	96
D. Resumen de productividad	98

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Espectrómetro de masas nanomecánico.	2
2	Micrografía óptica de una porción de un arreglo de microespejos.	4
3	Cómo fabricar MEMS y NEMS.	7
4	Micrografías de electrones de NEMS.	8
5	Bloqueo de Coulomb.	10
6	Transbordador de triple punto cuántico	16
7	Transbordador de triple punto cuántico con campo ac	29
8	Resonancias de la corriente en un TDQS en el régimen de acoplamiento débil	43
9	Esquema de los niveles de energía en un TDQS	44
10	Efecto sobre la corriente electrónica en un TDQS al variar el parámetro relacionado con el acoplamiento entre los puntos cuánticos	47
11	Curvas de nivel de la corriente electrónica en un TDQS como función del voltaje de compuerta para distintos valores del tuneleo entre los puntos cuánticos	48
12	Eigenenergías para un TDQS con puntos cuánticos desacoplados como función del voltaje de compuerta	51
13	Eigenenergías para un TDQS como función del voltaje de compuerta	52
14	Efectos sobre la corriente electrónica en un TDQS al cambiar el acoplamiento con los contactos	54
15	Efectos sobre la corriente electrónica en un TDQS al cambiar el acoplamiento con el entorno	55
16	Efectos del voltaje ac en la corriente electrónica de un TDQS	58
17	Corriente para el TDQS sometido a un campo ac y probabilidades de ocupación del punto cuántico derecho	60
18	Representación esquemática de los niveles de energía de un TDQS sujeto a un voltaje ac: caso $\varepsilon_b = 0$	62

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
19	Representación esquemática de los niveles de energía de un TDQS sujeto a un voltaje ac: caso $\varepsilon_b = 0.2$	63
20	Representación esquemática de los niveles de energía de un TDQS sujeto a un voltaje ac: caso $\varepsilon_b = 2.0$	64
21	Corriente para el TDQS sometido a un campo ac en la condición de CDT	67
22	CDT para la corriente eléctrica de un TDQS asimétrico.	69
23	Sintonización de los parámetros ac para lograr la condición de CDT en un TDQS	72
24	Cuasienergías y la condición de CDT para un transbordador cuántico. .	74
25	Cuasienergías y la condición de CDT para el caso simétrico en un transbordador con puntos cuánticos débilmente acoplados.	75
26	CDT para la corriente eléctrica de un TDQS simétrico.	76
27	Cuasienergías como función del parámetro ξ para un TDQS simétrico. .	77
28	Cuasienergías y eigenvectores en la vecindad del cruce en la región A .	79
29	Paridades en la vecindad del cruce en la región A.	80

Capítulo I

Introducción

I.1 Sistemas electromecánicos

Uno de los *dispositivos electromecánicos* reportados más tempranamente fue construido en 1785 por Charles-Augustin de Coulomb para medir la carga eléctrica. Su balanza de torsión consistió en dos esferas metálicas -una de las cuales está fija y la otra está unida a una varilla libre -que actuaban como placas capacitores, convirtiendo una diferencia en la carga entre ellas en una fuerza atractiva. El dispositivo ilustra los dos componentes principales de la mayoría de los sistemas electromecánicos, independientemente de su escala: un *elemento mecánico* y un *transductor*.

El *elemento mecánico* puede deformarse o vibrar como respuesta a una fuerza aplicada (ver ejemplo en la figura 1). Se pueden utilizar muchos tipos de elementos mecánicos para medir fuerzas estáticas o variables en el tiempo. Estos incluyen las balanzas de torsión (utilizada por Coulomb), el *cantilever* (ahora omnipresente en la microscopía de barrido) y la barra sujeta en dos puntos, la cual está fija en ambos extremos. En la búsqueda de ultra alta sensibilidad, se han utilizado dispositivos aún más intrincados, tales como las estructuras resonantes compuestas que poseen modos de vibración transversales, de torsión o longitudinales complicados. Estos modos complicados pueden ser utilizados para minimizar las pérdidas vibracionales.

Los *transductores* convierten la energía mecánica en señales eléctricas u ópticas y viceversa. Sin embargo, en algunos casos el transductor de entrada simplemente

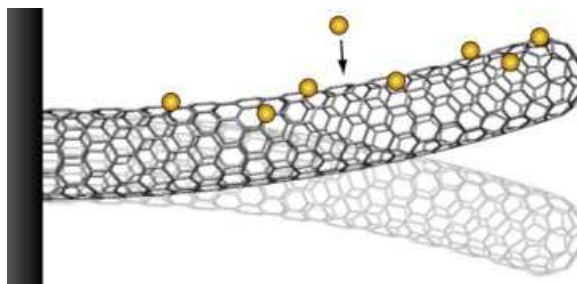


Figura 1. Espectrómetro de masas nanomecánico construido con un nanotubo de carbón. El nanotubo mide 2 nm de diámetro y 200 nm de largo. El extremo puede vibrar (como lo haría un trampolín) y permite calcular la masa de átomos de oro. Un estudio reveló que la masa medida con este artefacto es del orden de 0.29 zeptogramos. En este dispositivo es posible medir el cambio de la frecuencia del cantilever al agregar la masa, lo que nos permite calcular dicha cantidad de manera indirecta.

mantiene al elemento mecánico vibrando ininterrumpidamente mientras que sus características son monitoreadas conforme el sistema es perturbado. En este caso, el resultado de tales perturbaciones, más que la señal de entrada misma, son precisamente las señales que deseamos medir. Ellas pueden incluir variaciones de la presión que afectan el amortiguamiento mecánico del dispositivo, la presencia de químicos adsorbidos que alteran la masa del resonador o cambios en la temperatura que pueden modificar la elasticidad. En los últimos dos casos, el efecto neto es el de cambiar la frecuencia de vibración.

En general, la salida de un dispositivo electromecánico es el movimiento del elemento mecánico. Hay dos tipos principales de respuesta: el elemento puede simplemente deformarse bajo la fuerza aplicada o su amplitud de oscilación puede cambiar. Detectar cualquiera de las respuestas requiere de un transductor de salida o lectura, el cual es frecuentemente distinto al de entrada. En el caso de Coulomb, el transductor de salida era “óptico” -él simplemente usaba sus ojos para registrar el movimiento. Los dispositivos mecánicos de hoy en día contienen transductores que están basados en una

cantidad de mecanismos físicos que involucran efectos piezoeléctricos, nanomagnetos y tuneo de electrones, así como también en la electrostática y la óptica.

I.2 Sistemas micro y nanoelectromecánicos

I.2.1 Sistemas microelectromecánicos

Los *sistemas microelectromecánicos* (MEMS, por sus siglas en inglés) son la tecnología de lo pequeño en donde la electrónica y la mecánica se unen para dar lugar a las llamadas micro-máquinas. Los MEMS se han estudiado por décadas (Newell (1968), Peterson (1978)), con un interés aumentado recientemente por sus crecientes aplicaciones comerciales. Entre las más comunes se pueden encontrar:

- Impresoras de chorro de tinta, las cuales utilizan eyección de burbuja para depositar tinta en el papel (Bassous *et al.* (1977)).
- Acelerómetros en automóviles para un gran número de propósitos incluyendo despliegue de bolsas de aire en colisiones (Roylanceans y Angell (1979)).
- Giroscopios MEMS utilizados también en automóviles modernos y en otras aplicaciones.
- Medidores de presión que inclusive pueden ser utilizados para medir la presión sanguínea con dispositivos desechables
- Pantallas que despliegan a través de varios cientos de miles de microespejos metálicos utilizados para modular rayos de luz (van Kessel *et al.* (1998)).
- Tecnología de interruptores ópticos que, por medio de microespejos, controlan la dirección hacia la que se transmite la información óptica. La figura 2 muestra

un arreglo de espejos movibles de Lucent Technologies, donde el diámetro de los espejos es de ~ 0.4 mm.

- El controlador de detección de movimiento en el sistema de video juego Nintendo Wii representa una de las más recientes aplicaciones populares de la tecnología MEMS.

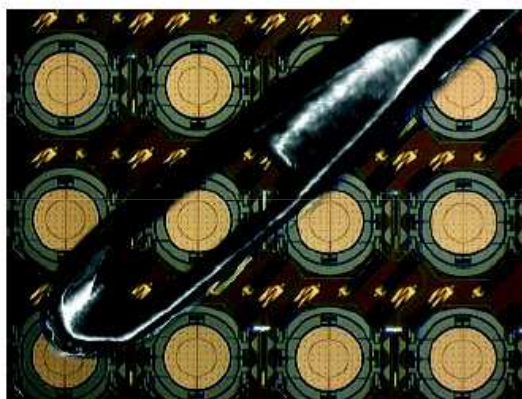


Figura 2. Micrografía óptica de una porción de un arreglo de microespejos (Craighead (2000)).

Un gran número de los dispositivos MEMS de uso práctico se producen con la tecnología de fabricación basada en silicio debido a lo avanzados que se encuentran estos métodos. Las dimensiones típicas de los dispositivos MEMS varían desde un milímetro hasta un micrómetro. Aunque la importancia de los MEMS no radica solo en el tamaño de los dispositivos que se pueden fabricar sino también en la posibilidad de aprovechar la tecnología de fabricación de circuitos electrónicos y así lograr grandes cantidades de dispositivos mecánicos simples en una forma integrada.

I.2.2 Sistemas nanoelectromecánicos

Los *sistemas nanoelectromecánicos* (NEMS, por sus siglas en inglés), están caracterizados por sus dimensiones muy pequeñas. Las dimensiones críticas del dispositivo pueden ser de unos cientos a unos cuantos nanómetros. La operación del dispositivo puede estar dominada por nuevas propiedades físicas, resultantes de las dimensiones pequeñas y se pueden requerir nuevos métodos de fabricación. Las tecnologías de fabricación en microelectrónica están dirigiéndose inevitablemente hacia la fabricación de transistores más pequeños, creados con una mayor densidad en los chips de circuitos integrados. La miniaturización ha conducido a tamaños de los chips hasta al régimen de los 33 nm (Green *et al.* (2007)). Los estudios a nanoescala frecuentemente involucran un rango más amplio de materiales y procesos de fabricación de mayor resolución espacial que los procesos de la microelectrónica de silicio. Pueden explotarse procesos de fabricación similares para miniaturizar aún más los sistemas electromecánicos para llevarnos al régimen de NEMS. La nueva clase de dispositivos NEMS puede proveer una revolución de aplicaciones, tales como detectores, diagnósticos médicos, pantallas y almacenamiento de datos.

Existen dos enfoques científicos de fabricación de NEMS. El enfoque *top-down* que consiste en utilizar un conjunto de herramientas para construir otro conjunto de herramientas de menor tamaño. Por ejemplo, un dispositivo de tamaño milimétrico que pueda construir dispositivos de tamaño micrométrico, que a su vez pueda construir dispositivos de tamaño nanométrico. El otro enfoque es el *bottom-up*. Aquí se empieza ensamblando átomos individuales o moléculas hasta que se obtiene un dispositivo más grande con la funcionalidad deseada.

I.3 Nanoestructuras suspendidas

Una clase de dispositivos NEMS consiste en objetos mecánicos suspendidos con dimensiones en el rango de decenas de nanómetros. Estos dispositivos pueden fabricarse con una combinación de litografía electrónica (*electron beam lithography*) y *etching* para remover el material por debajo del objeto fabricado litográficamente (ver figura 3). El crear un patrón bidimensional en una película delgada y cortarla por debajo para crear una estructura libre se ha llegado a conocer como nanofabricación de superficie (*surface nanomachining*). En la mayoría de los casos, los dispositivos nanomecánicos permanecen unidos a un soporte mayor unido al sustrato, pero el mismo método puede utilizarse para fabricar estructuras completamente sueltas. En la figura 4 se muestran micrografías de barrido de electrones de varias estructuras realizadas con este método.

Los dispositivos nanomecánicos prometen revolucionar las mediciones de desplazamientos extremadamente pequeños y de fuerzas extremadamente débiles, particularmente a escala molecular. De hecho, con técnicas de nanoconstrucción de superficie y de bulto, los NEMS pueden ser ahora contruidos con masas cercanas a unos cuantos attogramos (10^{-18} g) y con secciones transversales de cerca de 10 nm.

I.4 Retos para los NEMS

Los procesos tales como la litografía por un haz de electrones y la nanoconstrucción ahora permiten fabricar nanoestructuras semiconductoras menores a 10 nm. Parecería entonces que ya existe la tecnología para construir NEMS. Entonces, ¿qué está deteniendo sus aplicaciones? Hay tres principales retos que deben resolverse antes de que el potencial completo de los NEMS sea desarrollado: la interpretación de las señales de la

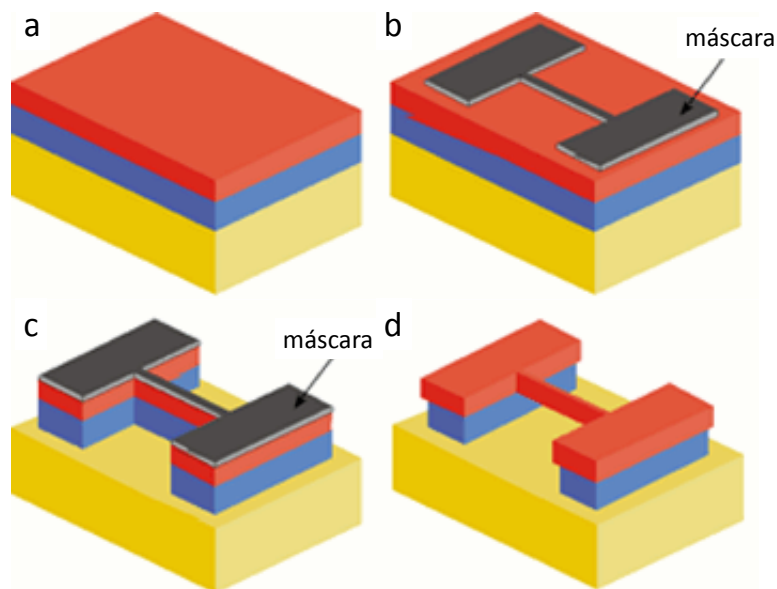


Figura 3. Las técnicas para diseñar estructuras completamente suspendidas en tres dimensiones se aplican al silicio de bulto, silicio epitaxial o heteroestructuras de silicio-aislante, así como a sistemas basados en arseniuro de galio y arseniuro de indio. (a) En su forma más simple, el procedimiento comienza con una heteroestructura que contiene capas estructurales (primera capa) y de sacrificio (capa intermedia) en un sustrato. (b) Se marca el diseño la mascarilla en la superficie del sustrato con una combinación de litografía óptica y de rayos de electrones, seguido por un proceso de colocación de una capa delgada. La mascarilla resultante protege al material debajo de ella en la siguiente etapa. (c) El material desprotegido alrededor de la mascarilla se elimina utilizando un proceso de plasma. (d) Finalmente, un proceso de eliminado químico selectivo remueve la capa de sacrificio de zonas específicas para crear nanoestructuras suspendidas que están térmica y mecánicamente aisladas (Craighead (2000)).

nanoescala al mundo macroscópico, i.e., *entender y controlar la dinámica de los sistemas mesoscópicos*; y desarrollar métodos reproducibles y rutinarios para la nanofabricación.

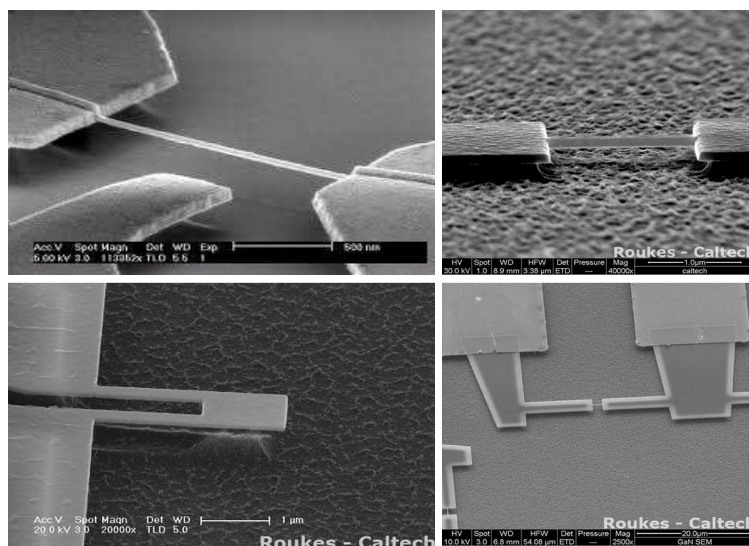


Figura 4. Micrografías de electrones de NEMS fabricados con carburo de silicio.

I.5 Hacia el límite cuántico

Uno de los aspectos más intrigantes de los dispositivos nanomecánicos actuales es que ya están en la frontera del límite cuántico. Una vez que se haya pasado al campo de la mecánica cuántica, la óptica y la física del estado sólido se vuelven imprecisas. Muchos de los principios que gobiernan la manipulación de la luz al nivel de fotones individuales se aplicarán para el estudio de las propiedades mecánicas y térmicas de los sistemas a nanoescala.

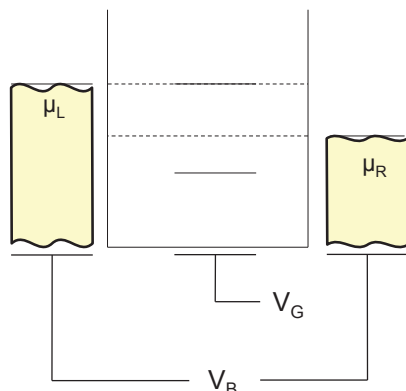
Capítulo II

Antecedentes: dispositivos de transbordador

El gran auge en el estudio de los dispositivos NEMS está revelando nuevas perspectivas en la fabricación de nanoestructuras en donde el transporte de carga es asistido por los grados de libertad mecánicos del dispositivo mismo. Este es el caso, por ejemplo, cuando la nanomecánica se ha combinado con el tuneleo de un solo electrón¹. Algunos experimentos importantes en esta área son el uso del transistor de un solo electrón (SET por sus siglas en inglés) como un medidor de desplazamiento (Knobel y Cleland (2003)) o el transporte cuántico a través de nanotubos suspendidos (LeRoy *et al.* (2004), Jarillo-Herrero *et al.* (2004)), moléculas oscilantes (Park *et al.* (2000), Smit *et al.* (2002), Kubatkin *et al.* (2003)) e islas (Erbe *et al.* (2001)). Por el lado teórico, muchos trabajos (Gorelik *et al.* (1998), Novotný *et al.* (2003), Fedorets *et al.* (2004), Armour *et al.* (2004), Novotný *et al.* (2004)) han destacado varios aspectos del papel del *bloqueo de Coulomb* (ver figura 5) en los NEMS.

Gorelik *et al.* (1998), han propuesto un prototipo de SET asistido mecánicamente al que se ha llamado *transbordador de un solo electrón (single electron shuttle)*. El transbordador de un solo electrón es un dispositivo móvil de un solo electrón, que trabaja en el régimen de *bloqueo de Coulomb* y que puede exhibir transporte regular de carga (*régimen de transborde*) en donde un electrón en cada ciclo de oscilación mecánica es transportado de la fuente al sumidero. El régimen de transborde puede inducirse

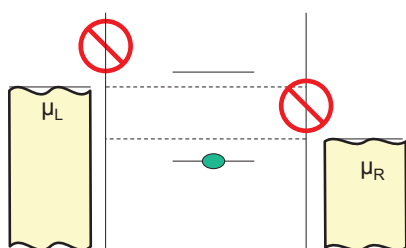
¹Sistemas en los cuales no hay más de un electrón a la vez.



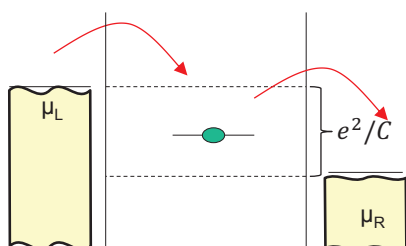
Por medio de un voltaje entre la fuente y el sumidero, V_B , se crea una ventana de conducción.

A través del voltaje de compuerta, V_G , se pueden subir o bajar los niveles de energía del punto cuántico.

Como el punto cuántico es esencialmente un capacitor, agregar un electrón extra tiene un costo de energía de $e^2/2C$. Similarmente, para que un electrón salga del punto, se tiene que perder esa misma cantidad de energía.



Si la caída de voltaje en el voltaje de bias es menor que el total de e^2/C , entonces no podrá establecerse una corriente eléctrica y tendremos el fenómeno de Bloqueo de Coulomb.



Sin embargo, si es exactamente igual a e^2/C entonces tendremos las condiciones correctas para que los electrones entren y salgan del punto cuántico sin pérdida de energía y así se establezca una corriente eléctrica.

Figura 5. Representación pictórica del Bloqueo de Coulomb.

variando un parámetro de control, tal como el voltaje fuente-sumidero aplicado o el amortiguamiento mecánico.

El arquetipo del dispositivo de transbordador consiste en un punto cuántico móvil suspendido entre contactos de fuente y sumidero. Uno puede imaginarse al punto adherido a la punta de un *cantilever* o conectado a los contactos por unas ligaduras suaves, o embebido en una matriz elástica. En el modelo, la nanopartícula está confinada a un *potencial armónico*. En el caso en que el punto cuántico se encuentre oscilando entre los contactos, se le llama *transbordador cuántico simple* (*single quantum shuttle*). En cambio, existe una configuración diferente, en donde el punto cuántico oscila entre otros dos puntos cuánticos fijos, los cuales a su vez están conectados a los contactos. A esta configuración se le llama *transbordador cuántico triple* (*triple quantum shuttle*). Los dispositivos de transbordador tienen una dimensión típica de 0.1 a 10 micras y vibran a frecuencias de unos cuantos MHz hasta más de 100 MHz (Erbe *et al.* (2001)).

Existen a la fecha una gran variedad de trabajos, tanto teóricos como experimentales, referentes al transbordador cuántico. En el contexto experimental, Park *et al.* (2000), reportan oscilaciones nanomecánicas en un transistor de C_{60} . En su trabajo reportan la fabricación de un transistor de una sola molécula basado en una molécula de C_{60} conectada a electrodos de oro. Ellos proveen evidencia de un acoplamiento entre el movimiento del centro de masa de la molécula de C_{60} y el transporte de un electrón a la vez. La curva I-V medida en esos experimentos se puede interpretar en términos de transborde (Fedorets *et al.* (2002)), pero también se han propuesto explicaciones alternativas (Boese y Schoeller (2001), McCarthy *et al.* (2003), Braig y Flensberg (2003)). En otro experimento (Scheible *et al.* (2002)), colocan una isla metálica en la punta de un *cantilever* que oscila entre dos contactos metálicos. Este sistema, además de poderse utilizar como un transbordador cuántico, puede utilizarse como un detector de

desplazamientos altamente sensible.

En el contexto teórico hay dos enfoques distintos de resolución del problema de transbordador cuántico. El *enfoque semiclásico*, propuesto por primera vez por Gorelik *et al.* (1998), en donde se resuelve el problema suponiendo que el potencial armónico puede ser tratado semiclásicamente y que el tuneo puede ser descrito por la ecuación maestra de Pauli². En este estudio se encuentra que existe un régimen de transporte en donde se “sintonizan” el movimiento del punto cuántico con el transporte de un electrón a la vez. A esta situación se le llama el *régimen de transbordador (shuttle regime)*. Trabajos posteriores han estudiado aspectos tales como el transporte de electrones dependiente del espín (Gorelik *et al.* (2005)), donde se muestra que la corriente en un transbordador cuántico puede ser extremadamente sensible a un campo magnético externo.

En el *enfoque cuántico*, se han extendido las ideas originales al régimen cuántico (el movimiento de la parte móvil está también cuantizado) y se ha demostrado que el régimen de transbordador ocurre también en este límite (Armour y MacKinnon (2002), Novotný *et al.* (2003), Fedorets *et al.* (2004)). Existen dos principales trabajos realizados en el enfoque cuántico: el trabajo de Armour y MacKinnon (2002), donde se estudia un transbordador cuántico triple utilizando la formulación de la matriz de densidad. En este trabajo se encuentran resonancias para la corriente del dispositivo. El otro trabajo, realizado por Donarini (2004), utiliza la ecuación maestra generalizada (GME por sus siglas en inglés) [Gurvitz y Prager (1996)] y resuelve el problema tanto del transbordador cuántico simple como del triple. En su formulación, Donarini se encuentra con un problema computacional complejo y tiene que utilizar técnicas avanzadas de resolución de sistemas acoplados dependientes del tiempo.

²Ecuación que describe semiclásicamente la evolución de las poblaciones en un sistema cuántico.

En ambos trabajos teóricos se resuelve el problema del transbordador cuántico suponiendo un hamiltoniano de oscilador armónico acoplado a contactos eléctricos. Debido a la oscilación del punto cuántico, ya sea entre los contactos para el transbordador simple o entre los otros dos puntos para el transbordador triple, se hace la suposición de que las razones de transición hacia el punto dependen de la posición en forma exponencial decayente (Erbe *et al.* (2001)). Por último, también se hace la suposición de que el sistema se encuentra en contacto con un baño disipativo de fonones, cuya finalidad es la de disipar la energía que le imprime el oscilador armónico al sistema.

En este contexto, un problema de gran interés actual es el estudio de los efectos de un potencial eléctrico ac en un transbordador cuántico. Un antecedente importante es el del trabajo de Pistolesi y Fazio (2005), en donde resuelven este problema utilizando un enfoque semiclásico. En su trabajo encuentran que la corriente depende fuertemente de la frecuencia del potencial ac. El estudio del efecto de un potencial ac es importante en la corriente de espín (Wong *et al.* (2008)) de un dispositivo ya que puede existir el bombeo y el filtrado de espín (Cota *et al.* (2003), Cota *et al.* (2005)). Más aún, los efectos de un campo externo ac en arreglos de puntos cuánticos, han sido extensamente estudiados, tanto teórica (Platero y Aguado (2004)) como experimentalmente (Kierig *et al.* (2008)). Usando el formalismo de Floquet (Grossmann *et al.* (1991)) se encuentra el fenómeno llamada *destrucción coherente de tunelaje* (CDT por sus siglas en inglés), que consiste en que para valores particulares de la intensidad y la frecuencia del campo, el tunelaje entre los puntos cuánticos puede quedar suprimido y los electrones se localizan. En nuestro trabajo, se estudia por primera vez el fenómeno de CDT en un sistema de triple punto cuántico oscilante.

Con base en lo expuesto anteriormente, uno de nuestros principales objetivos es estudiar las características de la corriente electrónica en un *transbordador de triple*

punto cuántico en presencia de un campo eléctrico ac, con base en una descripción completamente cuántica del grado de libertad mecánico.

Una vez expuestos los antecedentes y la idea general del contexto en el que se inscribe la investigación realizada en este trabajo de tesis, a continuación se presenta la distribución del material por capítulos. En el capítulo III se desarrolla el formalismo para estudiar el problema de la dinámica de la corriente electrónica en un transbordador de triple punto cuántico en ausencia de un campo eléctrico ac. En el capítulo IV se presenta una de las aportaciones más importantes de nuestro trabajo: el formalismo para estudiar las propiedades del transporte electrónico en un TDQS sometido a un *campo eléctrico ac*, utilizando un enfoque completamente cuántico para describir el grado de libertad mecánico inducido por el oscilador. En el capítulo V se presenta el formalismo de Floquet para estudiar las propiedades de la corriente electrónica en un TDQS en términos del espectro de cuasienergías. En el capítulo VI se aplican los formalismo desarrollados en los capítulos III, IV y V, para explorar la dinámica del tuneo electrónico mediante el análisis de la corriente en transbordadores cuánticos bajo el efecto de un voltaje ac, o en ausencia de éste. También se complementa el estudio de la dinámica electrónica mediante el estudio del espectro de energías y cuasienergías de los sistemas involucrados. Finalmente, en el capítulo VII se presentan las conclusiones, las aportaciones y algunas opciones de trabajo a futuro que permiten darle continuidad a este estudio.

Capítulo III

El transbordador de triple punto cuántico

En la presente capítulo presentaremos el marco teórico con base en el cual estudiaremos el transporte electrónico en un transbordador de triple punto cuántico (TDQS por sus siglas en inglés) en ausencia de un campo eléctrico. El TDQS se ha estudiado en forma completamente cuántica por Armour y MacKinnon (2002) y Donarini (2004). En este capítulo presentamos una derivación alternativa que nos permite reproducir los resultados de ambos trabajos y nos sirve como punto de partida para resolver el problema del TDQS bajo la influencia de un campo eléctrico oscilante. Este último estudio será presentado en el siguiente capítulo.

Consideremos un TDQS (Ver figura 6) introducido por primera vez por Armour y MacKinnon (2002), el cual consiste en un arreglo de tres puntos cuánticos en el régimen de bloqueo de Coulomb. El punto móvil central está flanqueado por los dos puntos estáticos de los lados ubicados en las posiciones $\pm x_0$. En nuestro modelo modificamos el enfoque original de Armour y MacKinnon (2002) en el sentido de que ahora el punto central se mueve en un potencial estrictamente armónico¹, como el utilizado en el trabajo de Flindt *et al.* (2004).

La oscilación del punto central afecta a las razones de tuneo entre los puntos, las cuales son ahora dependientes de la posición. En el régimen de bloqueo de Coulomb,

¹En el modelo original de Armour y MacKinnon (2002) se considera un potencial armónico truncado en $\pm x_0$. Aún cuando el truncamiento del potencial está físicamente justificado, conduce a complicaciones en el análisis numérico del problema. Hemos verificado *a posteriori* que dicho truncamiento no tiene un impacto significativo en nuestros resultados.

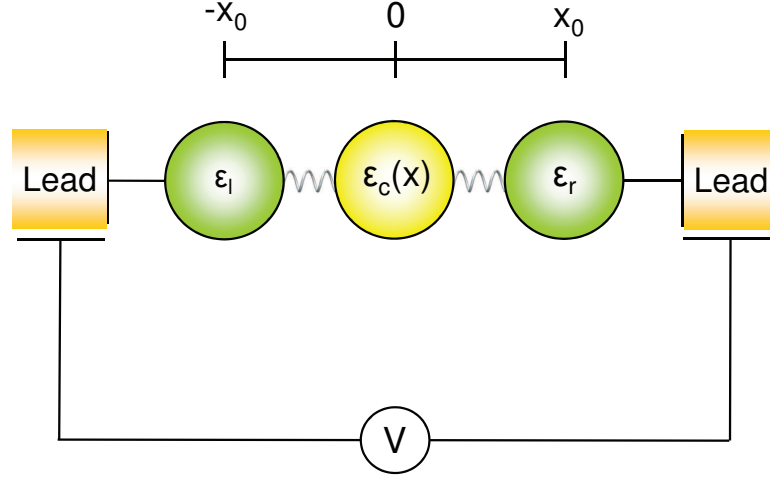


Figura 6. Transbordador de triple punto cuántico donde el punto cuántico central oscilante, con energía $\varepsilon_c(\hat{x})$, está flanqueado por dos puntos cuánticos estáticos en posiciones fijas, $\pm x_0$, y están rígidamente acoplados a los contactos (leads). El voltaje a través del sistema está dado por $eV = \varepsilon_b \equiv \varepsilon_l - \varepsilon_r$ (con $e = 1$), donde ε_l y ε_r corresponden a las energías del punto cuántico a la izquierda y derecha, respectivamente.

la energía para agregar más de un electrón al transbordador se supone que es suficientemente grande que solo un electrón de transporte puede ocupar la cadena de los tres puntos a cualquier tiempo. Por lo tanto, los grados de libertad electrónicos del sistema aislado pueden ser representados completamente por el estado en el que ninguno de los puntos están ocupados, $|0\rangle$, y los tres estados localizados asociados con los puntos izquierdo, central y derecho $|l\rangle$, $|c\rangle$ y $|r\rangle$, respectivamente. Este sistema se modela con un hamiltoniano de amarre fuerte de la forma

$$H_{TDQS} = H_0 + H_{osc} + H_{tun}, \quad (1)$$

donde

$$\begin{aligned}
H_0 &= \varepsilon_l |l\rangle \langle l| + \varepsilon_c(\hat{x}) |c\rangle \langle c| + \varepsilon_r |r\rangle \langle r|, \\
H_{osc} &= \hbar\omega d^\dagger d, \\
H_{tun} &= T_l(\hat{x}) [|l\rangle \langle c| + |c\rangle \langle l|] + T_r(\hat{x}) [|c\rangle \langle r| + |r\rangle \langle c|].
\end{aligned} \tag{2}$$

Equivalentemente, podemos escribir también al hamiltoniano en términos de operadores de creación y aniquilación,

$$\begin{aligned}
H_0 &= \varepsilon_l c_l^\dagger c_l + \varepsilon_r c_r^\dagger c_r + \varepsilon_c(\hat{x}) c_c^\dagger c_c, \\
H_{osc} &= \hbar\omega d^\dagger d,
\end{aligned} \tag{3}$$

$$H_{tun} = T_l(\hat{x}) [c_c^\dagger c_l + c_l^\dagger c_c] + T_r(\hat{x}) [c_c^\dagger c_r + c_r^\dagger c_c], \tag{4}$$

donde $c_{l,r,c}^\dagger$ (c_{lrc}) son operadores de creación (destrucción). Similarmente, $d^\dagger$ (d) son operadores de creación y destrucción para fonones. En la ecuación anterior, (i) H_0 representa al hamiltoniano de los tres puntos cuánticos. Los puntos cuánticos a la izquierda (l) y derecha (r) se encuentran fijos en las posiciones $-x_0$ y x_0 , respectivamente, con una energía ε_l y ε_r (ver la figura 6). El punto central (c) se mueve (oscila) debido a un potencial armónico, y su posición depende del operador de posición $\hat{x}$. Es por esto que la energía del punto central también depende del operador $\hat{x}$, *i.e.* $\varepsilon_c \equiv \varepsilon_c(\hat{x})$. La forma explícita de esta dependencia será derivada más adelante; (ii) H_{osc} es la energía asociada a la oscilación del punto cuántico central con frecuencia ω ; (iii) finalmente, H_{tun} representa el tuneo entre los tres puntos cuánticos y depende de la posición y será derivado en la siguiente sección. Como podemos ver en H_0 , tenemos tres estados localizados ε_l , ε_c y ε_r , asociados respectivamente con los puntos izquierdo, central y derecho, $|l\rangle$, $|c\rangle$ y $|r\rangle$. El voltaje a través del sistema, V , se define como la diferencia de energías de los puntos cuánticos a la izquierda y la derecha *i.e.* $eV = \varepsilon_b \equiv \varepsilon_l - \varepsilon_r$

(con $e = 1$). La energía central ε_c puede ser derivada suponiendo que, debido al voltaje a través del sistema, ε_b , esta energía se encuentra entre los valores de ε_l y ε_r , y que, en medio de éstas, existe un corrimiento Stark proporcional a la posición. De esta forma

$$\varepsilon_c(\hat{x}) = \varepsilon_l - \frac{\varepsilon_b}{2x_0}(\hat{x} + x_0). \quad (5)$$

En el modelo de transbordador (Gorelik *et al.* (1998); Armour y MacKinnon (2002)), el punto cuántico central oscilante se acopla a los puntos cuánticos a la izquierda y a la derecha vía una barrera de tunelaje. El tunelaje a través de estas barreras se modela mediante una función exponencial que depende de la posición $\hat{x}$ del punto cuántico central *i.e.* si el elemento transbordador se encuentra más cerca de un punto cuántico que de otro, el tuneo dependerá exponencialmente de este desplazamiento en la posición $\hat{x}$. Por lo tanto, las amplitudes de tuneo T_r y T_l están dadas por,

$$\begin{aligned} T_l &= -V_0 \exp^{-\alpha(x_0 + \hat{x})}; \\ T_r &= -V_0 \exp^{-\alpha(x_0 - \hat{x})}, \end{aligned} \quad (6)$$

donde las cantidades positivas V_0 y α , son la amplitud de tuneo y la inversa de la longitud de tuneo, respectivamente. El operador de posición $\hat{x}$ mide el desplazamiento del modo vibracional y está dado por $\hat{x} = \Delta x_{zp}(\hat{d}^\dagger + \hat{d})$, donde $\Delta x_{zp} = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ es la incertidumbre del punto cero de la posición del oscilador.

El comportamiento del sistema transbordador es investigado mediante métodos numéricos. El hamiltoniano y el operador de densidad son representados por matrices en base compuesta del oscilador y de los puntos cuánticos, como se describe en la siguiente sección, y la evolución temporal del sistema puede obtenerse numéricamente para cualquier valor inicial de la matriz de densidad.

III.1 Acoplamiento con los contactos

Las propiedades de transporte del sistema de transbordador acoplado a los contactos se obtienen integrando una ecuación de movimiento para la matriz de densidad apropiada para un sistema cuántico abierto. Además de la dinámica interna del transbordador, existen dos efectos que debemos tomar en cuenta: deben incorporarse los acoplamientos entre los estados electrónicos en los puntos externos y los contactos, y el acoplamiento entre el oscilador y su entorno.

Los acoplamientos de los puntos externos y el oscilador son tomados en cuenta en la dinámica a través de términos adicionales en la ecuación de movimiento para la matriz de densidad reducida del transbordador, un método que es bien conocido en el campo de la óptica cuántica y que ha sido aplicado a problemas del transporte de electrones en nanoestructuras (Stoof y Nazarov (1996); Gurvitz *et al.* (1996); Gurvitz y Prager (1996)). Los electrones en los contactos se suponen como completamente incoherentes, lo que significa que todos los elementos fuera de la diagonal de la matriz de densidad entre el estado $|0\rangle$ y los otros estados electrónicos pueden ser cero (notar, sin embargo, que los elementos diagonales en la matriz de densidad para $|0\rangle$ tienen elementos de matriz diagonales y no diagonales en el espacio de los estados del modo vibracional).

La ecuación de movimiento aproximada para la matriz de densidad del sistema generalizada para incluir a los contactos y al entorno del oscilador toma por lo tanto la forma general²

$$\dot{\rho} = -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} [H, \rho] + \Xi\rho + \dot{\rho}_d \quad (7)$$

donde la “matriz de decaimiento”, Ξ , incorpora transiciones entre los contactos y los

²En la ecuación (7) hemos introducido $\mathbf{i} = \sqrt{-1}$ (en negrita) para no confundir con el subíndice i asociado a los estados de oscilador.

puntos externos, y $\dot{\rho}_d$ toma en cuenta la decoherencia y los efectos disipativos del entorno del oscilador. La forma de los términos no-unitarios puede derivarse adaptando técnicas estándar utilizadas en el campo de la óptica cuántica (Blum (1996)). En la siguiente sección veremos cuál es el origen de los términos no disipativos en la ecuación (7).

III.2 Ecuaciones maestras en la base compuesta del oscilador y de los puntos cuánticos.

Calculamos explícitamente las ecuaciones maestras en la base compuesta $\mathcal{D} \otimes \mathcal{O}$ de los puntos cuánticos $\mathcal{D} \equiv \{|0\rangle, |l\rangle, |c\rangle, |r\rangle\}$ y del oscilador $\mathcal{O} \equiv \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots\}$ *i.e.* en la base $|i, q\rangle \equiv |i\rangle \otimes |q\rangle$ con $i = 0, 1, 2, \dots N$, y $q = 0, l, c, r$. El objetivo es obtener la representación matricial de la ecuación (7) de la forma,

$$\dot{\rho}_{qs}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{qs}^{ij} + [\Xi \rho]_{qs}^{ij} + \dot{\rho}_{d,qs}^{ij}, \quad (8)$$

en donde hemos utilizado la notación: $\dot{\rho}_{qs}^{ij} \equiv \langle i | \dot{\rho}_{qs} | j \rangle$, $[H, \rho]_{qs}^{ij} \equiv \langle i | [H, \rho]_{qs} | j \rangle$, $[\Xi \rho]_{qs}^{ij} \equiv \langle i | [\Xi \rho]_{qs} | j \rangle$, y $\dot{\rho}_{d,qs}^{ij} \equiv \langle i | \dot{\rho}_{d,qs} | j \rangle$.

Para construir la ecuación (8), primero partimos de las ecuaciones maestras desarrolladas por Gurvitz (Gurvitz *et al.* (1996); Gurvitz y Prager (1996)), las cuales permiten describir el transporte en nanoestructuras e incluir los acoplamientos entre estados localizados, coherentes, estados electrónicos, así como los contactos. Estas ecuaciones maestras son,

$$\dot{\rho}_{aa}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{aa}^{ij} - \rho_{aa}^{ij} \sum_{d \neq a} \Gamma_{a \rightarrow d} + \rho_{c'c'}^{ij} \sum_{c' \neq a} \Gamma_{c' \rightarrow a}, \quad (9)$$

y

$$\dot{\rho}_{ab}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{ab}^{ij} - \frac{\rho_{ab}^{ij}}{2} \left[\sum_{d \neq a} \Gamma_{a \rightarrow d} + \sum_{d \neq b} \Gamma_{b \rightarrow d} \right], \quad (10)$$

en donde los superíndices $(i, j = 0, 1, 2 \dots N)$ en la etiqueta de la matriz densidad están asociados a los estados del oscilador, y los subíndices $\{a, b\}$ con las interacciones eléctricas. Los términos $\Gamma_{n \rightarrow m}$ dan las razones de transición entre los estados $|n\rangle$ y $|m\rangle$.

Las ecuaciones (9) y (10) nos permitirán construir una ecuación para los elementos de matriz de la forma general

$$\dot{\rho}_{qs}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{qs}^{ij} + \Xi \rho_{qs}^{ij}. \quad (11)$$

Para obtener el resultado anterior debemos considerar que existen tuneles del contacto izquierdo (L) hacia el punto cuántico izquierdo, así como tuneles del punto cuántico derecho hacia el contacto de la derecha (R), caracterizados por Γ_L y Γ_R , respectivamente.³

A continuación realizaremos el cálculo de los elementos de matriz de las ecuaciones maestras para algunos casos particulares. El primer caso involucra el cálculo de los elementos de matriz asociados a las poblaciones, que se derivan a partir de la ecuación (9). Consideremos, por ejemplo, el caso en que $a = l$, por lo que obtenemos

$$\dot{\rho}_{ll}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{ll}^{ij} - \rho_{ll}^{ij} \sum_{d \neq l} \Gamma_{l \rightarrow d} + \rho_{c'l}^{ij} \sum_{c' \neq l} \Gamma_{c' \rightarrow l}, \quad (12)$$

donde $d = 0, c, r$ y $c' = 0, c, r$, por lo que tenemos que las transiciones $\Gamma_{l \rightarrow 0} = \Gamma_{l \rightarrow r} = \Gamma_{l \rightarrow c} = \Gamma_{c \rightarrow l} = \Gamma_{r \rightarrow l} = 0$, y $\Gamma_{0 \rightarrow l} = \Gamma_L$. Lo anterior nos permite escribir,

$$\dot{\rho}_{ll}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{ll}^{ij} + \Gamma_L \rho_{00}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{ll}^{ij} + [\Xi \rho]_{ll}^{ij}, \quad (13)$$

en donde hemos identificado $[\Xi \rho]_{ll}^{ij} = \Gamma_L \rho_{00}^{ij}$.

³Los contactos del sistema poseen distintos potenciales electroquímicos a la izquierda (μ_L) y a la derecha (μ_R). En este modelo se ha supuesto que $\mu_L \rightarrow \infty$ y $\mu_R \rightarrow -\infty$.

En el segundo caso utilizamos la ecuación (10) para calcular los elementos de matriz asociadas a las coherencias. Consideremos el caso, por ejemplo, en que $a = l$ y $b = r$:

$$\dot{\rho}_{lr}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{lr}^{ij} - \frac{\rho_{lr}^{ij}}{2} \left[\sum_{d \neq l} \Gamma_{l \rightarrow d} + \sum_{d \neq r} \Gamma_{r \rightarrow d} \right], \quad (14)$$

donde $d = 0, c, r$, por lo que tenemos que las transiciones $\Gamma_{l \rightarrow 0} = \Gamma_{l \rightarrow r} = \Gamma_{l \rightarrow c} = \Gamma_{r \rightarrow c} = \Gamma_{r \rightarrow l} = 0$, y $\Gamma_{r \rightarrow 0} = \Gamma_R$. Lo anterior nos permite escribir

$$\dot{\rho}_{lr}^{ij} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{lr}^{ij} - \frac{\rho_{lr}^{ij}}{2} \Gamma_R = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{lr}^{ij} - [\Xi \rho]_{lr}^{ij}, \quad (15)$$

en donde hemos identificado $[\Xi \rho]_{lr}^{ij} = -(\Gamma_R/2)\rho_{lr}^{ij}$. Si además suponemos que las uniones entre los contactos y los puntos cuánticos son idénticas, podemos introducir la simplificación $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$.

Siguiendo un procedimiento análogo a las derivaciones arriba descritas, podemos escribir la representación matricial de las ecuaciones maestras como sigue:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{ll}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{ll}^{ij} + [\Xi \rho]_{ll}^{ij}; & \dot{\rho}_{cc}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{cc}^{ij} + [\Xi \rho]_{cc}^{ij}; \\ \dot{\rho}_{rr}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{rr}^{ij} + [\Xi \rho]_{rr}^{ij}; & \dot{\rho}_{00}^{ij} &= [\Xi \rho]_{00}^{ij}; \\ \dot{\rho}_{lc}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{lc}^{ij} + [\Xi \rho]_{lc}^{ij}; & \dot{\rho}_{cl}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{cl}^{ij} + [\Xi \rho]_{cl}^{ij}; \\ \dot{\rho}_{lr}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{lr}^{ij} + [\Xi \rho]_{lr}^{ij}; & \dot{\rho}_{rl}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{rl}^{ij} + [\Xi \rho]_{rl}^{ij}; \\ \dot{\rho}_{cr}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{cr}^{ij} + [\Xi \rho]_{cr}^{ij}; & \dot{\rho}_{rc}^{ij} &= -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]_{rc}^{ij} + [\Xi \rho]_{rc}^{ij}. \end{aligned} \quad (16)$$

Los elementos de matriz $[\Xi \rho]_{qs}^{ij}$ ($q, s = 0, l, c, r$; $i, j = 0, 1, 2, \dots$) están dados por

(Armour y MacKinnon (2002)):

$$\begin{aligned}
[\Xi\rho]_{ll}^{ij} &= \Gamma\rho_{00}^{ij}; & [\Xi\rho]_{rc}^{ij} &= -\frac{1}{2}\Gamma\rho_{rc}^{ij}; \\
[\Xi\rho]_{rr}^{ij} &= -\Gamma\rho_{rr}^{ij}; & [\Xi\rho]_{lr}^{ij} &= -\frac{1}{2}\Gamma\rho_{lr}^{ij}; \\
[\Xi\rho]_{00}^{ij} &= -\Gamma(\rho_{00}^{ij} - \rho_{rr}^{ij}); & [\Xi\rho]_{cc}^{ij} &= [\Xi\rho]_{lc}^{ij} = 0; \\
[\Xi\rho]_{0a}^{ij} &= 0; & & \text{para } a \neq 0.
\end{aligned} \tag{17}$$

De los resultados anteriores, es claro que para obtener la ecuación (8) debemos agregar a la ecuación (16) los elementos de matriz $\dot{\rho}_{d,qs}^{ij}$ asociados a la disipación. En las subsecciones siguientes se calcularán los elementos de matriz del conmutador de H con ρ *i.e.* $[H, \rho]_{qs}^{ij}$, así como los elementos de matriz del término disipativo dados por $\dot{\rho}_{d,qs}^{ij}$. Los elementos de matriz de las ecuaciones maestras finales se presentarán en el Apéndice B.

III.2.1 Cálculo del conmutador de H con ρ

Los elementos de matriz $[H, \rho]_{qs}^{ij}$ son calculados a partir de la ecuación

$$[H, \rho]_{qs}^{ij} = \sum_k \sum_n [H_{qk}^{in} \rho_{ks}^{nj} - H_{ks}^{nj} \rho_{qk}^{in}], \tag{18}$$

donde los elementos del hamiltoniano están dados por

$$\begin{aligned}
H_{qk}^{in} &= \varepsilon_l \delta_{ql} \delta_{kl} \delta_{in} + \varepsilon_r \delta_{qr} \delta_{kr} \delta_{in} + \left(\varepsilon_l - \frac{\varepsilon_b}{2} \right) \delta_{qc} \delta_{kc} \delta_{in} \\
&- \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \delta_{qc} \delta_{kc} \left[\sqrt{n+1} \delta_{i,n+1} + \sqrt{n} \delta_{i,n-1} \right] \\
&+ \hbar n \omega \delta_{qk} \delta_{in} \\
&+ T_l^{in} [\delta_{qc} \delta_{lk} + \delta_{ql} \delta_{ck}] + T_r^{in} [\delta_{qc} \delta_{rk} + \delta_{qr} \delta_{ck}].
\end{aligned} \tag{19}$$

Substituyendo la ecuación (19) en la ecuación para los elementos de matriz del conmutador encontramos que

$$[H, \rho]_{ll}^{ij} = (i - j) \hbar \omega \rho_{ll}^{ij} + \sum_n [T_l^{in} \rho_{cl}^{nj} - T_l^{nj} \rho_{lc}^{in}], \tag{20}$$

$$\begin{aligned}
[H, \rho]_{cc}^{ij} &= -\Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left[\sqrt{i} \rho_{cc}^{i-1,j} - \sqrt{j} \rho_{cc}^{i,j-1} \right] \\
&\quad + \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left[\sqrt{j+1} \rho_{cc}^{i,j+1} - \sqrt{i+1} \rho_{cc}^{i+1,j} \right] \\
&\quad + \sum_n [T_l^{in} \rho_{lc}^{nj} - T_l^{nj} \rho_{cl}^{in}] \\
&\quad + \sum_n [T_r^{in} \rho_{rc}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{cr}^{in}] + (i-j) \hbar \omega \rho_{cc}^{ij},
\end{aligned} \tag{21}$$

$$[H, \rho]_{rr}^{ij} = (i-j) \hbar \omega \rho_{rr}^{ij} + \sum_n [T_r^{in} \rho_{cr}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{rc}^{in}], \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
[H, \rho]_{lc}^{ij} &= \left[\frac{\varepsilon_b}{2} + (i-j) \hbar \omega \right] \rho_{lc}^{ij} \\
&\quad + \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left[\sqrt{j+1} \rho_{lc}^{i,j+1} + \sqrt{j} \rho_{lc}^{i,j-1} \right] \\
&\quad + \sum_n [-T_l^{nj} \rho_{ll}^{in} + T_l^{in} \rho_{cc}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{lr}^{in}],
\end{aligned} \tag{23}$$

$$[H, \rho]_{lr}^{ij} = [\varepsilon_b + (i-j) \hbar \omega] \rho_{lr}^{ij} + \sum_n [T_l^{in} \rho_{cr}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{lc}^{in}], \tag{24}$$

$$\begin{aligned}
[H, \rho]_{cr}^{ij} &= \left[\frac{\varepsilon_b}{2} + (i-j) \hbar \omega \right] \rho_{cr}^{ij} \\
&\quad - \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left[\sqrt{i} \rho_{cr}^{i-1,j} + \sqrt{i+1} \rho_{cr}^{i+1,j} \right] \\
&\quad + \sum_n [T_l^{in} \rho_{lr}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{cc}^{in} + T_r^{in} \rho_{rr}^{nj}],
\end{aligned} \tag{25}$$

$$[H, \rho]_{rl}^{ij} = [-\varepsilon_b + (i-j) \hbar \omega] \rho_{rl}^{ij} + \sum_n [T_r^{in} \rho_{cl}^{nj} - T_l^{nj} \rho_{rc}^{in}], \tag{26}$$

$$\begin{aligned}
[H, \rho]_{cl}^{ij} &= \left[-\frac{\varepsilon_b}{2} + (i-j) \hbar \omega \right] \rho_{cl}^{ij} \\
&\quad - \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left[\sqrt{i} \rho_{cl}^{i-1,j} + \sqrt{i+1} \rho_{cl}^{i+1,j} \right] \\
&\quad + \sum_n [T_l^{in} \rho_{ll}^{nj} - \rho_{cc}^{in} T_l^{nj} + T_r^{in} \rho_{rl}^{nj}],
\end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned}
[H, \rho]_{rc}^{ij} &= \left[-\frac{\varepsilon_b}{2} + (i-j) \hbar \omega \right] \rho_{rc}^{ij} \\
&\quad + \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left[\sqrt{j+1} \rho_{cr}^{i,j+1} + \sqrt{j} \rho_{rc}^{i,j-1} \right] \\
&\quad + \sum_n [-\rho_{rl}^{in} T_l^{nj} + T_r^{in} \rho_{cc}^{nj} - \rho_{rr}^{ij} T_r^{nj}].
\end{aligned} \tag{28}$$

Es importante señalar que debemos calcular los elementos de matriz asociados a los tuneleos *i.e.* los elementos de matriz $T_{l(r)}^{ij}$. Las expresiones analíticas para estas cantidades se calculan en la siguiente subsección.

Amplitudes de tuneleo en la base del oscilador

En el Apéndice A calculamos los elementos de matriz para los tuneleos $T_l(\hat{x})$ y $T_r(\hat{x})$ en la base del oscilador $\{|n\rangle\}$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N$), obteniendo las ecuaciones (85) y (86):

$$\begin{aligned} \langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle &= -V_0 [2^{n-m} m! n!]^{1/2} e^{-\alpha x_0} e^{(\hbar \alpha^2 / 4m\omega)} \\ &\times \left[-\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right]^{m-n} \sum_{k=0}^n \frac{\left[\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right]^{2k}}{2^k k! (k+m-n)! (n-k)!}. \end{aligned} \quad (29)$$

El resultado anterior es válido para $m \geq n$. Los elementos de matriz $\langle m | T_r(\hat{x}) | n \rangle$ pueden ser inmediatamente calculados a partir de la ecuación (29), utilizando la relación

$$T_l^{mn}(\hat{x}) = (-1)^{m-n} T_r^{mn}(\hat{x}); \quad m \geq n. \quad (30)$$

Finalmente, los elementos de matriz para el caso $m < n$ pueden ser calculados explotando la hermiticidad de los operadores, esto es, $T_l(\hat{x}) = T_l^\dagger(\hat{x})$, y $T_r(\hat{x}) = T_r^\dagger(\hat{x})$ (recordemos que $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$).

III.2.2 Cálculo del término disipativo $\dot{\rho}_d$

Es esencial incluir en la descripción al entorno del modo vibracional ya que es la disipación que surge de este acoplamiento la que da lugar a un estado estacionario en el cual la corriente es constante, como se discute a continuación. Utilizamos un modelo mínimo de este entorno, suponiéndolo como consistente de un baño de osciladores a una temperatura constante T , al que el modo vibracional se acopla solo débilmente.

Bajo estas suposiciones, la componente disipativa en la ecuación de movimiento para la matriz de densidad está dada por Scully y Zubairy (1997)

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_d = & -\frac{\gamma_d}{2}\bar{n}(dd^\dagger\rho - 2d^\dagger\rho d + \rho dd^\dagger) \\ & -\frac{\gamma_d}{2}(\bar{n}+1)(d^\dagger d\rho - 2d\rho d^\dagger + \rho d^\dagger d),\end{aligned}\quad (31)$$

donde γ_d es la razón de amortiguamiento clásica del oscilador, y $\bar{n}$ es el acostumbrado número de ocupación de oscilador a una temperatura T .

Para el caso $T = 0$, la ecuación anterior se reduce a la que, en términos de los elementos de los puntos q, s , toma la forma

$$\dot{\rho}_{d,qs} = -\frac{\gamma_d}{2}(d^\dagger d\rho_{qs} - 2d\rho_{qs}d^\dagger + \rho_{qs}d^\dagger d). \quad (32)$$

Recordando la acción de los operadores de creación y aniquilación, $d^\dagger$ y d

$$\begin{aligned}d^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle & \langle n| d &= \sqrt{n+1} \langle n+1| \\ d |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle & \langle n| d^\dagger &= \sqrt{n} \langle n-1| \\ \Downarrow & & \Downarrow & \\ d^\dagger d |n\rangle &= n |n\rangle & \langle n| d^\dagger d &= n \langle n|,\end{aligned}\quad (33)$$

encontramos que los elementos de matriz para $\dot{\rho}_d$ son

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{d,qs}^{ij} &= \langle i| \dot{\rho}_{d,qs} |j\rangle \\ &= -\gamma_d \frac{i+j}{2} \rho_{qs}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{qs}^{i+1,j+1}.\end{aligned}\quad (34)$$

Finalmente, combinamos las ecuaciones (34), (18)-(28), y la ecuaciones (16) para obtener las ecuaciones maestras para el transbordador de tres puntos cuánticos (ecuación (8)) en la base compuesta del oscilador y los puntos cuánticos. Los elementos de matriz de las ecuaciones maestras se presentan finalmente en el Apéndice B. Con base en estas ecuaciones se realizarán los cálculos de la corriente electrónica para el transbordador

de triple punto cuántico en ausencia de un campo ac, y los resultados se presentarán en el Capítulo VI.

Capítulo IV

El transbordador de triple punto cuántico bajo la acción de un campo eléctrico oscilante

En este capítulo se presenta una de las aportaciones más importantes de nuestro trabajo de tesis, que es el desarrollo del primer modelo en la literatura de un TDQS sometido a un *campo eléctrico ac*, utilizando un enfoque completamente cuántico para describir el grado de libertad mecánico inducido por el oscilador.

El planteamiento del modelo para el caso del TDQS bajo los efectos del campo ac se presenta en la sección IV.1. Aquí también se incluye el desarrollo de las *ecuaciones maestras* para estudiar la evolución de la corriente electrónica en este tipo de sistemas. En la sección IV.2 se aplica una *transformación unitaria* a las ecuaciones maestras, lo que nos permite mostrar algunos de los procesos físicos involucrados en la dinámica del tuneo, como los son la absorción o emisión de fotones.

IV.1 El modelo de TDQS en presencia de un potencial ac

Consideraremos a un potencial ac actuando en el TDQS. El potencial ac dependiente del tiempo es introducido como una oscilación de fase opuesta en los niveles de energía de los puntos derecho e izquierdo que flanquean al punto central (ver figura 7):

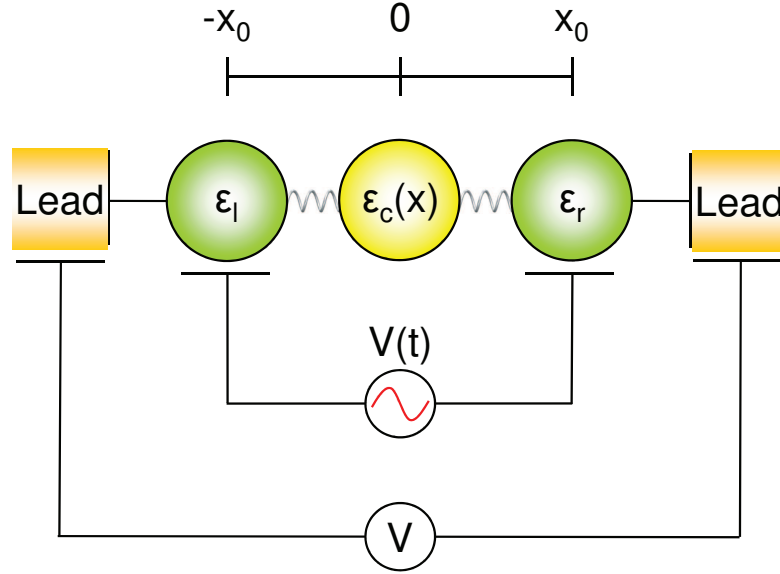


Figura 7. Transbordador de triple punto cuántico bajo la acción de un potencial ac, $V(t) = V_{ac} \cos(\omega_{ac}t)$ y los puntos cuánticos izquierdo y derecho están rígidamente acoplados a los contactos con razones de transición constantes, Γ . El sistema se encuentra en un arreglo de bias infinito, y puede haber una diferencia de potencial, $\varepsilon_b = \varepsilon_l - \varepsilon_r$, entre los puntos cuánticos izquierdo y derecho.

$$\begin{aligned}
 H_{ac} &= \frac{V_{ac}}{2} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right) (c_l^\dagger c_l - c_r^\dagger c_r) \\
 &= \frac{V_{ac}}{2} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right) (|l\rangle\langle l| - |r\rangle\langle r|),
 \end{aligned} \tag{35}$$

donde V_{ac} y ω_{ac} son la amplitud y la frecuencia del campo aplicado, respectivamente.

El hamiltoniano del sistema ahora es

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= H_{TDQS} + H_{ac} = \left[\varepsilon_l + \frac{V_{ac}}{2} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right) \right] |l\rangle\langle l| \\
 &+ \left[\varepsilon_r - \frac{V_{ac}}{2} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right) \right] |r\rangle\langle r| + \varepsilon_c(\hat{x}) |c\rangle\langle c| + \hbar\omega d^\dagger d \\
 &+ T_l(\hat{x}) [|c\rangle\langle l| + |l\rangle\langle c|] + T_r(\hat{x}) [|c\rangle\langle r| + |r\rangle\langle c|],
 \end{aligned} \tag{36}$$

donde H_{TDQS} consiste en el hamiltoniano sin campo ac, dado por la ecuación (1).

Notemos que debemos realizar (en algunas partes) las siguientes substituciones en la

ecuación maestra (8)

$$\varepsilon_l \rightarrow \varepsilon_l + \frac{V_{ac}}{2} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right); \quad (37)$$

$$\varepsilon_r \rightarrow \varepsilon_r - \frac{V_{ac}}{2} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right). \quad (38)$$

Notemos también que $\varepsilon_b \equiv (\varepsilon_l - \varepsilon_r)$ ahora se vuelve

$$\varepsilon_b \rightarrow \varepsilon_b + V_{ac} \cos\left(\frac{\omega_{ac}}{2}t\right). \quad (39)$$

Debemos de cambiar los ε_b que están asociados con $|l\rangle\langle l|$, y $|r\rangle\langle r|$. Realizando estos cambios en la ecuación maestra para el TDQS, podemos explorar el efecto del potencial ac. La ecuación maestra modificada puede ser resuelta utilizando el método de Runge-Kutta, el cual es una rutina estándar de IMSL.

IV.2 La transformación unitaria: tuneleo asistido por fotones

En esta sección se desarrolla un enfoque complementario para estudiar el transporte electrónico en el transbordador de triple punto cuántico en presencia de un campo ac. Debido a que el campo ac es periódico en el tiempo, se plantea un tratamiento tipo Floquet, el cual involucra una transformación unitaria del hamiltoniano del sistema. Dicha transformación permite que la dependencia periódica temporal, originalmente presente en el potencial ac, se transfiera a los tuneleos entre los puntos cuánticos, pesados por funciones Bessel de orden ν , donde ν es un entero. Como veremos más adelante, el parámetro ν es importante ya que está asociado al número de fotones absorbidos o emitidos durante el proceso.

Para derivar la ecuación maestra para los elementos de matriz de densidad, debemos primero remover la dependencia temporal de la energía asociada a los puntos izquierdo

y derecho. Esto se puede lograr realizando una transformación unitaria (similar a la realizada en el trabajo de Sánchez y Platero (2007)) al hamiltoniano (ecuación (36)), $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{L \leftrightarrow R} + \hat{H}_{ac} + \hat{H}_{osc}$, donde hemos definido

$$\hat{H}_0 = \varepsilon_l c_l^\dagger c_l + \varepsilon_r c_r^\dagger c_r + \varepsilon_c(\hat{x}) c_c^\dagger c_c; \quad (40)$$

$$\hat{H}_{L \leftrightarrow R} = T_l(\hat{x}) [c_c^\dagger c_l + c_l^\dagger c_c] + T_r(\hat{x}) [c_c^\dagger c_r + c_r^\dagger c_c]; \quad (41)$$

$$\hat{H}_{ac} = \frac{V_{ac}}{2} \cos \frac{\omega_{ac}}{2} t \left(c_l^\dagger c_l - c_r^\dagger c_r \right); \quad (42)$$

$$\hat{H}_{osc} = \hbar \omega d^\dagger d. \quad (43)$$

La transformación unitaria está dada por

$$\hat{U} = \exp \left\{ -i \frac{V_{ac}}{\omega_{ac}} \sin \left(\frac{\omega_{ac}}{2} t \right) \left(c_l^\dagger c_l - c_r^\dagger c_r \right) \right\} = e^{-i\lambda \hat{G}} \quad (44)$$

con $\lambda = (V_{ac}/\omega_{ac}) \sin(\omega_{ac}t/2)$, y $\hat{G} = (c_l^\dagger c_l - c_r^\dagger c_r) = \hat{G}^\dagger$. Podemos ahora escribir

$$\hat{H}' = \hat{U}^\dagger \left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \hat{U} = e^{i\lambda \hat{G}} \left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) e^{-i\lambda \hat{G}} \quad (45)$$

$$= \hat{H}'_0 + \hat{H}'_{L \leftrightarrow R} + \hat{H}'_{osc}. \quad (46)$$

Realizamos la transformación utilizando el lema de Baker-Hausdorff (Sakurai (1994)),

$$e^{i\lambda \hat{G}} \hat{A} e^{-i\lambda \hat{G}} = \hat{A} + i\lambda [\hat{G}, \hat{A}] + \frac{1}{2!} i^2 \lambda^2 [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]] + \dots, \quad (47)$$

y las relaciones de anticonmutación

$$\{c_l, c_m^\dagger\} = \delta_{lm}; \quad (48)$$

$$\{c_l^\dagger, c_m^\dagger\} = 0; \quad (49)$$

$$\{c_l, c_m\} = 0. \quad (50)$$

Utilizando las identidades anteriores, uno puede fácilmente verificar que $\hat{H}_0 = \hat{H}'_0$, y $\hat{H}_{osc} = \hat{H}'_{osc}$, esto es, que estas contribuciones son invariantes bajo la transformación

unitaria dada. Sin embargo, hay otras contribuciones que no son invariantes ante la transformación unitaria. Una de estas contribuciones es la de $\hat{H}_{ac}$, y a partir de la definición de $\hat{U}$ podemos demostrar que $\hat{U}^\dagger \hat{H}_{ac} \hat{U} = \hat{U}^\dagger [i\partial/\partial t] \hat{U} = \hat{H}'_{ac}$. Otro término del hamiltoniano que no es invariante ante la transformación unitaria es el relacionado con al tuneleo: $\hat{H}_{L\leftrightarrow R}$. Para el término de tuneleo entre puntos, tenemos $\hat{H}'_{L\leftrightarrow R} = \hat{U}^\dagger \hat{H}_{L\leftrightarrow R} \hat{U}$, donde

$$\hat{H}'_{L\leftrightarrow R} = T_l(\hat{x}) e^{i\lambda\hat{G}} \left[c_c^\dagger c_l + c_l^\dagger c_c \right] e^{-i\lambda\hat{G}} + \quad (51)$$

$$T_r(\hat{x}) e^{i\lambda\hat{G}} \left[c_c^\dagger c_r + c_r^\dagger c_c \right] e^{-i\lambda\hat{G}}. \quad (52)$$

Uno puede verificar, utilizando las identidades dadas anteriormente, que

$$e^{i\lambda\hat{G}} c_c^\dagger c_l e^{-i\lambda\hat{G}} = c_c^\dagger c_l e^{-i\lambda}, \quad (53)$$

$$e^{i\lambda\hat{G}} c_l^\dagger c_c e^{-i\lambda\hat{G}} = c_l^\dagger c_c e^{i\lambda}, \quad (54)$$

$$e^{i\lambda\hat{G}} c_c^\dagger c_r e^{-i\lambda\hat{G}} = c_c^\dagger c_r e^{i\lambda}, \quad (55)$$

$$e^{i\lambda\hat{G}} c_r^\dagger c_c e^{-i\lambda\hat{G}} = c_r^\dagger c_c e^{-i\lambda}, \quad (56)$$

lo que nos permite escribir

$$\hat{H}'_{L\leftrightarrow R} = T_l(\hat{x}) \left[c_c^\dagger c_l e^{-i\lambda} + c_l^\dagger c_c e^{i\lambda} \right] + \quad (57)$$

$$T_r(\hat{x}) \left[c_c^\dagger c_r e^{i\lambda} + c_r^\dagger c_c e^{-i\lambda} \right]. \quad (58)$$

Ahora insertamos en la ecuación anterior el parámetro λ , y utilizamos la identidad

$$e^{ix \sin \theta} = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} J_\nu(x) e^{i\nu\theta}; \quad (59)$$

$$e^{-ix \sin \theta} = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (-1)^\nu J_\nu(x) e^{i\nu\theta}, \quad (60)$$

donde hemos utilizado la propiedad $J_{-\nu} = (-1)^\nu J_\nu$ en la última identidad, donde ν es

un entero. Obtenemos así

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{L \Leftrightarrow R} = & \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (-1)^{\nu} J_{\nu}(\xi) \{ \\ & + T_l(\hat{x}) \left[c_c^{\dagger} c_l e^{i\omega_{ac}\nu t/2} + c_l^{\dagger} c_c e^{-i\omega_{ac}\nu t/2} \right] \\ & + T_r(\hat{x}) \left[c_c^{\dagger} c_r e^{-i\omega_{ac}\nu t/2} + c_r^{\dagger} c_c e^{i\omega_{ac}\nu t/2} \right] \}, \end{aligned} \quad (61)$$

con la razón $\xi = (V_{ac}/\omega_{ac})$.

Podemos ver de la ecuación anterior que los términos de tuneleo se renormalizan de la siguiente forma:

$$\tilde{T}_l(\hat{x}) \sim \sum_{\nu} (-1)^{\nu} J_{\nu}(\xi) T_l(\hat{x}) \exp(\pm i\omega_{ac}\nu t/2); \quad (62)$$

$$\tilde{T}_r(\hat{x}) \sim \sum_{\nu} (-1)^{\nu} J_{\nu}(\xi) T_r(\hat{x}) \exp(\pm i\omega_{ac}\nu t/2). \quad (63)$$

Para obtener las ecuaciones maestras para el caso con ac, debemos evaluar el conmutador dado por la ecuación (18), sustituyendo $H \rightarrow H'$ en la representación de la *transformación unitaria*, *i.e.*, utilizando H' con $\hat{H}'_{L \Leftrightarrow R}$ dada por la ecuación (61). Consultar las ecuaciones maestras en el Apéndice B, y las modificaciones propuestas en la Sección IV.1.

Los ecuaciones maestras obtenidas en las distintas secciones se utilizarán en el Capítulo VI para realizar un estudio de la corriente electrónica para el transbordador de triple punto cuántico en presencia de campo ac.

Capítulo V

Teoría de Floquet para transbordadores cuánticos

Los arreglos de puntos cuánticos sometidos a campos ac han sido estudiados extensamente en años recientes: experimentalmente (Kierig *et al.* (2008), Valle *et al.* (2007), Lignier *et al.* (2007)) y teóricamente (Creffield y Platero (2002), Platero y Aguado (2004), Barata y Wreszinski (2000), Barata y Cortez (2003), Frasca (2005)). Un efecto físico importante analizado en estos sistemas es el de la localización del electrón inducida por un campo ac, donde, para valores especiales de los parámetros del campo aplicado, correspondientes a raíces de las funciones Bessel, el tuneleo es suprimido. Este efecto, llamado *Dstrucción Coherente del Tuneleo*, CDT por sus siglas en inglés, ha sido analizado mediante la teoría de Floquet y el correspondiente espectro de energías (cuasienergías).

A continuación mostraremos el uso de la Teoría de Floquet y el estudio del CDT aplicado por primera vez a un TDQS, lo cual constituye otra de las aportaciones importantes de nuestro trabajo de investigación. En la sección V.1 se presenta la teoría general de Floquet, y en la sección V.2 se plantea el método para calcular las cuasienergías del sistema. Finalmente en la sección V.3, se presenta la teoría de Floquet para sistemas simétricos. Se demuestra que debido a la simetría espacial y temporal del sistema, existe una invariancia ante una transformación generalizada de paridad y, de esta forma, encontramos expresiones analíticas que describen las propiedades de simetría de los coeficientes de Fourier de los estados de Floquet.

V.1 Teoría de Floquet

Si el sistema está descrito por un hamiltoniano periódico en el tiempo $H = H_0 + H(t)$, donde $H(t) = H(t + \tau)$, entonces, de acuerdo al teorema de Floquet (Grifoni y Hänggi (1998) y Holthaus (1992)), la solución de la ecuación de Schrödinger es de la forma $\Psi(x, t) = \exp(-i\epsilon_\alpha t/\hbar)\Phi_\alpha(x, t)$, donde $\Phi_\alpha(x, t)$ es también periódica en el tiempo: $\Phi_\alpha(x, t) = \Phi_\alpha(x, t + \tau)$. Así, después de sustituir, la ecuación de Schrödinger se vuelve

$$(H - i\hbar\partial/\partial t)\Phi_\alpha(x, t) = \epsilon_\alpha\Phi_\alpha(x, t), \quad (64)$$

que puede ser considerada como una ecuación de eigenvalores que define al hamiltoniano de Floquet $\mathcal{H} = (H - i\hbar\partial/\partial t)$, con cuasienergías de Floquet ϵ_α y eigenfunciones $\Phi_\alpha(x, t)$. Puede verse que si $\Phi_{\alpha 0}(x, t)$ es una eigenfunción de Floquet con cuasienergía $\epsilon_{\alpha 0}$, entonces

$$\Phi_{\alpha m}(x, t) = \Phi_{\alpha 0}(x, t) \exp(i\omega_{ac}mt); m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (65)$$

son también soluciones, con cuasienergías $\epsilon_{\alpha m} = \epsilon_{\alpha 0} + m\hbar\omega_{ac}$. Aquí $\omega_{ac} = (2\pi/\tau)$ es la frecuencia del campo ac. Por lo tanto, al igual que en el caso del teorema de Bloch, las cuasienergías pueden ser mapeadas en la primera zona de Brillouin $-\hbar\omega_{ac}/2 \leq \epsilon_\alpha \leq \hbar\omega_{ac}/2$. Si la perturbación se anula adiabáticamente, los estados de Floquet y las cuasienergías obedecen

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha m}(x, t) &\rightarrow \phi_\alpha(x) \exp(i\omega_{ac}mt) \\ \epsilon_{\alpha m} &\rightarrow E_\alpha + \hbar m\omega_{ac}, \end{aligned} \quad (66)$$

donde $\phi_\alpha(x)$ y $E_\alpha = \epsilon_{\alpha 0}$ son eigenfunciones y eigenenergías del hamiltoniano sin perturbar H_0 . Esto es llamado la representación de cero fotones, mientras que las cuasienergías

$\epsilon_{\alpha m}$ y las eigenfunciones correspondientes $\Phi_{\alpha m}$ se refieren a la representación de m -fotones. Aún más, es sabido que si el hamiltoniano es invariante bajo la llamada Transformación Generalizada de Paridad, (Dittrich *et al.* (1998) y Kohler *et al.* (2005)) $\mathcal{S}_{GP} : (x, t) \rightarrow (-x, t + \tau/2)$, entonces los estados de Floquet tienen una paridad bien definida. Para un sistema de dos niveles, estas propiedades de simetría son responsables de los cruces de niveles (diferente paridad) y los anti-cruces (misma paridad) en el espectro de cuasienergías como función del campo ac (Grossmann *et al.* (1991)). El caso general de cruces y anti-cruces de N cuasienergías, dependientes en las simetrías generalizadas de los estados de Floquet ha sido discutido por Longhi (2008). En particular, para el caso $N = 3$, se muestra que existe una condición para un cruce exacto de las tres cuasienergías.

V.2 Cálculo del espectro de cuasienergías

Obtenemos el espectro de cuasienergías del sistema mediante la diagonalización numérica del hamiltoniano de Floquet $\mathcal{H} = [H - i\hbar\partial/\partial t]$ (con $H = H_0 + H_{osc} + H_{tun} + H_{ac}$), representado en la base compuesta $\mathcal{D} \otimes \mathcal{O} \otimes \mathcal{T}$ de los puntos cuánticos ($|l\rangle, |c\rangle, |r\rangle$), oscilador ($i, j = 0, 1, 2, \dots, N$) y las funciones periódicas de t con período $\tau = (2\pi/\omega_{ac})$, respectivamente *i.e.* usamos la base compuesta $|q, j\rangle \otimes |n'\rangle$ (estados de punto cuántico $q = l, c, r$; estados de oscilador $j = 0, 1, 2, \dots, N$; base espacio $\mathcal{T}$, $n' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, N_t$). Los elementos de matriz en esta representación compuesta están dados por

$$\mathcal{H}_{qs}^{ij, n'n} = \langle\langle n' | \mathcal{H}_{qs}^{ij} | n \rangle\rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{-in'\omega_{act}} \mathcal{H}_{qs}^{ij} e^{in\omega_{act}}, \quad (67)$$

donde hemos utilizado la definición de producto interno en el espacio $\mathcal{T}$, involucrando un promedio en el tiempo. Si N_t es el número de niveles de fotones, entonces $n, n' =$

$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm N_t$. Esto conduce a,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{ll}^{ij,n'n} &= (\varepsilon_l + j\hbar\omega + n\hbar\omega_{ac})\delta_{n'n}\delta_{ij} \\
&+ \frac{V_{ac}}{4}(\delta_{n',n+1} + \delta_{n',n-1})\delta_{ij}; \\
\mathcal{H}_{cc}^{ij,n'n} &= -\Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} (\sqrt{j+1}\delta_{i,j+1} + \sqrt{j}\delta_{i,j-1})\delta_{n'n} \\
&+ (j\hbar\omega + n\hbar\omega_{ac})\delta_{ij}\delta_{n'n}; \\
\mathcal{H}_{rr}^{ij,n'n} &= (\varepsilon_r + j\hbar\omega + n\hbar\omega_{ac})\delta_{n'n}\delta_{ij} \\
&- \frac{V_{ac}}{4}(\delta_{n',n+1} + \delta_{n',n-1})\delta_{ij}; \\
\mathcal{H}_{lc}^{ij,n'n} &= \mathcal{H}_{cl}^{ij,n'n} = T_l^{ij}(\hat{x})\delta_{n'n}; \\
\mathcal{H}_{lr}^{ij,n'n} &= \mathcal{H}_{rl}^{ij,n'n} = 0; \\
\mathcal{H}_{cr}^{ij,n'n} &= \mathcal{H}_{rc}^{ij,n'n} = T_r^{ij}(\hat{x})\delta_{n'n}.
\end{aligned} \tag{68}$$

El espectro de cuasienergías de Floquet del sistema se puede obtener diagonalizando numéricamente la matriz cuyos elementos están dados arriba. Los eigenvectores de $\mathcal{H}$ en la base compuesta $\mathcal{D} \otimes \mathcal{O} \otimes \mathcal{T}$ pueden escribirse como

$$|\Phi_k(q; j, t)\rangle = \sum_{n,q,j} C_{nqj}^k e^{-in\omega_{ac}t} |q; j\rangle, \tag{69}$$

donde $|q; j\rangle \equiv |q\rangle \otimes |j\rangle$ es la base $\mathcal{D} \otimes \mathcal{O}$. Así, los eigenestados de Floquet están dados efectivamente por los coeficientes de Fourier C_{nqj}^k . Como veremos después, la paridad de los estados de Floquet determina las propiedades de simetría de estos coeficientes.

V.3 Teoría de Floquet para sistemas simétricos

A continuación estudiaremos un TDQS simétrico, esto es, un TDQS en ausencia de voltaje de compuerta, $\varepsilon_b = 0$. En esta situación, el hamiltoniano de Floquet, $\mathcal{H}$, es invariante bajo una transformación generalizada de paridad $S_{GP} : (x, t) \rightarrow (-x, t + \tau/2)$.

Por lo tanto, los estados de Floquet se pueden clasificar de acuerdo a la *paridad*. De la ecuación (69), podemos escribir los coeficientes de Fourier, $C_{n,q,j}^k$, como

$$C_{n,q,j}^k = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle q; j | \Phi_k \rangle e^{in\omega_{ac}t} dt, \quad (70)$$

y, después de realizar la transformación S_{GP} , se puede demostrar que los coeficientes anteriores obedecen las siguientes relaciones (Villavicencio *et al.* (2011)),

$$C_{n,q,j}^k = \pm (-1)^n (-1)^j C_{n,-q,j}^k, \quad (71)$$

donde el signo superior (inferior) corresponde a los estados pares (impares), k representa al k -ésimo estado de Floquet y los índices n , q y j están asociados a la base temporal, de punto cuántico y de oscilador, respectivamente. En nuestra notación el índice $-q$ en la parte derecha de la ecuación anterior indica una inversión de sitio espacial de los puntos cuánticos, *i.e.*, $l \leftrightarrow r$. Más adelante mostraremos que el fenómeno de CDT puede ser explicado analizando el espectro de cuasienergías y la paridad de los coeficientes de Fourier de los estados de Floquet correspondientes.

Capítulo VI

Resultados y discusiones

Recordemos que el *transbordador de triple punto cuántico* (TDQS) consiste en tres puntos cuánticos conectados en serie, con la peculiaridad de que el punto central puede oscilar entre los puntos de los extremos, mientras que estos últimos se encuentran unidos rígidamente a los contactos. La oscilación mecánica del punto central le confiere al sistema nuevas propiedades eléctricas, convirtiéndolo en un sistema nanoelectromecánico, esto es, en un sistema en donde los grados de libertad mecánicos y electrónicos se encuentran estrechamente relacionados. Cada uno de los puntos cuánticos está caracterizado por un nivel fijo de energía, ε_l , ε_c y ε_r , para los puntos a la izquierda, centro y derecha, respectivamente. La dinámica del transporte electrónico en este tipo de sistema puede ser analizada utilizando el formalismo de la *Matriz de Densidad Reducida*, el cual permite incluir los acoplamientos del sistema a los contactos, así como los efectos del oscilador y su entorno.

En este capítulo aplicaremos las herramientas desarrolladas en los capítulos anteriores para estudiar las características de la corriente electrónica, I , con y sin un campo ac aplicado, además de los espectros de energías del hamiltoniano y cuasienergías en el TDQS. En la sección VI.1 estudiaremos las propiedades de transporte electrónico en un TDQS que no está sometido a un campo ac. Analizaremos las propiedades de la corriente electrónica y haremos un análisis de las cuasienergías del sistema. En la sección VI.2 analizamos ahora las propiedades de la corriente para un TDQS que se encuentra bajo la influencia de un campo ac, en donde podremos observar nuevos efectos en las

curvas de corriente del sistema. Estudiaremos el fenómeno conocido como *destrucción coherente del tuneo* (CDT por sus siglas en inglés) y estableceremos cuándo es que éste se presenta. Por último en la sección VI.3, aplicaremos la teoría de Floquet para un TDQS asimétrico y uno simétrico para estudiar sus espectros de cuasienergías y analizar en detalle el fenómeno de CDT.

VI.1 Transporte electrónico en un transbordador de triple punto cuántico (sin campo ac)

Desde el punto de vista computacional, el estudio de la corriente electrónica involucra la integración numérica de las Ecuaciones Maestras obtenidas en el capítulo III (consultar el Apéndice B) y efectuando un promedio sobre las poblaciones medidas en el punto cuántico localizado a la derecha del sistema, *i.e.*, $I = e\Gamma \sum_i [\rho_{rr}^{ii}]_{prom}$ una vez que se ha logrado el estado estacionario. En otras palabras, la corriente se determina después de que las soluciones de la Ecuaciones Maestras han evolucionado en el tiempo a tal grado que sus variaciones son despreciables¹. Esta expresión para la corriente es un caso especial, válido en el límite de bajas temperaturas y suponiendo acoplamiento constante a los contactos, de la expresión más general (Meir y Wingreen (1992)) para la corriente a través de un punto cuántico acoplado a contactos:

$$I = \frac{e}{h} \sum_{\sigma} \int d\varepsilon [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \Gamma_{\sigma\sigma}(\varepsilon) \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\sigma\sigma}^r(\varepsilon) \right], \quad (72)$$

¹El cálculo numérico de la corriente I se simplifica notablemente si consideramos la situación estacionaria $\dot{\rho}_{ij} = 0$, lo que permite reducir el problema original de un sistema de ecuaciones diferenciales lineales acopladas, a un sistema de ecuaciones simples.

donde $(-1/\pi)ImG_{\sigma\sigma}^r(\varepsilon)$ es la densidad local de estados de electrones con espín σ , siendo f_L y f_R las funciones de ocupación de Fermi-Dirac para ambos contactos (L y R). El término $\Gamma_{\sigma\sigma}(\varepsilon)$ representa el acoplamiento (rapidez de tunelaje) a los contactos y está dado por la *Regla de Oro de Fermi*:

$$\Gamma_{\sigma\sigma}(\varepsilon) = 2\pi \sum_k |V_{k\sigma}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma}), \quad (73)$$

donde los $V_{k\sigma}$ son elementos de matriz que miden el traslape entre estados del punto cuántico y estados de los contactos.

A diferencia de lo que ocurre en un arreglo estático de puntos cuánticos, en donde las características de la corriente son bien conocidas (Renzoni y Brandes (2001), Wegewijs y Nazarov (1999), Pals y MacKinnon (1996a), Pals y MacKinnon (1996b) y Stafford *et al.* (1998)), se espera que la presencia de un elemento oscilador introduzca nuevos efectos en esta cantidad física. Como veremos en la presente sección, al estudiar el transporte electrónico en el TDQS, se encuentran nuevos canales de transmisión de la corriente debidos al oscilador cuántico: cada nivel de energía de cada uno de los puntos cuánticos se divide en subniveles gracias al efecto del oscilador armónico. Los resultados de nuestro estudio se presentan en tres subsecciones. En la subsección VI.1.1 nos dedicamos a la tarea de explorar las propiedades o características más importantes de la corriente electrónica en el TDQS. En la subsección VI.1.2 estudiamos las propiedades de la corriente con base al espectro de energías del sistema. Por último, en la subsección VI.1.3, se presenta un estudio sistemático del efecto del acoplamiento del sistema con los contactos y el entorno.

VI.1.1 La corriente electrónica

A continuación exploraremos las propiedades de la corriente electrónica, I , para un TDQS en lo que se conoce como el régimen de acoplamiento débil, *i.e.*, para valores grandes de $\alpha = 1/\lambda$, donde λ es la longitud de tuneo. Esto es, consideramos una situación en donde los puntos cuánticos están débilmente acoplados entre ellos, y débilmente acoplados a los contactos. Para ello consideramos los siguientes parámetros del sistema: amplitud de tuneo $V_0 = 0.5$, acoplamiento con los contactos $\Gamma = 0.05$, amortiguamiento $\gamma_d = .025$, frecuencias del oscilador $\omega = 1$, $x_0 = 5.0$, y $\alpha = 0.2$. Antes de continuar es preciso aclarar que todos nuestros cálculos fueron realizados con unidades de $\hbar = 2m = e = \omega = 1$. Con la elección de estas unidades, los parámetros con unidades de energía (como V_0) están dadas como múltiplos de $\hbar\omega$, los parámetros relacionados con unidades de longitud (como λ y x_0) están expresadas como múltiplos de Δx_{zp} , y finalmente γ_d y Γ estarán dadas en múltiplos de ω .

En la figura 8 se presenta la variación de la corriente I como función del voltaje de compuerta $\varepsilon_b = \varepsilon_l - \varepsilon_r$ (línea negra sólida). Se puede apreciar que la corriente electrónica exhibe una serie de resonancias bien definidas que aparecen en las posiciones $\varepsilon_b \simeq 0, 0.84, 1.93, 2.87$, las cuales corresponden a valores cercanos a las resonancias inducidas por el oscilador ($\varepsilon_b \simeq 0, 1, 2, 3$) que describe el movimiento del punto cuántico central. En el régimen de acoplamiento débil es de esperarse que los niveles de energía de los puntos cuánticos individuales exhiban un espectro caracterizado por una escalera de niveles espaciados una cantidad $\hbar\omega$, que corresponde a los niveles de un oscilador armónico. Es importante señalar que en nuestro modelo hemos redefinido los niveles de energía del oscilador de tal forma que éste exhiba una escalera espaciada en múltiplos de $\hbar\omega$, *i.e.*, las energías reescaladas del oscilador serán $E'_n = E_n - E_0 = n\hbar\omega$, donde $E_n =$

$(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ y $E_0 = \hbar\omega/2$. De lo anterior vemos que los niveles de energía asociados a las resonancias mecánicas del sistema corresponden a valores de energía $0, \hbar\omega, 2\hbar\omega, 3\hbar\omega, \dots$, valores que coinciden aproximadamente con las resonancias observadas en la corriente de la figura 8.

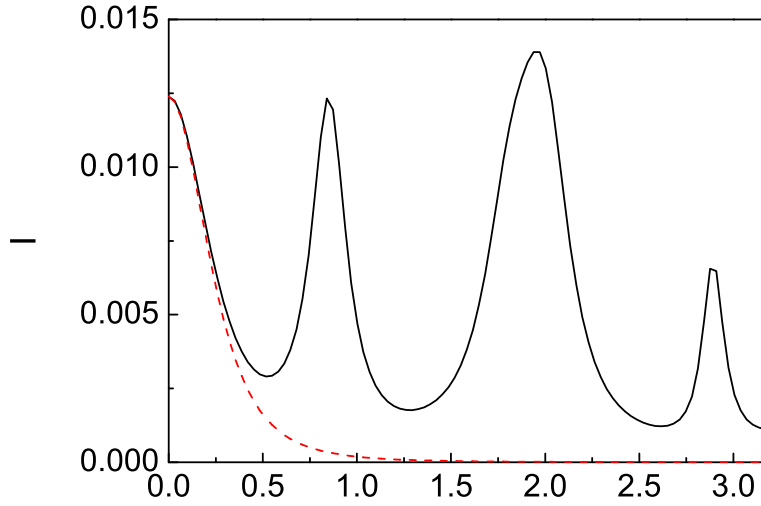


Figura 8. Resonancias de la corriente electrónica I en un TDQS en el régimen de acoplamiento débil. Las resonancias se manifiestan en las curvas de I como función del voltaje de compuerta ε_b (línea negra sólida) para los valores típicos de los parámetros $\{V_0; \gamma_d; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0.5; 0.025; 5.0; 0.05; 0.2\}$ considerando $N = 10$ estados de oscilador y una frecuencia $\omega = 1$. En la figura se incluye también el caso estático (línea roja a trazos), *i.e.*, el caso en donde el punto cuántico central no oscila ($\omega = 0$). Los resultados coinciden con los presentados en el trabajo de Armour y MacKinnon (2002).

Podemos entender el origen de las resonancias mecánicas a partir del comportamiento del espectro de energías del sistema y de sus eigenestados, tanto en forma cualitativa como en forma cuantitativa. En el régimen que estamos explorando sabemos que la longitud de tunelaje λ de los electrones es pequeña, lo que origina un acoplamiento débil entre los tres puntos cuánticos. En este caso el tunelaje será posible solo mediante un proceso secuencial en donde un electrón puede saltar desde el punto cuántico

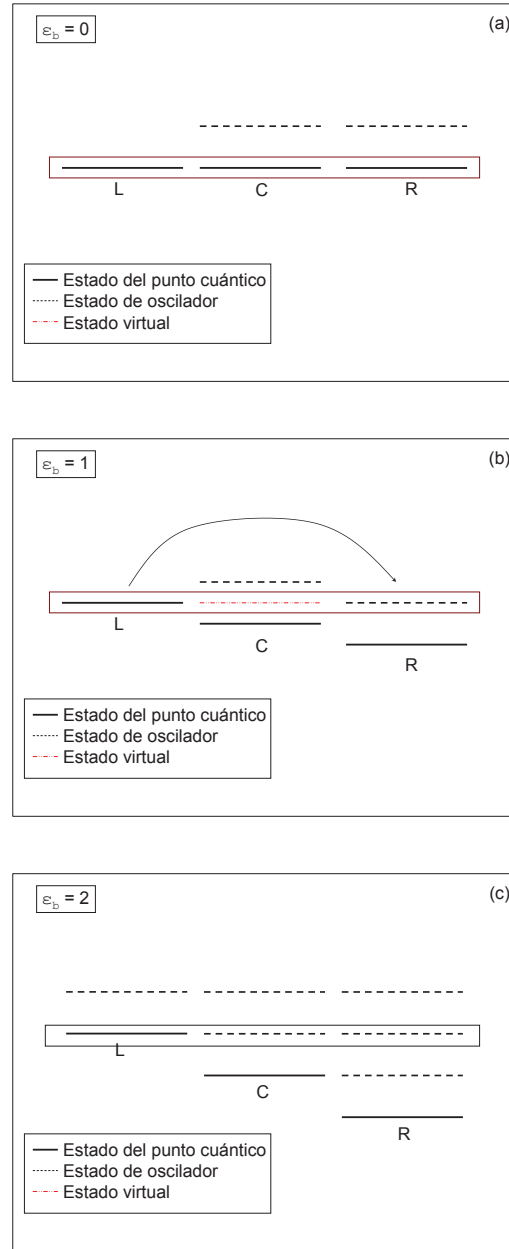


Figura 9. Esquema de los niveles de energía en un TDQS para distintos valores del voltaje de compuerta (a) $\varepsilon_b = 0$, (b) $\varepsilon_b = 1.0$ y (c) $\varepsilon_b = 2.0$. En los diagramas hemos definido los estados de los puntos cuánticos (línea negra sólida), los estados de oscilador (línea negra a trazos) y los “*estados virtuales*” (línea roja a trazos y puntos). Cada punto cuántico tiene asociado un espectro de energía caracterizado por una escalera de niveles separados en una cantidad $\hbar\omega = 1$.

izquierdo hacia el punto cuántico central (oscilante), el cuál lo transbordará hacia el punto cuántico de la derecha mediante la oscilación mecánica. Este proceso puede ilustrarse cualitativamente mediante un análisis de los diagramas de energía de los puntos cuánticos individuales en presencia de los niveles del oscilador armónico. En la figura 9 analizaremos distintas situaciones físicas en donde se varía el valor del voltaje de compuerta. También hemos introducido en la misma figura algunas representaciones esquemáticas para los niveles de energía de los puntos cuánticos (línea negra sólida), del oscilador (línea negra a trazos) y lo que hemos llamado *estados virtuales* (línea roja a trazos y puntos).

En el diagrama de la figura 9 (a) analizamos la situación física en donde el voltaje de compuerta $\varepsilon_b = 0$. Cuando el voltaje es cero tenemos una alineación de todos los niveles asociados a los puntos cuánticos, lo cual conduce a una *transmisión resonante* de los electrones, *i.e.*, los electrones encuentran disponible una banda de energía a través de la cual pueden transmitirse efectivamente en el sistema. Es por esta razón que la corriente I (línea negra sólida), mostrada en la figura 8, exhibe un máximo en $\varepsilon_b = 0$. Es importante destacar que este fenómeno de transmisión resonante también es responsable de que la corriente electrónica en el caso estático (el punto cuántico central no oscila) mostrado en la figura 8 exhiba un máximo alrededor de este valor $\varepsilon_b = 0$. Una vez que el valor de ε_b se incrementa, la corriente decae rápidamente hasta llegar a cero. El comportamiento anterior es una consecuencia de que en el sistema de un triple punto cuántico estático solo se ha considerado un nivel de energía asociado a cada punto, por lo que al incrementar el voltaje no existen nuevos canales de transmisión disponibles. En la figura 8 notamos que al incrementarse el voltaje ε_b , la corriente I asociada al TDQS disminuye monótonicamente a un ritmo similar a la corriente correspondiente al caso estático (línea roja a trazos). Sin embargo, la corriente asociada al TDQS en

lugar de decrecer rápidamente a cero, vuelve a crecer para formar una resonancia bien definida en $\varepsilon_b \simeq 0.84$, valor muy cercano al de la segunda resonancia mecánica del oscilador $E' = 1(\hbar\omega)$. Lo anterior puede explicarse con ayuda de la figura 9 (b), en donde para el valor de $\varepsilon_b = 1$ tenemos una alineación del nivel de energía del punto cuántico izquierdo (L) con un nivel de energía del oscilador del punto cuántico situado a la derecha (R).

Es importante señalar que aún cuando el espectro del punto cuántico central (C) no cuenta (en este caso particular) con niveles que se encuentren alineados con los puntos R y L , podemos introducir lo que hemos denominado un “*nivel virtual*” inducido por las oscilaciones del punto cuántico central y a través del cual es transferido el electrón. Este mecanismo será observado en el caso en que el valor del voltaje de compuerta $\varepsilon_b = p\hbar\omega$, ($p = 1, 3, 5, 7, \dots$), así que el origen del pico de corriente del TDQS observado en $\varepsilon_b \simeq 2.87$ tiene una explicación similar, *i.e.*, ocurre una alineación de los niveles electrónicos de los puntos cuánticos L y R .

Finalmente, con el esquema de la figura 9 (c) explicaremos el origen de la resonancia en $\varepsilon_b \simeq 1.93$ observada en la figura 8. Notamos que para el valor de compuerta $\varepsilon_b = 1$ existe una alineación exacta entre los niveles de los tres puntos L , C y R . De esta forma, los picos de corriente que aparecen en valores de múltiplos pares de $\hbar\omega$, *i.e.*, $\varepsilon_b = p'\hbar\omega$, ($p' = 0, 2, 4, 6, \dots$), pueden explicarse mediante la alineación exacta de estos niveles energéticos.

En la figura 10 se analiza el efecto sobre la corriente electrónica en un TDQS al variar el parámetro α . Para esto elegimos un sistema de TDQS con los mismos parámetros considerados en la figura 8, pero con un valor mayor de $\alpha = 0.4$. El parámetro α está relacionado con el inverso de la longitud de penetración λ asociada a los tuneleos del punto cuántico central hacia los puntos cuánticos laterales. Hemos considerado

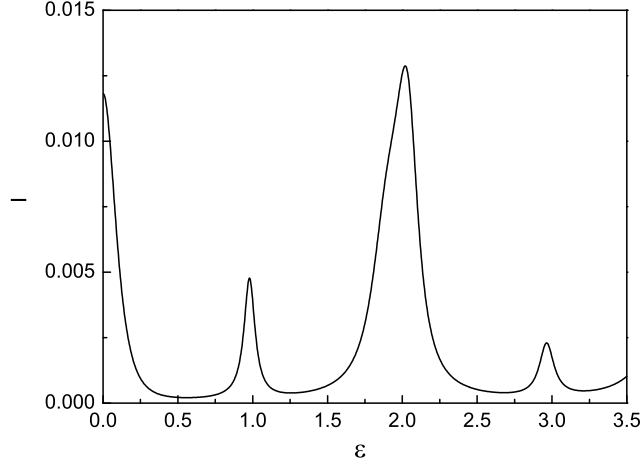


Figura 10. Corriente electrónica I como función del voltaje ε_b para un sistema con los mismos parámetros que los utilizados en la figura 8, pero con un valor mayor de $\alpha = 0.4$, y $N = 9$ estados de oscilador. Lo anterior conduce a un acoplamiento más débil entre los puntos cuánticos izquierdo y derecho con el central. De nuevo podemos apreciar que las resonancias en la curva de I versus ε_b aparecen aproximadamente en los múltiplos pares e impares de la energía $\hbar\omega = 1$. Observamos que el efecto de incrementar el parámetro α es el de reducir la intensidad de las resonancias impares en $\varepsilon_b \simeq 1.0$ y $\varepsilon_b \simeq 3.0$.

que dicho tuneo depende exponencialmente de este parámetro, *i.e.*, $\hat{T}_{l,r} \sim V_0 e^{-\alpha x_0}$, por lo que al aumentar el parámetro α , los tuneos entre el punto cuántico central con los puntos a la izquierda y a la derecha disminuyen notablemente. El efecto de la variación de α se manifiesta en una reducción de los picos de corriente asociados a las resonancias impares $\varepsilon_b \simeq 1$ y $\varepsilon_b \simeq 3$ debido a que en estas situaciones, como se puede inferir también a partir de la figura 9 (b), la corriente depende fuertemente del proceso de transbordo a través del punto central, el cual ha sido notablemente disminuido al reducir los parámetros de tuneo $\hat{T}_l$ y $\hat{T}_r$. Dicho de otra manera, los electrones que se encuentran en el punto cuántico izquierdo (derecho) tienen una probabilidad de tuneo muy baja cuando el punto central se encuentra en su vecindad, similar a lo que ocurre cuando un electrón tuneo a través de una barrera de potencial opaca.

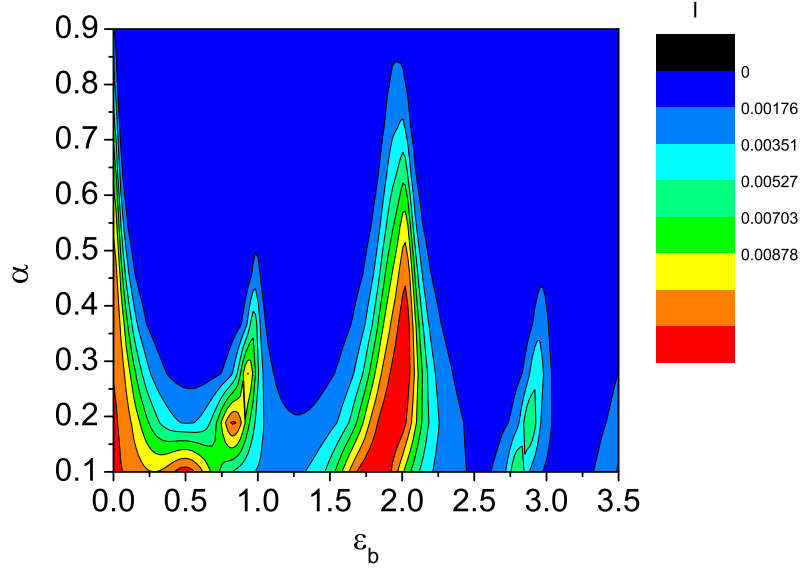


Figura 11. Curvas de nivel de la corriente electrónica I como función del voltaje ε_b para un sistema con los mismos parámetros que los utilizados en la figura 10 y para distintos valores de α . Notamos que para algún valor fijo de α las resonancias localizadas en valores impares de $\varepsilon_b = 1.0, 3.0$, son de menor intensidad que aquellas que ocurren en valores pares, $\varepsilon_b = 0, 2.0$. Notamos que al incrementar el valor de α , las intensidad de las resonancias asociados a los valores impares de ε_b disminuyen más rápidamente que aquellas asociadas a los valores pares.

El comportamiento de la intensidad de las resonancias ante variaciones del parámetro α se puede apreciar en la figura 11. En este caso se presenta una gráfica de curvas de nivel de la intensidad de corriente I versus ε_b para distintos valores de α , utilizando los mismos parámetros que en la figura 10. Observamos que para el caso de $\alpha = 0.4$ la intensidad de las resonancias es consistente con los discutido en la figura 10. De hecho, si en la figura 11 nos movemos a lo largo de una línea en la dirección creciente del eje α , alrededor de los valores $\varepsilon_b \simeq 0$ y $\varepsilon_b \simeq 2$, observamos que existe una disminución de la intensidad de la corriente, y los picos todavía son apreciables para valores de $\alpha = 1$. En contraste, los valores de la corriente en la vecindad de $\varepsilon_b \simeq 1$ y $\varepsilon_b \simeq 3$ disminuyen en intensidad rápidamente, y desaparecen prácticamente para valores de $\alpha \gtrsim 0.5$. Esto

es, vemos que las resonancias asociadas a los valores pares de ε_b son en general más intensas que las correspondientes a los valores impares de ε_b . También puede observarse en general que, conforme el valor de α se incrementa, la posición del máximo de las resonancias presenta un corrimiento hacia los valores de los niveles de energía que corresponderían a los puntos cuánticos aislados con un espectro de niveles espaciados $\hbar\omega$. En otras palabras, los valores de los máximos de las resonancias aparecen en $\varepsilon_b = 0, \hbar\omega, 2\hbar\omega, 3\hbar\omega, \dots$ para valores muy grandes de α .

VI.1.2 Eigenvalores y eigenestados

Para los sistemas en donde el acoplamiento con los contactos externos (Γ) y el entorno (γ_d) son mucho menores que los acoplamientos entre los puntos cuánticos, *i.e.*, $\Gamma, \gamma_d \ll V_0 e^{-\alpha x_0}$, es de esperarse que las características de la corriente sean gobernadas por los eigenestados del sistema aislado. Bajo estas condiciones, podemos considerar que los estados asociados al transbordador cuántico están extendidos sobre todo el sistema formando canales de transmisión independientes y que no están necesariamente localizados en alguno de los puntos cuánticos que lo conforman. Como lo veremos un poco más adelante, la transmisión de electrones se ve favorecida por aquellos estados electrónicos (eigenestados) en donde la probabilidad de encontrar a los electrones en los puntos cuánticos de la derecha y la izquierda sea grande. Las propiedades de estos eigenestados pueden ser entendidas mediante el análisis del espectro de eigenvalores. A continuación estudiaremos el espectro de energías de un transbordador cuántico como función del voltaje de compuerta ε_b . Obtenemos las eigenenergías y eigenestados del trasbordador de triple punto cuántico diagonalizando numéricamente el hamiltoniano del TDQS, $\hat{H} \equiv H_{TDQS}$, dado por la ecuación (1), representado en la base compuesta,

$\mathcal{D} \otimes \mathcal{O}$, de los puntos cuánticos ($|l\rangle, |c\rangle, |r\rangle$) y del oscilador ($i, j = 0, 1, 2, \dots, N$), respectivamente. Los elementos de matriz $\hat{H}_{qs}^{ij} = \langle i | \hat{H}_{qs} | j \rangle$ ($q, s = l, c, r$) en esta representación están dados por la ecuación (99) del Apéndice C.

Para entender los efectos del acoplamiento entre los puntos cuánticos del sistema, gobernado por $T_{l,r} \sim V_0 e^{-\alpha x_0}$, consideramos primero el caso de puntos cuánticos totalmente desacoplados, esto es, con $V_0 = 0$. En la figura 12 observamos el espectro de energías para el sistema con parámetros: $V_0 = 0$, $x_0 = 5$, $\Gamma = 0.05$, y $\alpha = 0.4$. Observamos que para $\varepsilon_b = 0$, el espectro es triplemente degenerado y con un espaciamiento de $\Delta E \sim \hbar\omega = 1$. Al incrementarse el valor de ε_b , se puede observar una separación entre los niveles de energía, la cual evoluciona en forma lineal con el voltaje de compuerta. En este caso es posible identificar los estados de los puntos cuánticos individuales. Los niveles asociados al punto cuántico izquierdo crecen linealmente como función de ε_b , mientras que los niveles correspondientes al punto cuántico derecho decrecen con respecto al voltaje. Los niveles asociados al punto cuántico central exhiben un comportamiento prácticamente constante, manifestándose como líneas paralelas al eje ε_b , con valores $E = 0, \hbar\omega, 2\hbar\omega, \dots$. Observamos también el cruce entre los niveles de energías asociados a los puntos cuánticos izquierdo y derecho, los cuales ocurren en valores de múltiplos de $\hbar\omega$, $\varepsilon_b \simeq n\hbar\omega$, donde n es un entero positivo definido *i.e.* $n = 0, 1, 2, \dots$. Para el caso particular de $\varepsilon_b \simeq 2\hbar\omega$, el cruce casi coincide con el nivel de energía del punto central.

Para valores de $V_0 \neq 0$ los puntos cuánticos ya no están completamente desacoplados, y la dinámica de los eigenvalores como función de ε_b es más compleja. En la figura 13 (a) observamos el espectro de energías para el sistema discutido en la figura 10, el cual corresponde a un valor de $V_0 = 0.5$ ($T_{l,r} \sim 0.07$). El primer efecto que observamos en el espectro de eigenvalores debido al acoplamiento de los puntos cuánticos es el

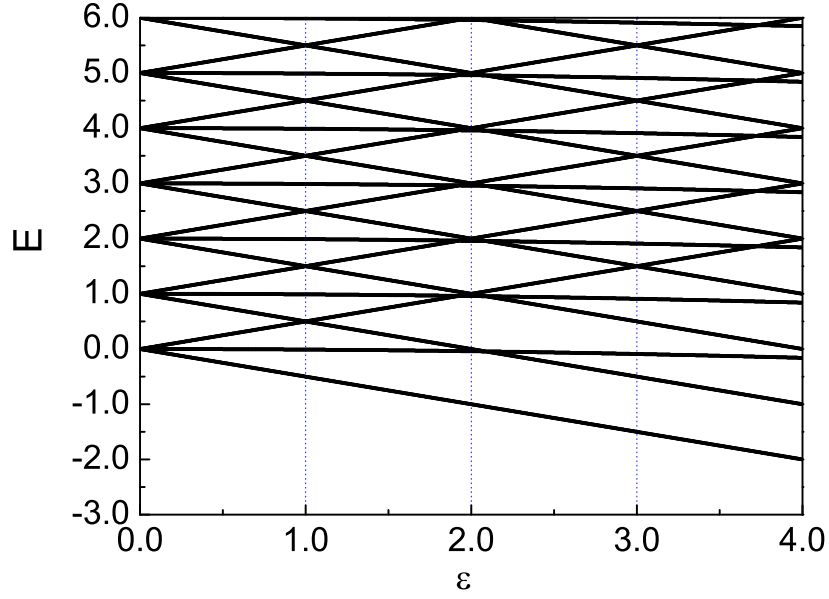


Figura 12. Eigenenergías, E , para un TDQS con puntos cuánticos desacoplados como función de ε_b para los valores de los parámetros $\{V_0; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0; 5.0; 0.05; 0.4\}$, considerando $N = 9$ estados de oscilador y frecuencia $\omega = 1$.

levantamiento de la triple degeneración de los estados para $\varepsilon_b \simeq 0$. Otro de los efectos que se observa en la figura 13 (a) es que, a diferencia de lo que ocurre en la dinámica para $V_0 = 0$, en donde los niveles de energía se cruzan, en el caso con $V_0 \neq 0$ los niveles de energía se repelen, esto es, exhiben anti-cruces. Cuando nos alejamos de las zonas donde ocurre este fenómeno, los niveles de energía se comportan en forma similar al de los puntos cuánticos desacoplados discutido líneas arriba. La repulsión de niveles no solo depende fuertemente del parámetro V_0 , sino también de los estados asociados al oscilador, los cuales son responsables de un acoplamiento más intenso entre los puntos cuánticos. Es preciso distinguir los dos tipos de anti-cruces que aparecen en la figura 13 (a), pues estos poseen distintas interpretaciones físicas: (i) los anti-cruces impares (indicados con un círculo rojo), los cuales aparecen en $\varepsilon_b \simeq n\hbar\omega$ ($n = 0, 2, 4, \dots$) y

(ii) los anti-cruces pares (indicados por un cuadro rojo), los cuales aparecen en $\varepsilon_b \simeq p\hbar\omega$ ($p = 1, 3, 5, \dots$). En los anti-cruces impares, los niveles de energía de los puntos cuánticos izquierdo y derecho se mezclan, mientras que en los anti-cruces pares, los niveles asociados con el punto cuántico central se mezclan primero con los niveles del punto cuántico izquierdo, y luego lo hacen con el derecho, en un pequeño intervalo de ε_b (zona indicada por el cuadro rojo). En general los anti-cruces para los casos pares e impares conducirán a una fuerte mezcla entre los diversos estados del oscilador, ya sean aquellos asociados al punto cuántico derecho e izquierdo, o a la combinación de estos dos con el punto cuántico central. La mezcla de estos niveles de energía implica que los electrones se encontrarán fuertemente deslocalizados (o no localizados) en la vecindad de los anti-cruces, lo cual favorece un incremento de la corriente electrónica a través del dispositivo.

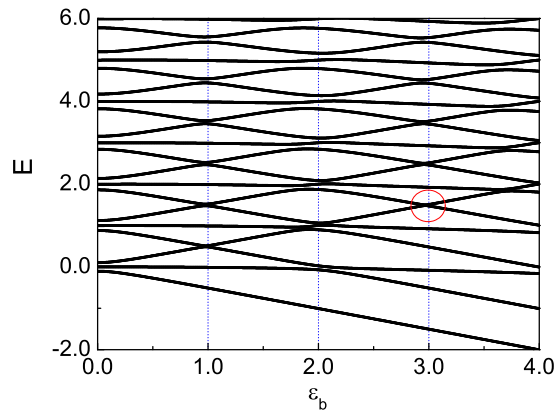


Figura 13. (a) Eigenenergías, E , para un TDQS como función de ε_b para los valores de los parámetros $\{V_0; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0.5; 5.0; 0.05; 0.4\}$, considerando $N = 9$ estados de oscilador y frecuencia $\omega = 1$. Con círculos y rectángulos rojos hemos indicado algunos de los anti-cruces impares y pares, respectivamente.

VI.1.3 El efecto del acoplamiento con los contactos y el entorno

A continuación estudiaremos los efectos sobre la corriente electrónica debidos al acoplamiento del punto cuántico con los contactos y con el entorno. Como lo mencionamos al principio de este capítulo, el sistema consiste de tres puntos cuánticos acoplados a contactos situados a la derecha y la izquierda del sistema, con una intensidad de acoplamiento constante dada por el parámetro Γ . El sistema también está acoplado a un entorno disipativo, en donde el parámetro γ_d nos provee de una medida de la intensidad de dicho acoplamiento, también conocido como parámetro de amortiguamiento.

En la figura 14 analizamos el efecto del parámetro Γ en la corriente electrónica del TDQS para un sistema con los parámetros utilizados en el trabajo de Donarini (2004). Para un valor del acoplamiento $\Gamma = 0.05$ (línea roja a puntos), podemos observar que se forma el patrón familiar de resonancias mecánicas analizado en las secciones anteriores, con un valor pequeño de la intensidad. Si incrementamos el acoplamiento con los contactos a un valor de $\Gamma = 0.1$ (línea azul a trazos), notamos que existe un incremento en la intensidad de la corriente I , debido a que estamos incrementando el flujo de electrones que ingresa al sistema. En este caso particular, el parámetro Γ es del orden del tuneo entre el punto central y los puntos izquierdo y derecho $T_{l,r} \sim V_0 e^{-\alpha x_0} \simeq 0.12$. Este mismo comportamiento se observa para el caso con $\Gamma = 0.2$ (línea negra sólida), en donde la corriente ha alcanzado un máximo relativo de intensidad con respecto a los casos con acoplamientos de menor intensidad. Es importante señalar que nuestros resultados coinciden con los obtenidos en el trabajo de Donarini (2004), quien utiliza un enfoque numérico basado en el método de Arnoldi (consultar los trabajos de Eirola y Nevanlinna (2003) y Golub y Loan (1996)) para obtener la solución estacionaria de

las ecuaciones maestras. Cabe mencionar que dicho enfoque conduce a dificultades de cálculo computacional, o como lo afirma Donarini, el problema se convierte en “un reto numérico”.

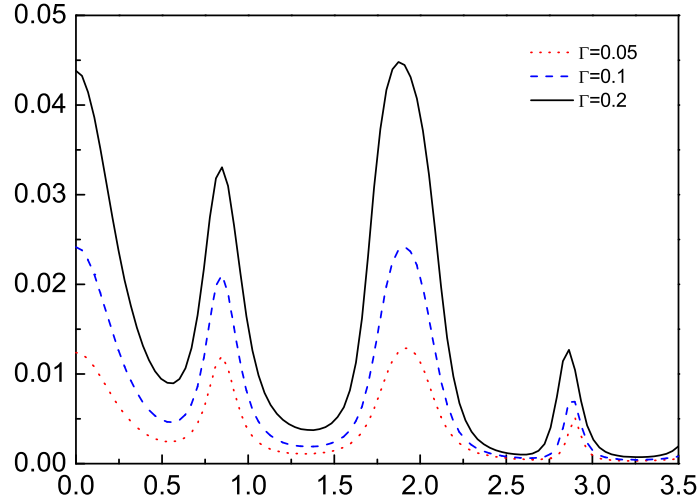


Figura 14. Corriente electrónica I en un TDQS como función del voltaje de compuerta ε_b para distintos valores del acoplamiento con los contactos, Γ . Se consideran los parámetros del sistema $\{V_0; \gamma_d; x_0; \alpha\} = \{0.5; 0.0757; 7.071; 0.2\}$, con $\Gamma = 0.2$ (línea negra sólida), $\Gamma = 0.1$ (línea azul a trazos) y $\Gamma = 0.05$ (línea roja a puntos). En el presente cálculo hemos considerado $N = 16$ estados de oscilador y una frecuencia $\omega = 1$. Nuestros resultados concuerdan con los presentados en el trabajo de Donarini (2004).

A continuación analizaremos el efecto sobre la corriente I del acoplamiento con el entorno, el cuál está caracterizado por el parámetro de amortiguamiento, γ_d . Primero discutiremos por qué es importante que nuestro TDQS esté inmerso en un entorno que puede absorber la energía del oscilador que caracteriza al transbordador. Cuando los electrones son transferidos del contacto hacia el punto cuántico central (elemento transbordador), este último experimenta una fuerza electrostática que excita al oscilador; dicho de otra manera, en los modelos de transbordar cuántico el oscilador es sometido

a una interacción de naturaleza electrostática. Si el oscilador gana continuamente energía con este tipo de interacción electrostática, puede ocurrir que no logre alcanzar un estado estacionario. Es por esta razón que el entorno en el cual está embebido el TDQS es un baño de fonones, cuya finalidad es absorber la energía continuamente inyectada al oscilador por el flujo de electrones que entra al sistema. En la figura 15 vemos el efecto sobre la corriente electrónica I al variar el parámetro γ_d en un sistema de transbordador de triple punto cuántico con parámetros $V_0 = 0.5$, $\Gamma = 0.05$, $x_0 = 5.0$, y $\alpha = 0.2$. En este caso notamos que las variaciones del parámetro γ_d , afectan de manera “selectiva” la intensidad de los picos de corriente, y depende fuertemente en qué valor de ε_b analicemos la corriente. Mientras la primera y la segunda resonancia no se ven afectadas ante incrementos de γ_d , ocurre un incremento de la intensidad en el tercer pico ($\varepsilon_b \simeq 2.0$), así como una reducción en el cuarto ($\varepsilon_b \simeq 3.0$).

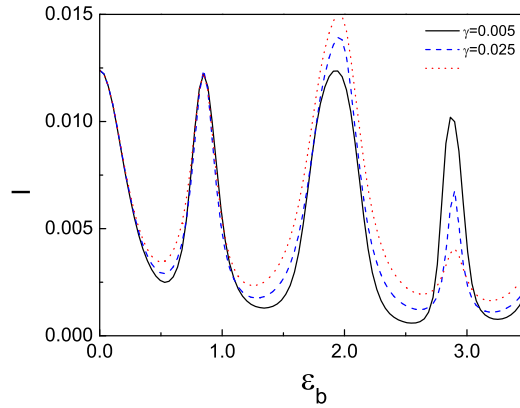


Figura 15. Corriente electrónica I en un TDQS como función del voltaje de compuerta ε_b para distintos valores del acoplamiento con los contactos, γ_d . Se consideran los parámetros del sistema $\{V_0; \Gamma; x_0; \alpha\} = \{0.5; 0.05; 5.0; 0.2\}$, con $\gamma_d = 0.005$ (línea negra sólida), $\gamma_d = 0.025$ (línea azul a trazos) y $\gamma_d = 0.05$ (línea roja a puntos). En el presente cálculo hemos considerado $N = 10$ estados de oscilador y una frecuencia $\omega = 1$. Nuestros resultados concuerdan con los presentados en el trabajo de Armour y MacKinnon (2002).

VI.2 Transbordador cuántico en presencia de un campo eléctrico oscilante

En esta sección se presenta una de las principales aportaciones de este trabajo de tesis: el estudio de las propiedades de la corriente electrónica en un TDQS en presencia de un campo eléctrico ac, con base en una descripción completamente cuántica del grado de libertad mecánico. El problema consiste en aplicar un voltaje ac cosenoidal dependiente del tiempo, $V(t) = V_{ac} \cos \omega_{ac} t$, de intensidad V_{ac} y frecuencia ω_{ac} , entre el primer y el tercer punto cuántico, como se ilustra en la figura 7. Utilizando el enfoque de la matriz de densidad reducida presentado en el capítulo IV, se demuestra cómo las resonancias en la corriente electrónica en el TDQS son producidas mediante combinaciones de bandas fonónicas y fotónicas. En otras palabras, este voltaje dependiente del tiempo es responsable de que los niveles de oscilador ya existentes en un sistema TDQS se subdividan aún más, agregando así más canales de conducción. Estos nuevos canales de conducción se manifiestan en resonancias adicionales en las curvas de la corriente I_{ac} como función del voltaje de compuerta ε_b , y se encuentran además unas relaciones de suma que explican dichas estructuras. Los nuevos efectos observados en la corriente dependen de la razón entre la frecuencia del campo ac y de la frecuencia natural del sistema, ω . De este modo, mediante la sintonización de la frecuencia ac podemos obtener información acerca de la frecuencia vibracional del oscilador.

Desde el punto de vista computacional, el estudio de las propiedades de la corriente en un TDQS bajo los efectos de un voltaje oscilante le agrega un grado más de complejidad a la solución numérica del problema. Esto se debe a que ahora, al tener una componente dependiente del tiempo, es necesario resolver las Ecuaciones Maestras dependientes del tiempo, y calcular el promedio de la corriente electrónica resultante

medida en el punto cuántico derecho, esto es, $I_{ac} = e\Gamma\Sigma_i[\rho_{rr}^{ii}]_{av}$.

Los resultados de nuestro estudio se presentan en dos subsecciones. En la subsección VI.2.1 exploramos las propiedades o características más importantes de la corriente electrónica en el TDQS. En la subsección VI.2.2 estudiamos el fenómeno de destrucción coherente del tuneo (CDT, por sus siglas en inglés).

VI.2.1 La corriente electrónica en presencia de un voltaje ac

En esta subsección exploraremos las características principales de la corriente I_{ac} para el TDQS sometido a un voltaje ac. Hemos considerado un acoplamiento débil entre los tres puntos cuánticos, el cual es un régimen caracterizado por valores grandes de α . Comenzamos nuestro análisis explorando I_{ac} como función del voltaje de compuerta, ε_b , para diferentes valores de los parámetros ac; todos los cálculos se realizan en unidades de $\hbar = 2m = \omega = e = 1$.

En la figura 16 se presentan los efectos del voltaje ac en un TDQS con parámetros del sistema $V_0 = 0.5$, $\Gamma = 0.05$, $\gamma_d = 0.025$, $x_0 = 5.0$, $\alpha = 0.4$, donde se incluyen $N = 9$ estados de oscilador. Los parámetros del voltaje ac son $V_{ac} = 0.5$ y $\omega_{ac} = 0.5$. En la corriente I_{ac} como función del voltaje de compuerta ε_b (línea negra sólida), es posible distinguir el patrón característico de resonancias mecánicas, similares a las exhibidas por un sistema de TDQS sin ac (línea roja a trazos). Sin embargo, notamos la aparición de nuevas resonancias en los múltiplos de la frecuencia del voltaje ac, ω_{ac} . Estas resonancias están asociadas con los nuevos canales de conducción inducidos por el voltaje ac.

En la figura 16 hemos considerado un caso en donde la frecuencia natural del sistema $\omega = 1$ es un múltiplo entero de la frecuencia ω_{ac} , *i.e.*, $\omega = 2\omega_{ac}$. Como lo descubriremos

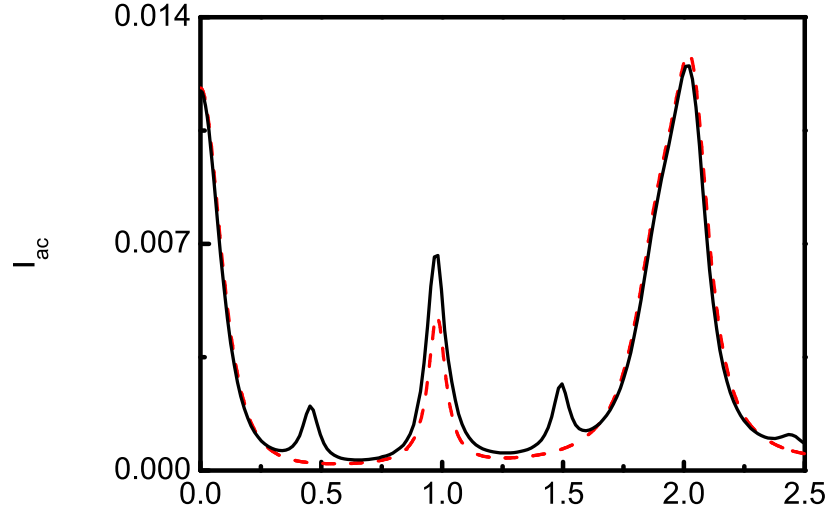


Figura 16. Resonancias de la corriente electrónica I_{ac} en un TDQS como función del voltaje de compuerta ε_b en presencia de un voltaje oscilante, en el régimen de acoplamiento débil. Los parámetros del sistema son: $\{V_0; \gamma_d; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0.5; 0.025; 5.0; 0.05; 0.4\}$, considerando $N = 9$ estados de oscilador y una frecuencia $\omega = 1$. Los parámetros ac están dados por: $V_{ac} = 0.5$ y $\omega_{ac} = 0.5$. Observamos que además de las resonancias que aparecen en el típico TDQS sin ac (línea roja a trazos), el voltaje ac produce la aparición de nuevas resonancias (canales de conducción) en la corriente electrónica I_{ac} (línea negra sólida), los cuales ocurren aproximadamente en valores de ε_b que son múltiplos enteros de la frecuencia $\omega_{ac} = 0.5$.

más adelante, la elección de la proporción entre las frecuencias características resulta adecuada, pues nos permitirá realizar un análisis cualitativo de las resonancias utilizando diagramas de energía de los puntos cuánticos individuales en presencia de los niveles del oscilador armónico y los inducidos por el voltaje ac. En efecto, el voltaje dependiente del tiempo origina una subdivisión de los niveles del oscilador ya existentes, agregando así más canales de conducción. De esta forma podemos imaginar que en cada punto cuántico individual existen dos escaleras de niveles de energía superpuestos: la del oscilador, con niveles separados en $\hbar\omega$, y la inducida por el voltaje ac, con niveles separados en $\hbar\omega_{ac}$. Al imponer la condición $\omega = p\omega_{ac}$, donde p es un número entero,

estamos garantizando que entre cada nivel de oscilador exista un número entero de estados inducidos por el voltaje ac, a los que llamaremos simplemente *estados ac*.

En los estudios de la corriente que realizaremos a continuación nos enfocaremos en transbordadores cuánticos en donde se cumple la condición mencionada. En la figura 17 (a) graficamos la corriente I_{ac} promediada en el tiempo (línea azul sólida) para un valor particular de la razón de los parámetros ac, $\xi = (V_{ac}/2\omega_{ac}) = 3.0$, donde $\omega = p\omega_{ac}$ (p entero). En este caso se incluyeron $N = 6$ estados de oscilador. Con respecto a esta elección particular del número de estados de oscilador es preciso aclarar que para el rango de valores del voltaje de compuerta ε_b considerados en nuestros cálculos, hemos verificado numéricamente que el incluir más estados de oscilador no cambia significativamente las características de la corriente para parámetros típicos del sistema.

En la figura 17 podemos apreciar una estructura mucho más rica para la corriente que en el caso sin ac (línea roja a trazos). Encontramos una serie de picos o máximos que aparecen en valores específicos de ε_b , los cuales son múltiplos enteros de ω_{ac} y que obedecen las siguientes reglas de suma:

$$\varepsilon_b + \nu\hbar\omega_{ac} = n\hbar\omega, \quad (74)$$

$$(\varepsilon_b/2) + \nu\hbar\omega_{ac} = n\hbar\omega. \quad (75)$$

Aquí n corresponde al nivel vibracional en el que termina el electrón transmitido en el punto cuántico derecho y ν al número de fotones emitidos o absorbidos necesarios para alcanzar ese nivel vibracional. Los picos que satisfacen la regla de suma de la ecuación (74) están localizados en un valor de ε_b igual a un múltiplo impar de ω_{ac} y son

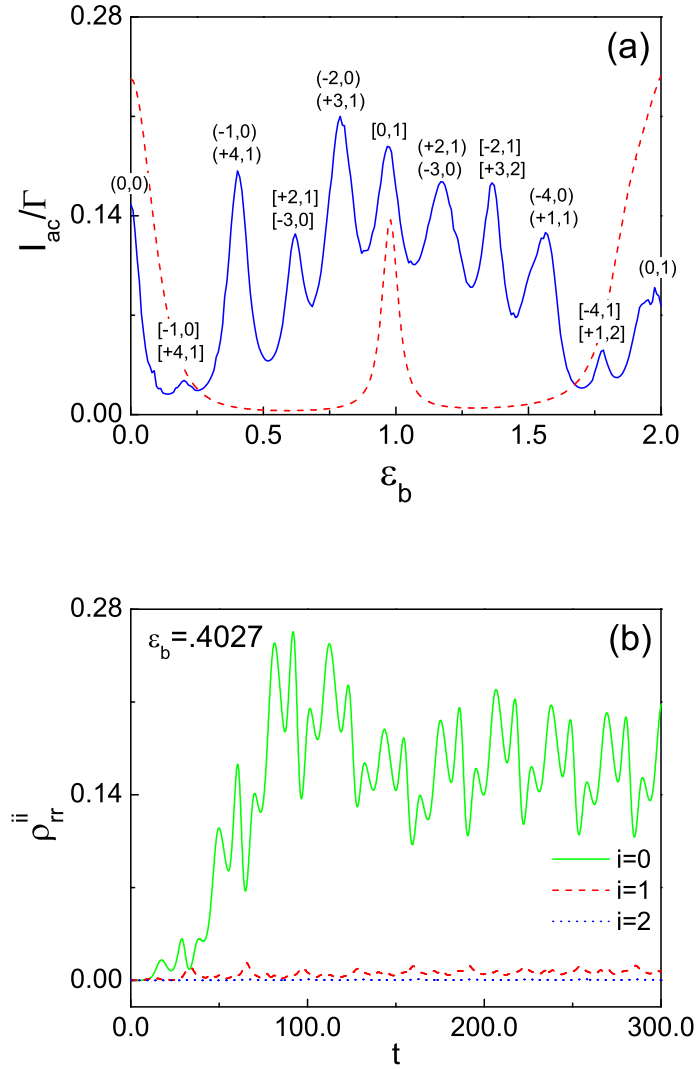


Figura 17. (a) I_{ac} (en unidades de Γ) versus ε_b (línea azul sólida) para los parámetros ac $\omega_{ac} = 0.2$, y $V_{ac} = 1.2$, y valores típicos de los parámetros $\{V_0; \gamma_d; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0.5; 0.01; 5.0; 0.05; 0.4\}$. La línea roja a trazos corresponde a I_{ac} en el caso sin campo eléctrico. Los picos ac de corriente están etiquetados con $[\nu, n]$ y (ν, n) , asociados con las reglas de suma dadas por las ecuaciones (74) y (75), respectivamente. En (b) mostramos las probabilidades de ocupación del punto cuántico de la derecha ρ_{rr}^{ii} , para $i = 0$ (línea verde sólida), $i = 1$ (línea roja a trazos) e $i = 2$ (línea azul punteada), como función del tiempo, correspondiente al pico de corriente en $\varepsilon_b \simeq 0.4$.

identificados por $[\nu, n]$. Éstos corresponden a una alineación entre bandas de tuneleo asistidas por fotones de los estados vibracionales del resonador de los puntos izquierdo y

derecho. Como en el caso sin ac, estos picos se suprimen en el régimen de acoplamiento muy bajo. Los picos que satisfacen la regla de suma de la ecuación (75) y que están localizados en múltiplos pares de ω_{ac} son identificados por (ν, n) y corresponden a la alineación de los niveles de los tres puntos cuánticos.

En resumen, los picos de la corriente se pueden dividir en múltiplos pares e impares de la frecuencia del voltaje ac. Hay una regla de suma distinta para cada familia de picos. Al igual que en el caso sin ac, existen dos mecanismos distintos de conducción de corriente: en el primero, descrito por una de las reglas de suma, hay una alineación de los niveles de energía (ya sean de oscilador o de campo ac) de los tres puntos cuánticos que permiten la conducción, con el correspondiente pico en la corriente. El segundo mecanismo, descrito por la segunda regla de suma, es aquel en donde solo un nivel (de oscilador o de ac) del primer punto se alinea con uno del tercer punto (sin que haya un nivel alineado del punto central) y se genera un pico en la corriente cuando el traslape de las funciones de onda es suficientemente grande (gracias al valor del tuneleo).

Las reglas de suma, dadas por las ecuaciones (74) y (75), pueden ser estudiadas a partir de diagramas de energías. Por ejemplo, consideremos el caso $\varepsilon_b = 0$ de la figura 17 (a) el cual se presenta esquemáticamente en la figura 18. El diagrama muestra a los niveles de energías de los puntos cuánticos izquierdo (L), derecho (R) y central (C), en donde podemos identificar las escaleras de niveles que mencionamos líneas arriba. Alrededor de los niveles de energía que representan a los puntos cuánticos (línea negra sólida), podemos observar las escaleras de los estados asociados al oscilador (espaciados $\hbar\omega = 1$) (línea negra a trazos) y los estados ac (espaciados $\hbar\omega_{ac} = 0.2$) (línea azul a trazos). El pico de corriente para $\varepsilon_b = 0$ que se muestra en la figura 17 (a) posee la etiqueta $(\nu, n) = (0, 0)$, lo cual se traduce en nuestro diagrama en una alineación exacta entre los niveles de los tres puntos cuánticos. Resulta claro de la figura que para

acceder al estado de oscilador $n = 0$ del punto cuántico de la derecha, no se emitieron ni absorbieron fotones durante el proceso.

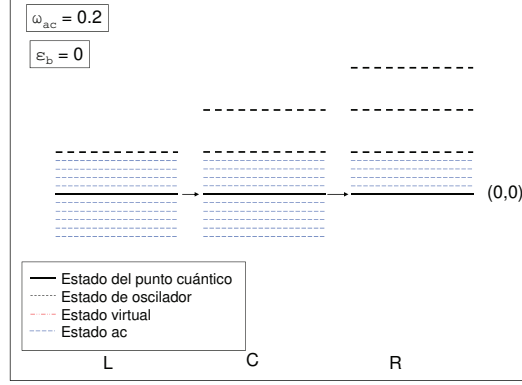


Figura 18. Representación esquemática de los niveles de energía de un TDQS sujeto a un voltaje ac. En el diagrama se muestran los niveles de energía de los puntos cuánticos izquierdo (L), derecho (R) y central (C), para el caso $\varepsilon_b = 0$ de la figura 17 (a). Los niveles correspondientes a la energía de cada punto cuántico se indican con una línea negra sólida. La escalera de niveles de oscilador exhibe un espaciamiento de $\hbar\omega = 1$ (línea negra a trazos) y la escalera de niveles ac un espaciamiento $\hbar\omega_{ac} = 0.2$ (línea azul a trazos). La resonancia en este caso se debe a una alineación exacta de todos los niveles, en un proceso que no involucra la emisión o absorción de fotones y que conduce a la etiqueta $(\nu, n) = (0, 0)$.

El caso $\varepsilon_b = 0.2$ de la figura 17 (a) se presenta esquemáticamente en la figura 19. El pico de corriente para $\varepsilon_b = 0.2$ posee las etiquetas $[\nu, n] = [+4, 1]$ y $[\nu, n] = [-1, 0]$, las cuales se explican en nuestro diagrama con la ayuda de un *estado virtual* (línea roja a doble punto y trazo) mediante el proceso que explicaremos a continuación. En la figura 19 se presenta una secuencia de pasos en donde primero el electrón salta del nivel de energía del punto cuántico izquierdo, a un nivel virtual en el punto cuántico central. A partir de ese nivel virtual, el electrón puede acceder al punto cuántico a la derecha, ya sea al primer nivel de oscilador ($n = 0$) (mediante la emisión de 1 fotón) o bien, al segundo nivel de oscilador ($n = 1$) (mediante la absorción de 4 fotones). Estos procesos, conducen a las etiquetas $[-1, 0]$ y $[+4, 1]$, respectivamente. En general, las resonancias

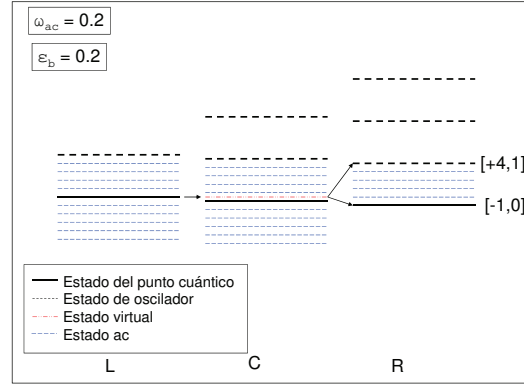


Figura 19. Representación esquemática de los niveles de energía de un TDQS sujeto a un voltaje ac. En el diagrama se muestran los niveles de energía de los puntos cuánticos izquierdo (L), derecho (R) y central (C), para el caso $\varepsilon_b = 0.2$ de la figura 17 (a). Los niveles correspondientes a la energía de cada punto cuántico se indican con una línea negra sólida. La escalera de niveles de oscilador exhibe un espaciamiento de $\hbar\omega = 1$ (línea negra a trazos) y la escalera de niveles ac un espaciamiento $\hbar\omega_{ac} = 0.2$ (línea azul a trazos). El proceso mediante el cuál el electrón es transmitido a un nivel del punto cuántico a la derecha involucra un *estado virtual* (línea roja a doble punto y trazo) en el punto cuántico central. Ver texto.

caracterizadas por las etiquetas $[\nu, n]$ pueden describirse mediante este proceso, *i.e.*, en donde el electrón salta desde el estado base del punto cuántico izquierdo hacia un estado virtual alineado con éste en el punto cuántico central, a partir del cual salta a un estado n de oscilador en el punto cuántico derecho (mediante la emisión o absorción de ν fotones). Este sería también el caso *e.g.* para la resonancia en $\varepsilon_b = 1.0$ en la figura 17 (a).

Otro caso de interés es el de la resonancia en $\varepsilon_b = 2.0$ de la figura 17 (a), el cual analizamos en la figura 20. El pico de corriente para $\varepsilon_b = 2.0$ posee la etiqueta $(\nu, n) = (0, 1)$, la cual se explica en nuestro diagrama mediante un proceso distinto al utilizado para las resonancias etiquetadas con $[\nu, n]$. En la secuencia de pasos que se muestra en el diagrama de la figura 20, el electrón salta del nivel de energía del punto

cuántico izquierdo, al nivel más bajo de energía de oscilador ($n = 0$) del punto cuántico central. A partir de ese nivel, el electrón puede acceder a los estados de oscilador del punto cuántico a la derecha mediante la emisión o absorción de fotones. En este caso, el evento más probable resulta ser aquel en donde el electrón salta al nivel de oscilador $n = 1$ del punto cuántico a la derecha, sin emitir o absorber fotones. Estos procesos conducen a la etiqueta $(0, 1)$ (aunque existen más etiquetas posibles, éstas están asociadas a transiciones menos probables). En general, las resonancias caracterizadas por las etiquetas (ν, n) pueden describirse mediante este proceso.

Para corroborar aún más la etiquetación realizada, calculamos las probabilidades de ocupación para el punto cuántico derecho ρ_{rr}^{ii} , las cuales determinan I_{ac} . En la figura 17 (b) presentamos los resultados correspondientes al pico en $\varepsilon_b \simeq 0.4$ [con etiquetas

$(-1, 0)$, $(+4, 1]$, donde claramente podemos ver que la contribución más importante proviene de ρ_{rr}^{00} . Similarmente, para todas las resonancias hemos verificado que la contribución más importante viene de la transición con el menor número de fotones, lo cual es consistente con una baja intensidad del campo ac.

Antes de continuar con nuestro análisis de la corriente electrónica, es importante aclarar que los argumentos que hemos utilizado para afirmar que los diferentes picos en la corriente están asociados a los tuneleos asistidos por la emisión o absorción de ν fotones, pueden sustentarse con los resultados presentados en el capítulo IV. Específicamente, nos referimos a los resultados obtenidos después de realizar una transformación unitaria del hamiltoniano del sistema de TDQS, lo cual nos condujo esencialmente a una renormalización de los tuneleos, esto es, $\tilde{T}_l = T_l \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} (-1)^\nu J_\nu(\xi) e^{i\omega_{ac}\nu t}$, y $\tilde{T}_r = T_r \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} (-1)^\nu J_\nu(\xi) e^{-i\omega_{ac}\nu t}$. Los tuneleos pues, se renormalizan a una suma de funciones de Bessel de orden ν , en donde ν es el número de fotones emitidos o absorbidos. En la expresión para los tuneleos renormalizados, aparece en forma natural el argumento de las funciones de Bessel, dado por el parámetro $\xi = (V_{ac}/2\omega_{ac})$, el cual se introdujo al inicio de nuestro análisis de la corriente. Como veremos más adelante, dicho parámetro será de gran importancia para caracterizar otras propiedades de la misma.

VI.2.2 Destrucción coherente del tuneleo en transbordadores cuánticos

En la figura 21 graficamos la corriente electrónica I_{ac} vs ε_b para un TDQS con parámetros típicos y con los parámetros ac dados por $\omega_{ac} = 0.2$ y $V_{ac} = 0.96192$. Encontramos en este caso el patrón de resonancias en la corriente (línea negra sólida), el cual puede ser

etiquetado en la misma forma que los casos anteriores. Sin embargo, ocurre un efecto importante en la intensidad de la corriente electrónica para valores muy específicos del voltaje de compuerta. Los picos correspondientes a $\varepsilon_b \simeq 0, 2.0$, exhiben una disminución drástica de su intensidad, al ser comparados con el caso sin voltaje ac (línea roja a trazos). El efecto resulta algo sorprendente debido a que, no obstante que las resonancias para estos casos poseen etiquetas $(0, 0)$ y $(0, 1)$, las cuales están relacionadas con el tipo de alineaciones de los niveles energéticos discutidos en las figuras 18 y 20, en este caso las resonancias se ven disminuidas en intensidad. La disminución de la intensidad de estas resonancias se debe a que nuestra elección de parámetros ac nos conduce a un valor de $\xi = 2.4048$, el cual corresponde a uno de los ceros de la función de Bessel, *i.e.*, $J_0(\xi) = 0$, asociada a los procesos que involucran $\nu = 0$ fotones. Dicho de otra manera, las resonancias asociadas a los valores de voltaje de compuerta $\varepsilon_b \simeq 0, 2.0$, están fuertemente gobernadas por procesos que no involucran la emisión o absorción de fotones ($\nu = 0$) ó procesos de túnel directo. Como $J_0(\xi = 2.4048) = 0$, estos canales de tuneo se ven cancelados. A este fenómeno se le conoce como destrucción coherente del tuneo (ó CDT por sus siglas en inglés).

El fenómeno de CDT resulta un mecanismo efectivo para la supresión de resonancias mediante la simple sintonización de los parámetros del voltaje ac. Esto es, podemos explotar las propiedades analíticas de las funciones de Bessel para manipular las propiedades de la corriente electrónica, a través de los parámetros del campo externo, en dispositivos de transbordador cuántico.

En la siguiente sección abordaremos con más detalle el problema de la destrucción coherente de tuneo, mediante el formalismo de Floquet adaptado a sistemas de transbordadores cuánticos.

En este trabajo de tesis estamos interesados particularmente en explorar el espectro de las eigenenergías del hamiltoniano de Floquet (cuasienergías) como función de los parámetros del campo externo ac. El estudio de las cuasienergías es importante para entender algunos de los aspectos del fenómeno conocido como *destrucción coherente del tuneleo* (CDT, por sus siglas en inglés), que consiste en la anulación del tuneleo para valores particulares de los parámetros del campo ac, *i.e.*, la intensidad V_{ac} y la frecuencia ω_{ac} .

El objetivo principal es el de explorar las condiciones para la aparición del CDT en un sistema de transbordador de triple punto cuántico oscilante. El estudio numérico se realiza mediante la diagonalización numérica del hamiltoniano de Floquet representado en la base compuesta de los puntos cuánticos ($|l\rangle, |c\rangle, |r\rangle$), del oscilador ($i, j = 0, 1, 2, \dots, N$) y de las funciones periódicas de t con período $\tau = (2\pi/\omega_{ac})$, tal como se explica en la sección V.2. Los elementos de matriz en esta representación compuesta están dados por la ecuación (67). La cuasienergías del TDQS son entonces analizadas como función del parámetro de compuerta, ε_b , para distintos valores del campo oscilante ac. En el estudio de las propiedades del espectro de cuasienergías como función de ε_b destacamos dos casos de interés: (i) el caso simétrico (cuando $\varepsilon_b = 0$), y (ii) el caso asimétrico ($\varepsilon_b \neq 0$). En el primer caso, debido a la simetría del sistema, existe una invariancia ante una transformación generalizada de paridad y, de esta forma, encontramos expresiones analíticas que describen las propiedades de simetría de los coeficientes de Fourier de los estados de Floquet. Con base en dichas expresiones, se muestra explícitamente que en la región cercana a donde ocurre CDT, existen cruces en el espectro de cuasienergías correspondientes a eigenestados de Floquet con paridad opuesta. En el caso dinámico se obtiene que el comportamiento de las cuasienergías depende fuertemente de si ε_b es un múltiplo par o impar de la frecuencia ac aplicada al sistema, ω_{ac} .

Los resultados para el estudio de Floquet se presentan en dos subsecciones. En la subsección VI.3.1 estudiamos las propiedades o características más importantes de las cuasienergías en sistemas de TDQS asimétricos ($\varepsilon_b \neq 0$). En la subsección VI.3.2 estudiaremos las cuasienergías en sistemas simétricos ($\varepsilon_b = 0$) y realizaremos un análisis de los eigenestados del sistema con base a la paridad de los estados de Floquet.

VI.3.1 Análisis de Floquet para el caso asimétrico

A continuación exploraremos la corriente electrónica y el espectro de cuasienergías para un TDQS excitado por un campo oscilante ac, enfocados a explorar principalmente el fenómenos de CDT. En todos nuestros cálculos usamos unidades de $\hbar = 2m = e = 1$.

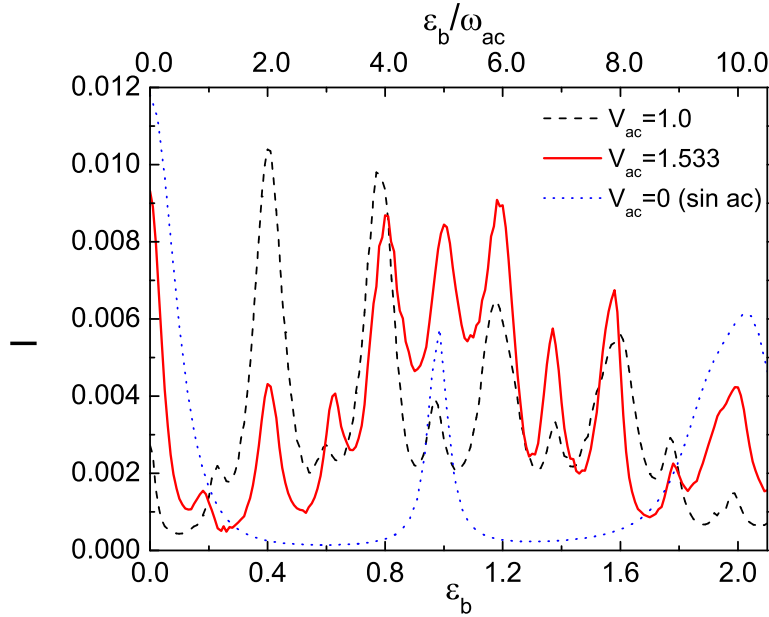


Figura 22. I versus ε_b para un TDQS con parámetros ac $\omega_{ac} = 0.2$, $V_{ac} = 1.0$ (línea negra a trazos), $V_{ac} = 1.533$ (línea roja sólida) y valores típicos de los parámetros del sistema $\{V_0; \gamma; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0.5; 0.01; 5.0; 0.05; 0.4\}$. Incluimos también el caso de la corriente sin ac ($V_{ac} = 0$, línea azul a puntos). El fenómeno de CDT se manifiesta en una reducción de las intensidad de las resonancia en $\varepsilon_b = 0.4$ (línea roja sólida), lo cual es consistente con el hecho de que para el valor de $V_{ac} = 1.533$ en este caso nos conduce a $\xi = 3.8325$, que corresponde al primer cero de $J_1(\xi)$.

En la figura 22 (a) presentamos la corriente electrónica I como función del voltaje de compuerta ε_b , en donde obtenemos el patrón distintivo de resonancias en múltiplos pares e impares de la frecuencia ac, ω_{ac} . Como lo mostramos en la subsección VI.2.1, las posiciones de los picos obedecen las reglas de suma dadas por las ecuaciones (74) y (75) que conducen respectivamente a las etiquetas $[\nu, n]$ y (ν, n) , que indican el número de fotones (ν) emitidos o absorbidos durante el proceso de tuneleo, así como el estado final (n) de oscilador al que acceden los electrones en el punto cuántico de la derecha. En la figura 22 (a) se presentan los resultados para la corriente para dos valores de la intensidad del campo ac, V_{ac} . Para el caso $V_{ac} = 1$ (línea negra a trazos), notamos que aparecen resonancias en valores de ε_b que son múltiplos enteros de ω_{ac} . El origen de estas resonancias puede entenderse con ayuda de los diagramas presentados en la subsección VI.2.1. Veamos a continuación bajo qué condiciones el sistema exhibe el fenómeno de CDT. El pico de corriente que aparece en $\varepsilon_b = 0.4$ (con $\omega_{ac} = 0.2$) (figura 22 (a)), corresponde a un proceso en donde ocurre la emisión de $\nu = 1$ fotones, y donde $n = 0$ es el estado final del oscilador, esto es, una de las etiquetas que lo describe es $(1, 0)$. Si calculamos la corriente para el valor $V_{ac} = 1.533$ (línea roja sólida), con los demás parámetros del sistema fijos, logramos una configuración del sistema en donde la razón $\xi = 3.832$, la cual corresponde al primer cero de la función de Bessel $J_1(\xi)$, observamos precisamente una disminución notable del pico en $\varepsilon_b = 0.4$. Este es el fenómeno de destrucción coherente del tuneleo en nuestro transbordador de triple punto cuántico. Adicionalmente, notamos que ocurre lo contrario para la resonancia localizada en $\varepsilon_b = 1$, pues el pico correspondiente al caso $V_{ac} = 1$ (línea negra sólida) es pequeño en comparación con el del caso $V_{ac} = 1.533$ (línea roja sólida). El resultado observado se debe a que este pico corresponde a $\nu = 0$ y $n = 1$, y el valor de $V_{ac} = 1.0$ está muy cercano al primer cero de $J_0(\xi)$, el cual ocurre para $V_{ac} = 0.96192$ (que

corresponde a $\xi = 2.4048$). Volveremos a este punto más adelante, cuando analicemos las propiedades del espectro de cuasienergías del sistema. Otro efecto digno de destacar en la figura 22 (a) es la reducción de los picos en valores $\varepsilon_b = 1.6$ y $\varepsilon_b = 2.0$ para el caso $V_{ac} = 1$ (línea negra a trazos). De acuerdo a las reglas de suma, estas resonancias corresponden a $\nu = 4$ y $\nu = 5$ fotones emitidos, respectivamente, *i.e.*, los tuneleos entre los puntos cuánticos se renormalizan por las funciones de Bessel $J_4(\xi)$ y $J_5(\xi)$, las cuales son pequeñas ($\lesssim 10^{-2}$) para el valor dado de $V_{ac} = 1.0$ (ó $\xi = 2.5$).

A continuación presentaremos un caso en donde manipularemos los parámetros ac para eliminar de manera efectiva las resonancias mecánicas que aparecen en los valores $\varepsilon_b = 0$ y 2.0 . Esto se ilustra en la figura 23 en donde graficamos la corriente I como función del voltaje de compuerta ε_b . Vemos inmediatamente que en el caso de la corriente sin el campo ac (línea azul a puntos), aparecen dos resonancias bien definidas en los valores de 0 y 2.0 , las cuales corresponden a una alineación entre los niveles de las bandas vibracionales de los tres puntos cuánticos. Cuando un campo ac es aplicado, sea este $V_{ac} = 0.5$, la corriente (línea negra a trazos) exhibe nuevas resonancias en múltiplos de ω_{ac} . Vemos entonces que mediante una sintonización adecuada de los parámetros ac, digamos, mediante la elección de $V_{ac} = 0.96192$, podemos inducir la condición de CDT en la corriente del sistema. Esto es, con una variación de V_{ac} hemos “apagado” efectivamente las resonancias en $\varepsilon_b = 0$ y 2.0 . En este caso también observamos en la figura 23 la ausencia de resonancias para valores que son múltiplos impares de la frecuencia ac (ω_{ac}). Esto se debe a que la reducción del tuneleo entre los puntos cuánticos ($T_{lr} \sim 0.009$) reduce en forma efectiva el traslape entre los estados asociados al punto cuántico izquierdo y derecho. Esto es, las resonancias asociadas a los estados con etiquetas de la forma $[\nu, n]$ tienden a desaparecer cuando los tuneleos entre los puntos cuánticos se hacen muy pequeños, *i.e.*, los puntos están débilmente acoplados.

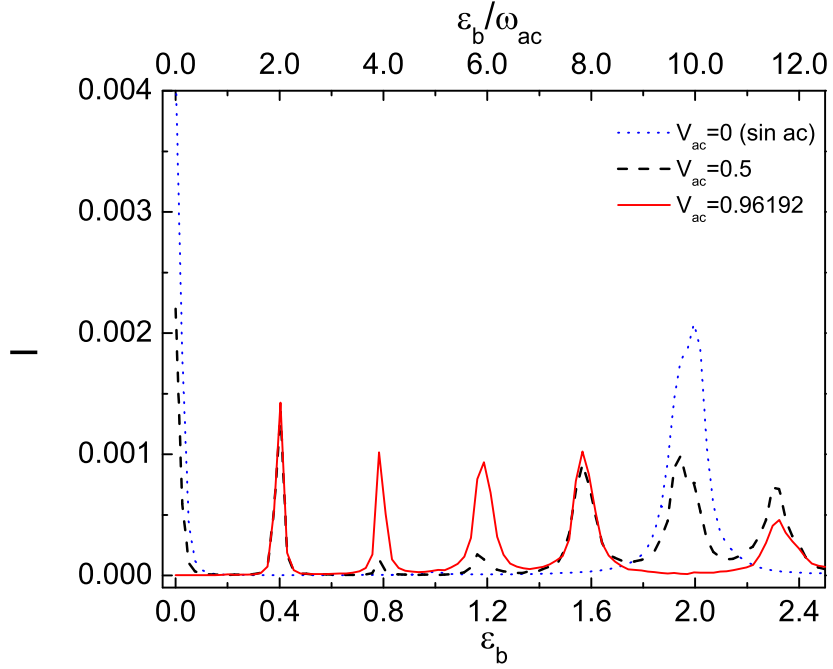


Figura 23. I versus ε_b para un TDQS con puntos cuánticos extremadamente desacoplados. En este caso se ha escogido $\alpha = 0.8$ con los parámetros ac $\omega_{ac} = 0.2$, $V_{ac} = 0.5$ (línea negra a trazos) y $V_{ac} = 0.96192$ (línea roja solida), valor que corresponde al primer cero de $J_0(\xi)$ ($\xi = 2.4048$), y valores típicos de los parámetros $\{V_0; \gamma; x_0; \Gamma\} = \{0.5; 0.01; 5.0; 0.05\}$. También se muestra la corriente para el caso sin campo ac (línea azul a puntos). Vemos que las resonancias bien definidas que aparecen en $\varepsilon_b = 0$, y 2.0 del caso sin ac, pueden ser efectivamente apagadas mediante una sintonización adecuada de V_{ac} (línea roja solida) para que el sistema exhiba la condición de CDT.

A continuación analizaremos el espectro de cuasienergías asociadas a un transbordador cuántico. En la figura 24 (a) mostramos los resultados para las cuasienergías como función del voltaje de compuerta ε_b , para dos valores del campo ac. Para el caso $V_{ac} = 1$ (línea negra a puntos) distinguimos un patrón de cruces (anti-cruces) en los valores de ε_b donde aparecen las resonancias, cuando este parámetro es un múltiplo impar (par) de la frecuencia del campo ac, ω_{ac} . Para el caso $V_{ac} = 1.533$ (líneas rojas en la figura 24 (a)), el cual corresponde a una condición de CDT, observamos una drástica reducción en la separación de los anti-cruces, en comparación con lo que ocurre en el

caso $V_{ac} = 1$) en $\varepsilon_b = 0.4$ (la región destacada con un cuadrado azul), lo cual indica la aparición del fenómeno de CDT. Por lo tanto, aún para el caso con un valor distinto de cero para el voltaje de compuerta ε_b , donde no podemos utilizar argumentos de simetría para los eigenestados (consultar el capítulo V), todavía es posible identificar el fenómeno de CDT en la vecindad de estos “cuasi-cruces” que aparecen en el espectro de cuasienergías.

Lo anterior se ve corroborado al graficar las cuasienergías como función de ξ (figura 24 (b)), para un valor fijo de $\varepsilon_b = 0.4$, donde de nuevo se obtienen estos “cuasi-cruces” en los valores de ξ que coinciden con los ceros de la función Bessel $J_1(\xi)$.

En la figura 25 estudiamos la cuasienergías como función de ξ (línea negra a puntos sólidos) para el caso de acoplamiento muy débil entre los pozos cuánticos, en donde hemos elegido un valor de $\alpha = 0.8$, para $\varepsilon_b = 0$ (sistema simétrico) y un valor de la frecuencia ac $\omega_{ac} = 0.2$. En este caso el fenómeno de CDT ocurre a un valor de $V_{ac} = 0.96192$ ($\xi = 2.4048$), que corresponde al primer cero de $J_0(\xi)$.

Los casos simétricos, como el discutido líneas arriba, resultan de particular interés debido a las propiedades de simetría de los estados involucrados. En la siguiente subsección estudiaremos el espectro de cuasienergías, así como la paridad de los estados de Floquet.

VI.3.2 Análisis de Floquet para el caso simétrico

Utilizando el formalismo de Floquet, analizamos las condiciones bajo las cuales existe destrucción coherente del tuneo (en un sistema de triple punto cuántico oscilante simétrico, esto es, un TDQS donde el voltaje de compuerta, ε_b , es cero).

En la figura 26 graficamos la corriente electrónica para el TDQS simétrico para

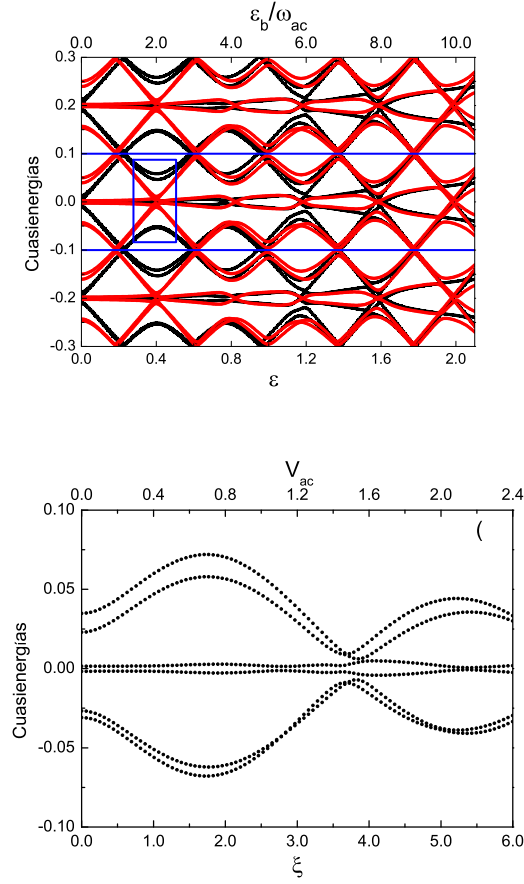


Figura 24. (a) Cuasienergías como función de ε_b para los casos $V_{ac} = 1$ (línea negra a puntos sólidos) y $V_{ac} = 1.533$ (línea roja a puntos sólidos), donde éste último exhibe una condición de CDT en $\varepsilon_b = 0.4$, con $\omega_{ac} = 0.2$ y valores típicos de los parámetros del sistema $\{V_0; x_0; \Gamma; \alpha\} = \{0.5; 5.0; 0.05; 0.4\}$ con $N_t = 20$. (b) Cuasienergías (línea negra a puntos sólidos) como función de la razón $\xi = (V_{ac}/2\omega_{ac})$ para el caso de $\varepsilon_b = 0.4$ con $\omega_{ac} = 0.2$ y los parámetros utilizados en el caso (a).

dos valores distintos del voltaje ac, V_{ac} . Para el valor $V_{ac} = 1.15$ notamos que se obtiene un pico de corriente para $\varepsilon_b = 0$ correspondiente a la alineación de los niveles de los tres puntos cuánticos. Sin embargo, encontramos que, para el valor particular $V_{ac} = 0.96192$, el pico de la corriente eléctrica con $\varepsilon_b = 0$ disminuye significativamente, a pesar de que los niveles de los puntos cuánticos continúan alineados. Esto es claramente el fenómeno de CDT, ya que para el valor particular de $V_{ac} = 0.96192$ la

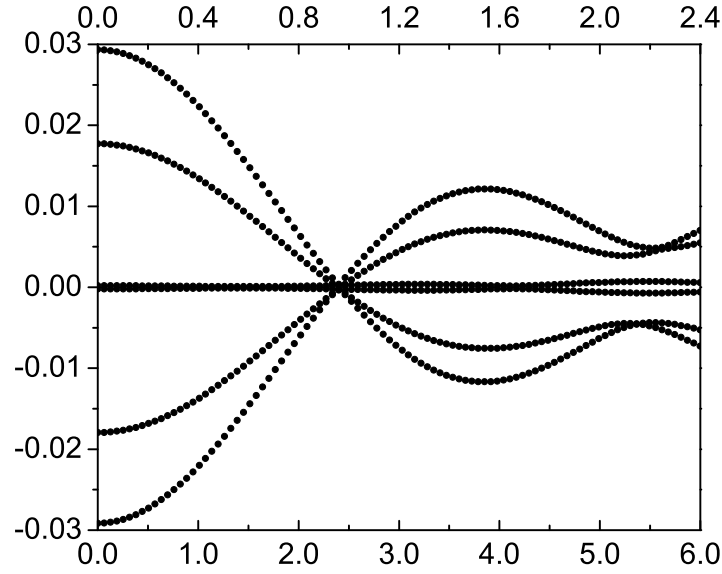


Figura 25. Cuasienergías como función de $\xi = (V_{ac}/2\omega_{ac})$ para $\varepsilon_b = 0$ con $\omega_{ac} = 0.2$ y parámetros $\{V_0; x_0; \Gamma\} = \{0.5; 5.0; 0.05\}$, con $N_t = 20$ (línea negra a puntos sólidos), para el caso de $\alpha = 0.8$ discutido en la figura 23. Observamos que en la condición de CDT para $\xi = 2.4048$ se observan los ‘cuasi-cruces’ de los distintos niveles de energía.

razón $\xi = 2.4048$, la cual corresponde al primer cero de $J_0(\xi)$. Como ya mencionamos, en $\varepsilon_b = 0$, los tres niveles ε_l , ε_c y ε_r están en resonancia, de modo que $\nu = 0$ y $n = 0$. Para este caso, realizamos un análisis de Floquet del CDT analizando el espectro de cuasienergías del sistema. Para nuestros cálculos escogemos $N = 1$, *i.e.*, dos estados de oscilador $n = 0, 1$ para cada punto cuántico. En la figura 27 graficamos las cuasienergías como función de la razón ξ . El recuadro de la figura 27 muestra las cuasienergías en la primera zona de Brillouin ($-\omega_{ac}/2 \leq \epsilon_\alpha \leq \omega_{ac}/2$) como función de ξ , donde podemos apreciar un complejo patrón de cruces y anti-cruces de las cuasienergías en la vecindad de $\xi = 2.4048$; una ampliación de la región en donde ocurre este fenómeno se ilustra en la gráfica principal. Aquí podemos identificar las regiones *A* y *B*, donde aparentemente toman lugar dos cruces de las cuasienergías.

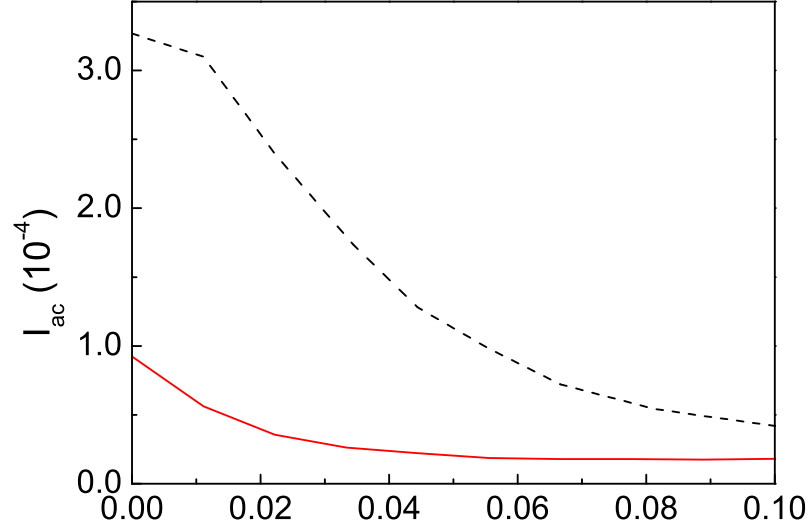


Figura 26. Corriente electrónica promediada en el tiempo I_{ac} versus el voltaje de bias $\varepsilon_b = (\varepsilon_l - \varepsilon_r)$ en la vecindad de $\varepsilon_b = 0$, para $V_{ac} = 1.15$ (línea negra a trazos), y $V_{ac} = 0.96192$ (línea roja sólida) correspondiente a la condición de CDT ($J_0(\xi) = 0$). Note el decremento en la amplitud del pico en $\varepsilon_b = 0$ debido al CDT. La frecuencia ac es $\omega_{ac} = 0.2$, con los valores típicos del TDQS: $V_0 = 0.5$, $\gamma_d = 0.01$, $\Gamma = 0.05$, $N = 2$ y $\alpha = 0.4$.

Para poder verificar si la región A corresponde a un cruce, analizamos las propiedades de simetría de los eigenvectores asociados a las cuasienergías etiquetadas como 1 – 6 mostradas en el panel (a) de la figura 28. En el panel (b) de la figura 28 graficamos los eigenvectores (que corresponden a las componentes de Fourier, $C_{n,q,j}^k$, de la expansión de los estados de Floquet en la base compuesta) asociados a los eigenvalores etiquetados 1 (línea negra sólida) y 6 (línea roja a trazos), y vemos una completa concordancia entre ellas. En el panel (c) de la misma figura se muestra un resultado similar al comparar los eigenvalores 2 (línea negra sólida) y 5 (línea roja a trazos).

En la figura 29 analizamos las paridades de los estados 3 y 4 definidos en la figura

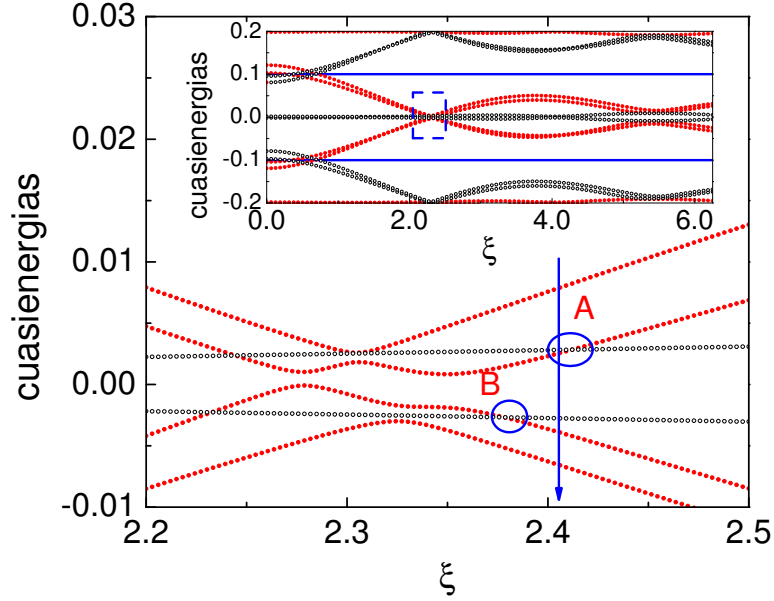


Figura 27. El recuadro muestra las cuasienergías en la primera zona de Brillouin (delimitada con líneas azules continuas) como función de ξ para $\varepsilon_b = 0$, con valores fijos de $\omega_{ac} = 0.2$, $N = 1$ estados de oscilador, $N_t = 20$ y el resto de los parámetros iguales a los de la figura 24 (a). La gráfica principal es una ampliación de las cuasienergías en la vecindad de $\xi = 2.4048$ (indicada con una flecha azul) que corresponde al cero de $J_0(\xi)$ donde ocurre CDT. Las regiones A y B (ver texto) exhiben dos cruces de las cuasienergías. Las cuasienergías se clasifican de acuerdo a su paridad, *i.e.*, los estados pares (puntos rojos sólidos) y los estados impares (puntos negros huecos).

28 (a). Por ejemplo en el panel (a) el eigenestado correspondiente al eigenvalor 3 (línea negra sólida) satisface la transformación par, dada por la ecuación (71), la cual consiste en invertir los puntos cuánticos izquierdo $\leftrightarrow$ derecho y multiplicar cada componente del eigenvector por un factor de $(-1)^n(-1)^j$. El eigenvector transformado (línea roja a trazos) se incluye en la gráfica y ambas coinciden. En el panel (b) de la figura (29), el eigenestado 4 (línea negra sólida) satisface la ecuación impar (71), y el resultado del eigenvector transformado correspondiente se muestra como la línea roja a trazos. Estos resultados son consistentes con el hecho de que cerca de un cruce las cuasienergías

presentan *paridades opuestas*. De hecho, a lo largo de la línea definida por 1-4-6 de la región A en la figura 27 (a), todos los eigenestados exhiben una *paridad impar*, mientras que en la línea definida por 2-3-5 los eigenestados tienen *paridad par*. Se obtienen resultados similares para las cuasienergías de la región B de la figura 27 (a). De los resultados anteriores podemos concluir que las regiones A y B contienen cruces exactos.

Utilizando estas propiedades, hemos determinado mediante estudios numéricos detallados que en A y B (figura 27), los eigenestados correspondientes exhiben paridades opuestas, donde los estados pares están denotados por puntos rojos sólidos y los estados impares con puntos huecos negros.

En resumen, debido a la simetría del sistema, existe una invariancia ante una transformación generalizada de paridad y, de esta forma, encontramos expresiones analíticas que describen las propiedades de simetría de los coeficientes de Fourier de los estados de Floquet. Utilizando estas expresiones, mostramos explícitamente que en la región cercana a donde ocurre CDT, existen cruces en el espectro de cuasienergías correspondientes a eigenestados de Floquet con paridad opuesta.

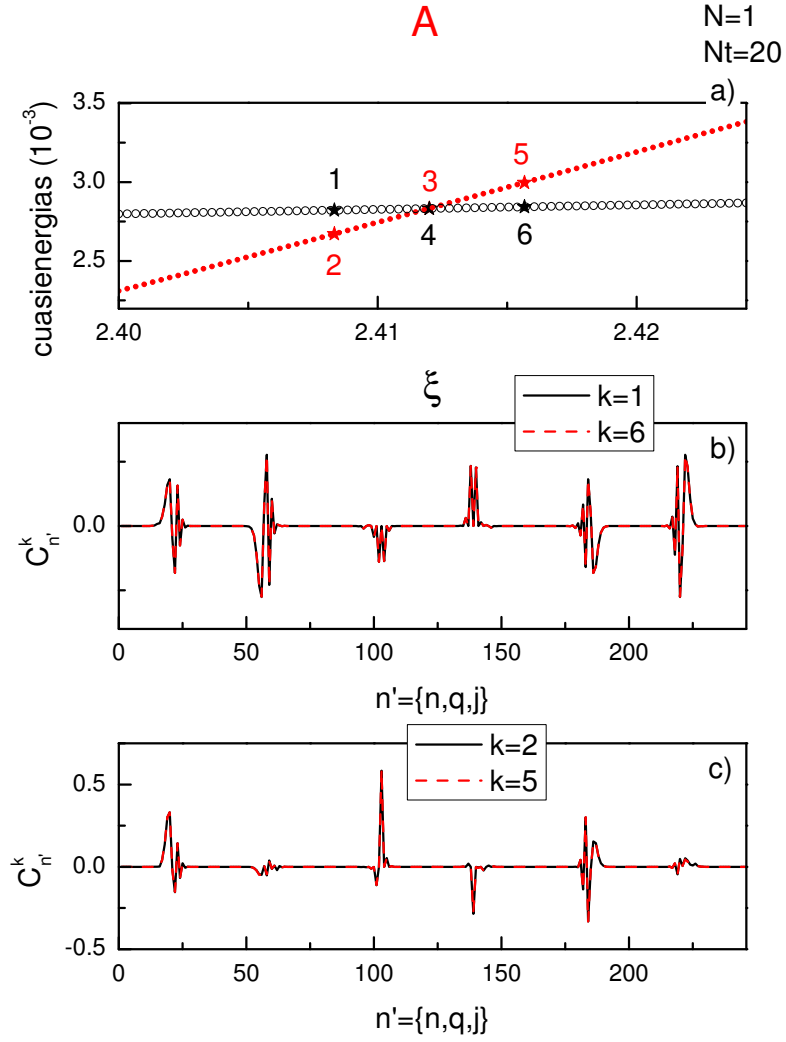


Figura 28. (a) Cuasienergías para la región A marcada en la figura 27, donde se muestran los valores particulares etiquetados del 1 al 6. (b) Comparación entre los eigenvectores de los eigenvalores 1 (línea negra sólida) y 6 (línea roja a trazos). (c) Comparación de los eigenvectores de los eigenvalores 2 (línea negra sólida) y 5 (línea roja a trazos). En (b) y (c) el índice n' representa un elemento de la base compuesta $|n, q, j\rangle$.

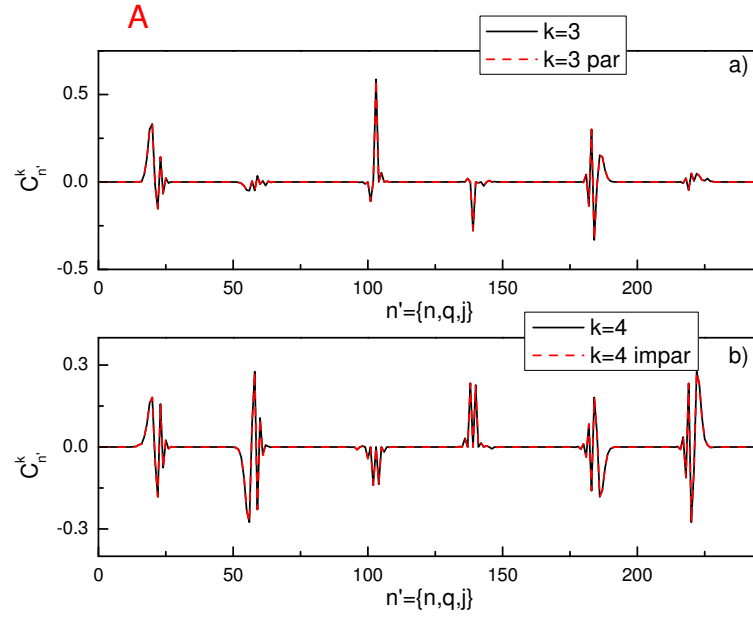


Figura 29. Paridad de los eigenvectores 3 y 4 de la figura 28a. En el panel (a) graficamos el eigenestado correspondiente al eigenvalor 3 (línea negra sólida), y el eigenvector transformado bajo la transformación (71) (línea roja a trazos); la superposición de ambas curvas indica que el eigenvector 3 posee una *paridad par*. (b) El eigenestado 4 (línea negra sólida) es transformado por (71), y la *paridad impar* del eigenvector se verifica. En ambos paneles, el índice n' representa un elemento de la base compuesta $|n, q, j\rangle$.

Capítulo VII

Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo se presentó, desde una perspectiva general, el estudio de las propiedades del transporte electrónico en los sistemas nanoelectromecánicos conocidos como *transbordadores de triple punto cuántico* (TDQS por sus siglas en inglés). Recordemos que el TDQS consiste en tres puntos cuánticos conectados en serie con la peculiaridad de que el punto central puede oscilar entre los puntos de los extremos, mientras que estos últimos se encuentran unidos rígidamente a los contactos. La oscilación mecánica del punto central le confiere al sistema nuevas propiedades eléctricas, convirtiéndolo en un sistema nanoelectromecánico, esto es, en un sistema en donde los grados de libertad mecánicos y electrónicos se encuentran estrechamente relacionados. Con respecto al marco teórico con el que se exploran estos sistemas, en este trabajo se realizó un estudio mediante el método de la ecuación maestra para la *matriz de densidad reducida* del sistema, en presencia de un baño de fonones y fotones. Mediante la solución numérica de las ecuaciones de la *matriz de densidad reducida*, es posible analizar la dinámica de la corriente de tuneleo cuando el sistema está acoplado a los contactos y a un entorno.

Entre las aportaciones más importantes de esta investigación, se encuentra el desarrollo de herramientas teóricas basadas en el enfoque de la matriz de densidad reducida. Entre estas aportaciones destaca el desarrollo de las ecuaciones maestras para un TDQS, en ausencia de un campo eléctrico ac, en donde hemos modificado el modelo original de Armour y MacKinnon (2002) para no considerar el truncamiento del oscilador armónico en los puntos cuánticos fijos a la izquierda y a la derecha del sistema. Dicho de otra

manera, en nuestro enfoque el punto cuántico central se mueve bajo el efecto de un potencial estrictamente de oscilador armónico, evitando con esto complicaciones de carácter numérico y computacional.

Otra de las aportaciones de nuestro trabajo de tesis, fue el desarrollo del primer modelo en la literatura de un TDQS sometido a un *campo eléctrico ac*, utilizando un enfoque completamente cuántico para describir el grado de libertad mecánico inducido por el oscilador. Aquí también se incluye el desarrollo de las *ecuaciones maestras* para estudiar la evolución de la corriente electrónica en este tipo de sistemas. Además, se implementa una *transformación unitaria* de las ecuaciones maestras, que nos permite realizar un análisis más completo de las propiedades de la corriente, al incorporar en forma natural algunos procesos físicos involucrados, como los son la absorción o emisión de fotones en la dinámica del tuneo. En este trabajo también hemos desarrollado otra herramienta teórica de gran utilidad para complementar el estudio de la corriente electrónica. Se trata del primer trabajo reportado en la literatura en donde se realiza una extensión de la teoría de Floquet para estudiar el espectro de cuasienergías en sistemas de transbordadores cuánticos. Con base en dicha herramienta logramos complementar el estudio del fenómeno de *localización coherente del tuneo* (CDT por sus siglas en inglés), observado en nuestros transbordadores, y en lo que nos ocuparemos más adelante.

A continuación presentaremos una ampliación del contenido de estas aportaciones, así como los resultados que se desprenden de nuestros estudios de la corriente electrónica y de los espectros de energía (cuasienergía) en los transbordadores de triple punto cuántico.

Uno de los aspectos quizás más importantes y novedosos que hemos abordado en este trabajo, es el estudio de los efectos de una campo ac en un TDQS. En nuestro

estudio hemos demostrado, mediante un enfoque puramente cuántico, que la corriente electrónica en un TDQS, en presencia de un campo eléctrico oscilante, exhibe resonancias que pueden ser descritas por *relaciones de suma* simples. Esto es, hemos demostrado que un campo ac induce tuneleos asistidos por fotones a través del dispositivo nanoelectromecánico, lo cual se manifiesta en la corriente eléctrica como una serie de bandas o picos. Los picos pueden ser caracterizados por dos grados de libertad: el índice ν , correspondiente al número de fotones emitidos (absorbidos), y n , el estado cuántico del oscilador en el que el electrón termina transmitido al punto cuántico de la derecha. Los índices surgen de reglas de selección que caracterizan la dinámica de la corriente en el TDQS, que nos indican que las resonancias en la corriente son producidas mediante combinaciones de bandas fonónicas y fotónicas. Los resultados son contrastados con el espectro del caso sin ac, el cual exhibe resonancias fonónicas localizadas en múltiplos enteros de la energía del oscilador cuántico. Más aún, mediante la sintonización de la intensidad y la frecuencia del campo ac, hemos demostrado que es posible manipular las características de la corriente electrónica, al grado de observar en nuestro dispositivo el fenómeno conocido como *destrucción coherente del tuneleo*. Hemos encontrado condiciones para las cuales podemos lograr CDT en el TDQS mediante el manejo de los parámetros del campo ac externo *i.e.* la intensidad V_{ac} y la frecuencia ω_{ac} . Hemos demostrado que el fenómeno de CDT se manifiesta cuando la razón $\xi = (V_{ac}/2\omega_{ac})$ coincide con los ceros de funciones de Bessel $J_\nu(\xi)$. Nuestros resultados muestran que sintonizando los parámetros del campo ac, podemos controlar la contribución de la corriente de diferentes modos vibracionales. Esto constituye un nuevo mecanismo para obtener información en los modos vibracionales a través de mediciones de la corriente, como, por ejemplo, en el contexto de dispositivos transbordadores moleculares. Además, se incluyen cálculos analíticos y numéricos que involucran una

transformación unitaria, la cual permite verificar analíticamente bajo qué condiciones ocurre dicho fenómeno.

También se estudian las propiedades de la corriente electrónica en términos del espectro de cuasienergías utilizando la teoría de Floquet. Específicamente, se explican las resonancias de la corriente como función del voltaje de compuerta en términos de las propiedades de las cuasienergías del hamiltoniano de Floquet. Hemos realizado un análisis de Floquet en un dispositivo de triple punto cuántico oscilante y sujeto a un campo eléctrico ac para investigar el espectro de cuasienergías como función de los parámetros del campo y el voltaje externo. En este análisis se aborda el fenómeno de CDT en un transbordador simétrico a través del estudio de su espectro de cuasienergías. Se encuentran expresiones generalizadas para los coeficientes de Fourier de los estados de Floquet que permiten clasificar a estos coeficientes de acuerdo a su paridad. Se muestra que en la vecindad de la condición de CDT existen cruces de las cuasienergías como función de los parámetros ac, y que los coeficientes asociados exhiben paridades opuestas. Debido a la simetría del sistema, existe una invariancia ante una *transformación generalizada de paridad* y, de esta forma, encontramos expresiones analíticas que describen las propiedades de simetría de los coeficientes de Fourier de los estados de Floquet. Utilizando estas expresiones, mostramos explícitamente que en la región cercana a donde ocurre CDT, existen cruces en el espectro de cuasienergías correspondientes a eigenestados de Floquet con paridad opuesta.

A partir de los resultados y conclusiones obtenidas en nuestro trabajo de tesis, podemos afirmar que contamos con una poderosa herramienta para explorar diversos aspectos de la dinámica del tuneo electrónico en transbordadores de triple punto cuántico. En el contexto de estos sistemas nanoelectromecánicos existen otros aspectos interesantes, como el del acoplamiento de espines con osciladores mecánicos, lo que con-

duciría a la creación de nanodispositivos superiores basados en propiedades magnéticas (Kovalev *et al.* (2011), Kontos (2011)), o el de dispositivos opto-mecánicos con potenciales aplicaciones en computación cuántica (Stannigel *et al.* (2010)). Más aún, el enfoque teórico presentado en este trabajo podría ser la base para incursionar en el estudio del espín en TDQS. El estudio de la propiedades de este tipo de problemas resulta una secuela natural del presente trabajo, así como la base de futuras investigaciones.

Referencias

- Armour, A. D. y MacKinnon, A. (2002). Transport via a quantum shuttle. *Phys. Rev. B*, **66**: 035333–1–035333–10.
- Armour, A. D., Blencowe, M. P., y Zhang, Y. (2004). Classical dynamics of a nanomechanical resonator coupled to a single-electron transistor. *Phys. Rev. B*, **69**: 125313–1–125313–15.
- Barata, J. C. A. y Cortez, D. A. (2003). Perturbative analysis of dynamical localization. *J. Math. Phys.*, **44**: 1937–1960.
- Barata, J. C. A. y Wreszinski, W. F. (2000). Strong-coupling theory of two-level atoms in periodic fields. *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 2112–2115.
- Bassous, E., Taub, H. H., y Kuhn, L. (1977). Ink jet printing nozzle arrays etched in silicon. *Appl. Phys. Lett.*, **31**: 135–137.
- Blum, K. (1996). *Density Matrix Theory and Applications*. Plenum, New York, USA, segunda edición. 323 p.
- Boese, D. y Schoeller, H. (2001). Influence of nanomechanical properties on single-electron tunneling: A vibrating single-electron transistor. *Europhysics Letters*, **54**: 668–674.
- Braig, S. y Flensberg, K. (2003). Vibrational sidebands and dissipative tunneling in molecular transistors. *Phys. Rev. B*, **68**: 205324–1–205324–10.
- Cota, E., Aguado, R., Creffield, C. E., y Platero, G. (2003). Spin-polarized pumping in a double quantum dot. *Nanotechnology*, **14**: 152–156.
- Cota, E., Aguado, R., y Platero, G. (2005). ac-driven double quantum dots as spin pumps and spin filters. *Phys. Rev. Lett.*, **94**: 107202–1–107202–4.
- Craighead, H. G. (2000). Nanoelectromechanical systems. *Science*, **290**: 1532–1535.
- Creffield, C. E. y Platero, G. (2002). ac-driven localization in a two-electron quantum dot molecule. *Phys. Rev. B*, **65**: 113304–1–113304–4.
- Dittrich, T., Hänggi, P., Ingold, G., Kramer, B., Schön, G., y Zwerger, W. (1998). *Quantum Transport and Dissipation*. Wiley-VCH, Weinheim, Federal Republic of Germany. 372 p.
- Donarini, A. (2004). *Dynamics of Shuttle Devices. Ph.D Thesis*. Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark. 158 p.

- Eirola, T. y Nevanlinna, O. (2003). *Numerical linear algebra; iterative methods. Lecture notes. Notas de Curso*. Helsinki University of Technology, Institute of Mathematics, Espoo, Finland. 119 p.
- Erbe, A., Weiss, C., Zwerger, W., y Blick, R. H. (2001). Nanomechanical resonator shuttling single electrons at radio frequencies. *Phys. Rev. Lett.*, **87**: 096106–1–096106–4.
- Fedorets, D., Gorelik, L. Y., Shekhter, R. I., y Jonson, M. (2002). Vibrational instability due to coherent tunneling of electrons. *Europhys. Lett.*, **58**: 99–104.
- Fedorets, D., Gorelik, L. Y., Shekhter, R. I., y Jonson, M. (2004). Quantum shuttle phenomena in a nanoelectromechanical single-electron transistor. *Phys. Rev. Lett.*, **92**: 166801–1–166801–4.
- Flindt, C., Novotný, T., y Jauho, A. P. (2004). Current noise in a vibrating quantum dot array. *Phys. Rev. B*, **70**: 205334–1–205334–21.
- Frasca, M. (2005). Third-order correction to localization in a two-level driven system. *Phys. Rev. B*, **71**: 073301–1–073301–3.
- Fromherz, T. (1997). Floquet states and intersubband absorption in strongly driven double quantum wells. *Phys. Rev. B*, **56**: 4772–4777.
- Golub, G. H. y Loan, C. F. V. (1996). *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press, Baltimore, USA, tercera edición. 728 p.
- Gorelik, L. Y., Isacsson, A., Voinova, M. V., Kasemo, B., Shekhter, R. I., y Jonson, M. (1998). Shuttle mechanism for charge transfer in coulomb blockade nanostructures. *Phys. Rev. Lett.*, **80**: 4526–4529.
- Gorelik, L. Y., Kulinich, S. I., Shekhter, R. I., Jonson, M., y Vinokur, V. M. (2005). Mechanically assisted spin-dependent transport of electrons. *Phys. Rev. B*, **71**: 035327–1–035327–6.
- Green, J. E., Choi, J. W., Boukai, A., Bunimovich, Y., Johnston-Halperin, E., DeIonno, E., Luo, Y., Sheriff, B. A., Xu, K., Shin, Y. S., Tseng, H. R., Stoddart, J. F., y Heath, J. R. (2007). A 160-kilobit molecular electronic memory patterned at 10^{11} bits per square centimetre. *Nature*, **445**: 414–417.
- Grifoni, M. y Hänggi, P. (1998). Driven quantum tunneling. *Phys. Rep.*, **304**: 229–354.
- Grossmann, F., Dittrich, T., Jung, P., y Hänggi, P. (1991). Coherent destruction of tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, **67**: 516–519.
- Gurvitz, S. A. y Prager, Y. S. (1996). Microscopic derivation of rate equations for quantum transport. *Phys. Rev. B*, **53**: 15932–15943.

- Gurvitz, S. A., Lipkin, H. J., y Prager, Y. S. (1996). Interference effects in resonant tunneling and the pauli principle. *Phys. Lett. A*, **212**: 91–96.
- Holthaus, M. (1992). The quantum theory of an ideal superlattice responding to far-infrared laser radiation. *Z. Phys. B: Condens. Matter*, **89**: 251–259.
- Jarillo-Herrero, P., Sapmaz, S., Dekker, C., Kouwenhoven, L. P., y van der Zan, H. S. J. (2004). Electron-hole symmetry in a semiconducting carbon nanotube quantum dot. *Nature*, **429**: 389–392.
- Kierig, E., Schnorrberger, U., Schietinger, A., Tomkovic, J., y Oberthaler, M. K. (2008). Single-particle tunneling in strongly driven double-well potentials. *Phys. Rev. Lett.*, **100**: 190405–1–190405–4.
- Knobel, R. G. y Cleland, A. N. (2003). Nanometre-scale displacement sensing using a single electron transistor. *Nature*, **424**: 291–293.
- Kohler, S., Lehman, J., y Hänggi, P. (2005). Driven quantum transport on the nanoscale. *Phys. Rep.*, **406**: 379–443.
- Kontos, T. (2011). Spintronics meets nanoelectromechanics. *Physics*, **4**: 28.
- Kovalev, A. A., Hayden, L. X., Bauer, G. E. W., y Tserkovnyak, Y. (2011). Macrospin tunneling and magnetopolaritons with nanomechanical interference. *Phys. Rev. Lett.*, **106**: 147203–1–147203–4.
- Kubatkin, S., Danilov, A., Hjort, M., Cornil, J., Brédas, J. L., Stuhr-Hansen, N., Hedegård, P., y Bjørnholm, T. (2003). Single-electron transistor of a single organic molecule with access to several redox states. *Nature*, **425**: 698–701.
- LeRoy, B. J., Lemay, S. G., Kong, J., y Dekker, C. (2004). Miniaturization of tuning forks. *Appl. Phys. Lett.*, **84**: 4280–4282.
- Lignier, H., Sias, C., Ciampini, D., Singh, Y., Zenesini, A., Morsch, O., y Arimondo, E. (2007). Dynamical control of matter-wave tunneling in periodic potentials. *Phys. Rev. Lett.*, **99**: 220403–1–220403–4.
- Longhi, S. (2008). Coherent control of tunneling in driven tight-binding chains: Perturbative analysis. *Phys. Rev. B*, **77**: 195326–1–195326–14.
- López-Bonilla, J. y Ovando, G. (2000). Matrix elements for the one-dimensional harmonic oscillator. *Bull. Ir. Math. Soc.*, **44**: 61–65.
- McCarthy, K. D., Prokof'ev, N., y Tuominen, M. T. (2003). Incoherent dynamics of vibrating single-molecule transistors. *Phys. Rev. B*, **67**: 245415–1–245415–6.
- Meir, Y. y Wingreen, N. S. (1992). Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Phys. Rev. Lett.*, **68**: 2512–2515.

- Newell, W. E. (1968). Miniaturization of tuning forks. *Science*, **161**: 1320–1326.
- Novotný, T., Donarini, A., y Jauho, A. P. (2003). Quantum shuttle in phase space. *Phys. Rev. Lett*, **90**: 256801–1–256801–4.
- Novotný, T., Donarini, A., Flindt, C., y Jauho, A. P. (2004). Shot noise of a quantum shuttle. *Phys. Rev. Lett*, **92**: 248302–1–248302–4.
- Pals, P. y MacKinnon, A. (1996a). Incoherent tunneling through two quantum dots with coulomb interaction. *J. Phys.: Condens. Matter*, **8**: 3177–3194.
- Pals, P. y MacKinnon, A. (1996b). Coherent tunneling through two quantum dots with coulomb interaction. *J. Phys.: Condens. Matter*, **8**: 5401–5414.
- Park, H., Park, J., Lim, A. K. L., Anderson, E. H., Alivisatos, A. P., y McEuen, P. L. (2000). Nanomechanical oscillations in a single-c60 transistor. *Nature*, **407**: 57–60.
- Peterson, K. E. (1978). Dynamic micromechanics on silicon: Techniques and devices. *IEEE Trans. Electron Devices*, **25**: 1241–1250.
- Pistolesi, F. y Fazio, R. (2005). Charge shuttle as a nanomechanical rectifier. *Phys. Rev. Lett.*, **94**: 036806–1–036806–4.
- Platero, G. y Aguado, R. (2004). Photon-assisted transport in semiconductor nanostructures. *Phys. Rep.*, **395**: 1–157.
- Renzoni, F. y Brandes, T. (2001). Charge transport through quantum dots via time-varying tunnel coupling. *Phys. Rev. B*, **64**: 245301–1–245301–4.
- Roylanceans, M. y Angell, J. B. (1979). A batch-fabricated silicon accelerometer. *IEEE Trans. Electron Devices*, **26**: 1911–1917.
- Sakurai, J. J. (1994). *Modern Quantum Mechanics. Revised Edition*. Adison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusetts, USA, primera edición.
- Scheible, D. V., Erbe, A., y Blick, R. H. (2002). Tunable coupled nanomechanical resonators for single-electron transport. *New Journal of Physics*, **4**: 86.1–86.7.
- Scully, M. O. y Zubairy, M. S. (1997). *Quantum Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., primera edición. 630 p.
- Smit, R. H. M., Noat, Y., Untiedt, C., Lang, N. D., van Hemert, M. C., y van Ruitenbeek, J. M. (2002). Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature*, **419**: 906–909.
- Sánchez, R. y Platero, G. (2007). Rabi dynamics in driven tunneling devices. En L. L. Bonilla, M. A. Moscoso, G. Platero, y J. M. Vega, editores, *Mathematics in Industry*, Vol. 12, páginas 444–448. Springer, Berlin, Germany.

- Stafford, C. A., Kotlyar, R., y Sarma, S. D. (1998). Coherent resonant tunneling through an artificial molecule. *Phys. Rev. B*, **58**: 7091–7102.
- Stannigel, K., Rabl, P., Sørensen, A. S., Zoller, P., y Lukin, M. D. (2010). Optomechanical transducers for long-distance quantum communication. *Phys. Rev. Lett.*, **105**: 220501–1–220501–4.
- Stoof, T. H. y Nazarov, Y. V. (1996). Time-dependent resonant tunneling via two discrete states. *Phys. Rev. B*, **53**: 1050–1053.
- Valle, G. D., Ornigotti, M., Cianci, E., Foglietti, V., Laporta, P., y Longhi, S. (2007). Visualization of coherent destruction of tunneling in an optical double well system. *Phys. Rev. Lett.*, **98**: 263601–1–263601–4.
- van Kessel, P. F., Hornbeck, L. J., Meier, R. E., y Douglass, M. R. (1998). A mems-based projection display. *Proc. IEEE*, **86**: 1687–1704.
- Villavicencio, J., Maldonado, I., Cota, E., y Platero, G. (2011). Quasienergy spectrum and tunneling current in ac-driven triple quantum dot shuttles. *New Journal of Physics*, **13**: 023032–1–023032–18.
- Wegewijs, M. R. y Nazarov, Y. V. (1999). Resonant tunneling through linear arrays of quantum dots. *Phys. Rev. B*, **60**: 14318–14327.
- Wong, A., Maytorena, J. A., López-Bastidas, C., y Mireles, F. (2008). Spin-torque contribution to the ac spin hall conductivity. *Phys. Rev. B*, **77**: 035304–1–035304–8.

Apéndice A

Elementos de matriz de los tuneleos

A continuación obtendremos fórmulas analíticas cerradas para $T_l^{mn}(\hat{x})$ y nuestra derivación sigue las líneas de López-Bonilla y Ovando (2000). Calculamos $T_l^{mn}(\hat{x}) = \langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle$ en la base del oscilador $\{|n\rangle\}$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N$), la que nos conduce a,

$$\langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle = -V e^{-\alpha x_0} \langle m | e^{-\alpha \hat{x}} | n \rangle. \quad (76)$$

Ahora, reescribimos los elementos de matriz en la representación $|x\rangle$ utilizando la identidad

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx, \quad (77)$$

lo que nos permite reescribir,

$$\begin{aligned} \langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle &= -V e^{-\alpha x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | m \rangle^* e^{-\alpha x} \langle x | n \rangle dx \\ &= -V e^{-\alpha x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) e^{-\alpha x} \psi_n(x) dx. \end{aligned} \quad (78)$$

donde las ψ_n son las eigenfunciones del oscilador en la base de configuración, y están dadas por

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi} z} e^{-\frac{1}{2}(x/z)^2} H_n(x/z), \quad (79)$$

donde $z = (\hbar/m\omega)^{1/2}$. Las eigenfunciones satisfacen la siguiente relación de ortonormalidad

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn}, \quad (80)$$

donde los polinomios de Hermite $H_n(x)$ satisfacen la siguiente función generadora,

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(x). \quad (81)$$

Ahora realizamos el cambio de variable $x' = (x/z)$ en la ecuación (78), y utilizamos la relación (81) para sustituir a la función exponencial en el integrando, y así obtenemos

$$\begin{aligned} \langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle &= -\frac{V e^{-\alpha x_0} e^{\gamma_d^2/4}}{\sqrt{2^{m+n}} m! n! \pi} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{2^r r!} (-\gamma_d)^r \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-x'^2} H_r(x') H_n(x') H_m(x'). \end{aligned} \quad (82)$$

con $\gamma_d = \alpha z$. Evaluamos la integral anterior utilizando la identidad,

$$H_n(x') H_m(x') = 2^n n! m! \sum_{k=0}^n \frac{H_{2k+m-n}(x')}{2^k k! (k+m-n)! (n-k)!} \quad (83)$$

y la relación de ortonormalidad (80). El resultado es

$$\langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle = -\frac{V e^{-\alpha x_0} e^{\gamma_d^2/4}}{\sqrt{2^{m+n}} m! n!} \sum_{k=0}^n \frac{2^n m! n! (-\gamma_d)^{2k+m-n}}{2^k k! (k+m-n)! (n-k)!}, \quad (84)$$

o, sustituyendo el parámetro γ_d ,

$$\begin{aligned} \langle m | T_l(\hat{x}) | n \rangle &= -V [2^{n-m} m! n!]^{1/2} e^{-\alpha x_0} e^{(\hbar \alpha^2/4m\omega)} \\ &\quad \times \left[-\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right]^{m-n} \sum_{k=0}^n \frac{\left[\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right]^{2k}}{2^k k! (k+m-n)! (n-k)!}. \end{aligned} \quad (85)$$

El resultado anterior es válido para $m \geq n$. Los elementos de matriz $\langle m | T_r(\hat{x}) | n \rangle$ pueden ser inmediatamente calculados a partir de la ecuación (85), utilizando la siguiente relación entre los elementos de matriz:

$$T_l^{mn}(\hat{x}) = (-1)^{m-n} T_r^{mn}(\hat{x}); \quad m \geq n. \quad (86)$$

Finalmente, los elementos de matriz para el caso $m < n$ pueden ser calculados explotando la hermiticidad de los operadores, esto es, $T_l(\hat{x}) = T_l^\dagger(\hat{x})$, y $T_r(\hat{x}) = T_r^\dagger(\hat{x})$ (recordemos que $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$).

Apéndice B

Ecuación Maestra Reducida

En el límite $k_B T = 0$ ($\bar{n} = 0$), las ecuaciones están dadas por

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{ll}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[(i-j)\hbar\omega \rho_{ll}^{ij} + \sum_n \{T_l^{in} \rho_{cl}^{nj} - T_l^{nj} \rho_{lc}^{in}\} \right] + \Gamma \rho_{00}^{ij} \\ & -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{ll}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{ll}^{i+1, j+1}, \end{aligned} \quad (87)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{cc}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[-\Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{i} \rho_{cc}^{i-1, j} + \sqrt{i+1} \rho_{cc}^{i+1, j} \right) + (i-j)\hbar\omega \rho_{cc}^{ij} \right. \\ & \left. + \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{j+1} \rho_{cc}^{i, j+1} + \sqrt{j} \rho_{cc}^{i, j-1} \right) \right] \\ & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \sum_n \{T_l^{in} \rho_{lc}^{nj} - \rho_{cl}^{in} T_l^{nj} + T_r^{in} \rho_{rc}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{cr}^{in}\} \\ & -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{cc}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{cc}^{i+1, j+1} \end{aligned} \quad (88)$$

$$\dot{\rho}_{00}^{ij} = -\Gamma [\rho_{00}^{ij} - \rho_{rr}^{ij}] - \gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{00}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{00}^{i+1, j+1} \quad (89)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{rr}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[(i-j)\hbar\omega \rho_{rr}^{ij} + \sum_n \{T_r^{in} \rho_{cr}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{rc}^{in}\} \right] - \Gamma \rho_{rr}^{ij} \\ & -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{rr}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{rr}^{i+1, j+1} \end{aligned} \quad (90)$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{lc}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[(i-j)\hbar\omega \rho_{lc}^{ij} + \frac{\varepsilon_b}{2} \rho_{lc}^{ij} + \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{j+1} \rho_{lc}^{i, j+1} + \sqrt{j} \rho_{lc}^{i, j-1} \right) \right] \\
& -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \sum_n \{ -T_l^{nj} \rho_{ll}^{in} + T_l^{in} \rho_{cc}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{lr}^{in} \} \\
& -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{lc}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{lc}^{i+1, j+1}
\end{aligned} \tag{91}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{lr}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[(\varepsilon_b + (i-j)\hbar\omega) \rho_{lr}^{ij} + \sum_n \{ T_l^{in} \rho_{cr}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{lc}^{in} \} \right] - \frac{1}{2} \Gamma \rho_{lr}^{ij} \\
& -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{lr}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{lr}^{i+1, j+1}
\end{aligned} \tag{92}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{cr}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[\left(\frac{\varepsilon_b}{2} + (i-j)\hbar\omega \right) \rho_{cr}^{ij} - \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{i} \rho_{cr}^{i-1, j} + \sqrt{i+1} \rho_{cr}^{i+1, j} \right) \right] \\
& -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \sum_n \{ -T_l^{in} \rho_{lr}^{nj} - T_r^{nj} \rho_{cc}^{in} + T_r^{in} \rho_{rr}^{nj} \} - \frac{1}{2} \Gamma \rho_{cr}^{ij} \\
& -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{cr}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{cr}^{i+1, j+1}
\end{aligned} \tag{93}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{cl}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[(i-j)\hbar\omega \rho_{cl}^{ij} - \frac{\varepsilon_b}{2} \rho_{cl}^{ij} - \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{i} \rho_{cl}^{i-1, j} + \sqrt{i+1} \rho_{cl}^{i+1, j} \right) \right] \\
& -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \sum_n \{ T_l^{in} \rho_{ll}^{nj} - \rho_{cc}^{in} T_l^{nj} + T_r^{in} \rho_{rl}^{nj} \} \\
& -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{cl}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{cl}^{i+1, j+1}
\end{aligned} \tag{94}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{rl}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[(-\varepsilon_b + (i-j)\hbar\omega) \rho_{rl}^{ij} + \sum_n \{ T_r^{in} \rho_{cl}^{nj} - T_l^{nj} \rho_{rc}^{in} \} \right] - \frac{1}{2} \Gamma \rho_{rl}^{ij} \\
& -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{rl}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{rl}^{i+1, j+1}
\end{aligned} \tag{95}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{rc}^{ij} = & -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left[\left(-\frac{\varepsilon_b}{2} + (i-j)\hbar\omega \right) \rho_{rc}^{ij} + \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{j+1} \rho_{rc}^{i, j+1} + \sqrt{j} \rho_{rc}^{i, j-1} \right) \right] \\
& -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \sum_n \{ -\rho_{rl}^{in} T_l^{nj} + T_r^{in} \rho_{cc}^{nj} - \rho_{rr}^{in} T_r^{nj} \} - \frac{1}{2} \Gamma \rho_{rc}^{ij} \\
& -\gamma_d \frac{(i+j)}{2} \rho_{rc}^{ij} + \gamma_d \sqrt{(i+1)(j+1)} \rho_{rc}^{i+1, j+1}
\end{aligned} \tag{96}$$

Los elementos de matriz obtenidos conducen a un sistema de $10(N+1)^2 \times 10(N+1)^2$, en donde se han considerado $N+1$ estados de oscilador *i.e.* $i, j = 0, 1, 2, \dots, N$.

Apéndice C

Espectro de energías para el transbordador de triple punto cuántico

A continuación calcularemos los elementos de matriz $\hat{H}_{qs}^{ij} = \langle i | \hat{H}_{qs} | j \rangle$ ($q, s = l, c, r$) en la representación de la base compuesta, $\mathcal{D} \otimes \mathcal{O}$, de los puntos cuánticos ($|l\rangle, |c\rangle, |r\rangle$) y del oscilador ($i, j = 0, 1, 2, \dots, N$), respectivamente:

$$H = \begin{bmatrix} H_{LL} & H_{LC} & H_{LR} \\ H_{CL} & H_{CC} & H_{CR} \\ H_{RL} & H_{RC} & H_{RR} \end{bmatrix} = H_{qs}, \quad (97)$$

los elementos de matriz del hamiltoniano H_{qs} en la base del oscilador están representados por

$$\langle i | H_{qs} | j \rangle = H_{qs}^{ij}, \quad (98)$$

donde $i, j = 0, 1, \dots, N$. Lo que nos conduce a la siguiente representación matricial:

$$H_{qs}^{ij} = \begin{bmatrix} H_{LL}^{ij} & H_{LC}^{ij} & H_{LR}^{ij} \\ H_{CL}^{ij} & H_{CC}^{ij} & H_{CR}^{ij} \\ H_{RL}^{ij} & H_{RC}^{ij} & H_{RR}^{ij} \end{bmatrix}. \quad (99)$$

Los elementos de matriz en la base compuesta $\mathcal{D} \otimes \mathcal{O}$ de los puntos cuánticos ($|l\rangle, |c\rangle, |r\rangle$), y del oscilador ($i, j = 0, 1, 2, \dots, N$), respectivamente, están dados por

$$H_{LL}^{ij} = \varepsilon_l \delta_{ij} + j\hbar\omega \delta_{ij} = (\varepsilon_l + j\hbar\omega) \delta_{ij}, \quad (100)$$

$$H_{CC}^{ij} = \left(\varepsilon_l - \frac{\varepsilon_b}{2} \right) \delta_{ij} - \Delta x_{zp} \frac{\varepsilon_b}{2x_0} \left(\sqrt{j+1} \delta_{i,j+1} + \sqrt{j} \delta_{i,j-1} \right) + j\hbar\omega \delta_{ij}, \quad (101)$$

$$H_{RR}^{ij} = (\varepsilon_r + j\hbar\omega) \delta_{ij}, \quad (102)$$

$$H_{LC}^{ij} = \hat{T}_l^{ij}(\hat{x}), \quad (103)$$

$$H_{CL}^{ij} = \hat{T}_l^{ij}(\hat{x}), \quad (104)$$

$$H_{LR}^{ij} = 0, \quad (105)$$

$$H_{RL}^{ij} = 0, \quad (106)$$

$$H_{CR}^{ij} = \hat{T}_r^{ij}(\hat{x}), \quad (107)$$

$$H_{RC}^{ij} = \hat{T}_r^{ij}(\hat{x}). \quad (108)$$

Las eigenenergías y las eigenfunciones se obtienen diagonalizando numéricamente la matriz (99) considerando

$$\varepsilon_l = \frac{\varepsilon_b}{2}, \quad (109)$$

$$\varepsilon_r = -\frac{\varepsilon_b}{2}. \quad (110)$$

Apéndice D

Resumen de productividad

A continuación se presenta una lista de los productos de investigación obtenidos durante el doctorado:

- **Artículos publicados**

1. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, **40** (2008).
Transport in an ac-driven triple dot quantum shuttle. I. Maldonado, J. Villavicencio, E. Cota y G. Platero. Páginas: 1105-1107. ISSN: 1386-9477.
2. **Applied Physics Letters**, **92** 192102 (2008). Tunnel spectroscopy in ac-driven quantum dot nanoresonators. J. Villavicencio, I. Maldonado, R. Sánchez, E. Cota y G. Platero. Páginas: 1-3. DOI:10.1063/ 1.2919797. ISSN: 00036951, 10773118.
3. **New Journal of Physics**, **13** 023032 (2011). Quasienergy spectrum and tunneling current in ac-driven triple quantum dot shuttles. J. Villavicencio, I. Maldonado, E. Cota y G. Platero. Páginas:1-18. DOI:10.1088/1367-2630/13/2/023032.

- **Congresos nacionales e internacionales**

1. NanoMex'09-Encuentro Internacional e Interdisciplinario en Nanociencia y Nanotecnología (UNAM a través del Consorcio Académico nanoUNAM). Ponencia: Estados de Floquet en Sistemas Nanoelectromecánicos. Autores:

- J. Villavicencio, I. Maldonado, E. Cota y G. Platero. Del 9-11 de noviembre de 2009, Ensenada, B.C., México.
2. XIX Latin American Symposium of Solid State Physics (SLAFES XIX). Ponencia: Effects of an ac-field on charge transport through a triple-dot quantum shuttle. Autores: E. Cota, I. Maldonado, J. Villavicencio, R. Sánchez y G. Platero. Del 5-10 de octubre de 2008, Puerto Iguazú, Argentina.
 3. The 17th International Conference on the Electronic Properties of Two-Dimensional Systems and Modulated Semiconductor Structures (EP2DS-17). Ponencia: Transport in an ac-driven triple dot quantum shuttle. Autores: I. Maldonado, J. Villavicencio, E. Cota y G. Platero. Del 15-20 de julio de 2007, Génova, Italia.
 4. XV Simposio en Ciencia de Materiales (CNyN-UNAM). Ponencia: Cuasienergías en sistemas nanoelectromecánicos simétricos. Autores: I. Maldonado, E. Cota J. Villavicencio y G. Platero. Fecha: 15 al 19 de febrero de 2010, Ensenada, B.C.
 5. XIV Simposio en Ciencia de Materiales (CNyN-UNAM). Ponencia: Análisis de Floquet de la corriente a través de NEMS. Autores: I. Maldonado, J. Villavicencio, E. Cota y G. Platero. Fecha: 10 al 13 de febrero de 2009, Ensenada, B.C.
 6. XIII Simposio en Ciencia de Materiales (CCMC-UNAM). Ponencia: Transporte de electrones en un sistema nanoelectromecánico. Autores: I. Maldonado, J. Villavicencio, E. Cota y G. Platero. Fecha: 12 al 15 febrero de 2008, Ensenada, B.C.