

TESIS DEFENDIDA POR

Rubén César Villarreal Sánchez

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

Dr. Francisco Mireles Higuera

Codirector del Comité

Dr. Ernesto E. Marinero

Codirector del Comité

Dr. Ernesto Cota Araiza

Miembro del Comité

Dr. Manuel Herrera Zaldívar

Miembro del Comité

Dra. Laura Viana Castrillón

*Coordinador del programa de
posgrado en Física de Materiales*

Dr. David Hilario Covarrubias Rosales

Director de Estudios de Posgrado

11 de Abril de 2012

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



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

**Estudio de la magnetoconductancia de dispositivos basados en
nanoconstricciones cuánticas acopladas**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

Rubén César Villarreal Sánchez

Ensenada, Baja California, México, 2012

RESUMEN de la tesis de **Rubén César Villarreal Sánchez**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS en FÍSICA DE MATERIALES. Ensenada, Baja California, Abril de 2012.

ESTUDIO DE LA MAGNETOCONDUCTANCIA DE DISPOSITIVOS BASADOS EN NANOCONSTRICCIONES CUÁNTICAS ACOPLADAS

Resumen aprobado por:

Dr. Francisco Mireles Higuera

Codirector de Tesis

Dr. Ernesto E. Marinero

Codirector de Tesis

En esta tesis realizamos un estudio numérico sistemático de la conductancia eléctrica en variedad de dispositivos cuánticos basados en estructuras cuasi-unidimensionales de una y doble constricción cuántica formados en nanoalambres semiconductores. Es de nuestro particular interés el modelar el transporte electrónico en presencia de dispersores elásticos, así como investigar la influencia de campos magnéticos en los fenómenos de interferencia cuántica en tales dispositivos. Nuestra investigación fue fuertemente motivada por experimentos de transporte realizados recientemente en dispositivos conformados por un alambre cuántico cuasi-unidimensional con una impureza artificial (hueco) embebida en el centro del alambre. La impureza artificial en conjunto con las paredes del nanoalambre promueven la formación de constricciones cuánticas cuya transmitividad electrónica es controlable independientemente por voltajes de compuerta. La metodología de este estudio numérico se basa en el uso de un Hamiltoniano de amarre fuerte que describe apropiadamente el sistema cuasi-unidimensional. Tal Hamiltoniano es empleado en el cálculo de la función de Green del sistema a través de una eficiente técnica recursiva que involucra la ecuación de Dyson. La conductancia eléctrica es determinada dentro del formalismo de transporte cuántico balístico de Landauer en el régimen de respuesta lineal. El cálculo involucra las amplitudes de transmisión electrónica a través de la evaluación de las funciones de Green en las terminales del dispositivo que son obtenidas vía las relaciones de Fisher-Lee.

Siguiendo un procedimiento sistemático para verificar la validez y versatilidad de la metodología numérica implementada, se estudió el transporte electrónico en sistemas con diferentes tipos de dispersores como impurezas puntuales localizadas, discos de potencial atractivo y repulsivo, así como barreras cuánticas inmersas en el nanoalambre. Lo anterior permitió reproducir resultados reportados en la literatura y validar la metodología numérica implementada. Asimismo logramos reproducir las principales características de las mediciones experimentales realizadas a campo magnético cero de la conductancia en constricciones cuánticas acopladas, incluyendo la cuantización de la conductancia, efectos de resonancias tipo Ramsauer, entre otros fenómenos de interferencia cuántica. A campo finito nuestros cálculos predicen la formación de oscilaciones

Aharonov-Bohm en la conductancia en tal dispositivo, así como la aparición de resonancias tipo Fano debido a la formación de estados localizados alrededor de la impureza y a un efecto de transmisión resonante entre dichos estados y estados de borde presentes en el sistema. Observamos que tales resonancias pueden ser controladas mediante la aplicación de voltajes asimétricos a las constricciones. Este fenómeno podría ser de utilidad en la fabricación de sensores de carga y de campo magnético de alta resolución de tamaño nanoscópico que funcionen a temperaturas criogénicas.

Palabras Clave: Transporte electrónico, funciones de Green, amarre fuerte, Aharonov-Bohm, resonancias Fano, Constricciones cuánticas acopladas, voltajes asimétricos

ABSTRACT of the thesis presented by **Rubén César Villarreal Sánchez**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of DOCTOR IN SCIENCES in MATERIALS PHYSICS. Ensenada, Baja California, April 2012.

STUDY OF THE MAGNETOCONDUCTANCE OF NANODEVICES BASED IN COUPLED QUANTUM POINT CONTACTS

In this thesis we performed a systematic numerical study of the electrical conductance in a variety of quantum devices based on quasi-one-dimensional structures of single and double quantum constrictions formed in semiconductor nanowires. Our particular interest is to model the electron transport in the presence of elastic scatterers, as well as to investigate the influence of magnetic fields in the quantum interference phenomena in such devices. Our research was strongly driven by transport experiments conducted recently on devices formed by a quasi-one-dimensional quantum wire with an artificial impurity (hole) embedded in the center of the wire. The artificial impurity together with the walls of the nanowire promote the formation of quantum point contacts whose transmissivity is controlled independently by electronic gate voltages. The methodology of this numerical study is based on the use of a tight binding Hamiltonian that describes appropriately the quasi-one-dimensional system. This Hamiltonian is used in the calculation of the Green function of the system through an efficient recursive technique involving the Dyson equation. The electrical conductance is determined within the formalism of ballistic quantum transport in the Landauer linear response regime. The calculation involves the electronic transmission amplitudes through the evaluation of Green's functions at the terminals of the device which are obtained via the Fisher-Lee relationships.

Following a systematic procedure to verify the validity and versatility of the numerical methodology implemented, we study the electron transport in systems with different types of scatterers as local impurities, discs with attractive and repulsive potentials as well as quantum barriers embedded in the nanowire. This allowed to reproduce results reported in the literature and validate the numerical methodology implemented. We also managed to reproduce the main features of the experimental conductance measurements performed at zero magnetic field in coupled quantum point contacts, including the quantization of the conductance and Ramsauer resonance behavior, among other quantum interference phenomena.

A finite field our calculations predict the formation of Aharonov-Bohm oscillations in conductance in such a device, as well as the appearance of Fano resonances due to the formation of localized states around the impurity and the effect of resonant transmission between these states and edge states present in the system. We note that such resonances can be controlled by applying asymmetrical voltages to the point contacts. This phenomenon could be useful in the fabrication of charge and magnetic sensors of high-resolution of nanoscopic size operating at cryogenic temperatures.

Keywords: Electronic transport, Green function, tight binding, Aharonov-Bohm, Fano resonances, Coupled quantum point contacts, asymmetric voltages

A mis padres y abuelos

Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincera y profunda gratitud a mi asesor Dr. Francisco Mireles Higuera (CNYN-UNAM) por su valiosa e invaluable ayuda para la realización de este proyecto como director del mismo. Sin su apoyo nada de esto hubiera sido posible. De la misma forma quiero agradecer al Dr. Ernesto E. Marinero (Hitachi) por la codirección del presente trabajo y sus consejos durante el desarrollo del mismo.

Agradezco a los miembros de mi comité académico Dr. Ernesto Cota Araiza y Dr. Manuel Herrera Zaldívar por el tiempo dedicado a esta tesis y las acertadas contribuciones hechas a la misma. Así como por su enseñanza académica.

Al profesor Homero Galván le agradezco por la facilidad de cómputo otorgada. A los profesores Dr. Fernando Rojas y Dr. Jesús Maytorena por su enseñanza y consejos durante mi estancia en el CNYN.

Al CONACYT por el apoyo económico brindado para la realización de mis estudios de doctorado y al CICESE por el apoyo y formación recibida.

A todo el personal del Centro de Nanociencias y Nanotecnología muchas gracias por todas sus atenciones. En particular a Juan Peralta por su apoyo técnico.

Agradezco infinitamente a mis padres Facundo y Palmira, hermanos, tías y familia porque siempre me han brindado todo el apoyo y el amor que me han impulsado para salir adelante. A todos mis amigos y compañeros del centro agradezco su incondicional amistad. Especialmente a Ramón Carrillo y Luis Burgos por despertar mi interés en el apasionante mundo de la Física. A Rodolfo Cruz por sus invaluable consejos. De manera muy especial a Priscilla Iglesias por su amor, apoyo y compañía durante este camino.

Contenido

	Página
Resumen en español	i
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	v
Agradecimientos	vi
Contenido	vii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tablas	xix
I. INTRODUCCIÓN	1
II. DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES DE DIMENSIONALIDAD REDUCIDA	10
II.1 Formación de un 2DEG	10
II.2 Alambres cuánticos cuasi-unidimensionales	13
II.2.1 Efecto del campo magnético en un alambres cuánticos	21
II.3 Anillos Cuánticos	25
II.4 Constricciones cuánticas (QPCs)	31
II.5 Efecto del espín en el transporte	35
III. FORMALISMO DE AMARRE FUERTE	38
III.1 Modelo de amarre fuerte (tight binding)	38
III.1.1 El Hamiltoniano de amarre fuerte	38
IV. MODELACIÓN DE LA MAGNETOCONDUCTANCIA EN NANODISPOSITIVOS	42
IV.1 Formalismo de funciones de Green	43
IV.1.1 Definición de función de Green	43
IV.1.2 Densidad local de estados (LDOS)	45
IV.2 Ecuación de Dyson: sumas parciales de diagramas de Feynman	46
IV.3 Esquema recursivo de funciones de Green	47
IV.4 Relación de Fisher-Lee	54

Contenido (continuación)

	Página
V. TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN NANODISPOSITIVOS: CÁLCULOS NUMÉRICOS	57
V.1 Conductancia en nanoalambres con dispersores	57
V.1.1 Nanoalambres con una impureza puntual	59
V.1.2 Nanoalambres con un disco central como dispersor	61
V.1.3 Nanoalambres con una barrera de potencial	65
V.2 Magnetotransporte	67
V.2.1 Efecto de un campo magnético sobre las dispersiones	68
V.2.2 Transporte con dispersores a $B \neq 0$	71
V.3 Cálculo de la conductancia en QPC's	80
V.3.1 Transporte a través de una QPC con campo magnético	80
V.3.2 Transporte a través de una QPC con interacción Zeeman.	83
VI. ESTUDIO TEÓRICO DEL MAGNETOTRANSPORTE EN UN NANODISPOSITIVO EXPERIMENTAL	87
VI.1 Magnetoconductancia en contricciones cuánticas acopladas	88
VI.1.1 Evidencia experimental	88
VI.1.2 Simulación del nanodispositivo de Chen <i>et al.</i> : predicciones teóricas	94
VII. NANODISPOSITIVO DE DOS CONSTRICCIONES EN PARALELO CON INTERACCIÓN ZEEMAN	112
VII.1 Efecto Zeeman en un doble QPC acoplado	112
VIII. CONCLUSIONES	119
REFERENCIAS	122
A. CAMPO MAGNÉTICO EN EL FORMALISMO DE AMARRE FUERTE	126
B. DENSIDAD LOCAL DE ESTADOS (LDOS)	130
C. FÓRMULAS DE RECURRENCIA DE LA FUNCIÓN DE GREEN TOTAL	132
D. AUTOENERGÍA DEBIDA A TERMINALES	135

Lista de Figuras

Figura	Página	
1	La conductancia en una constricción cuántica (QPC) como función del voltaje de la compuerta. La cuantización de la conductancia se presenta en unidades $2e^2/h$. El ancho (electrostático) W de la constricción crece efectivamente con el aumento del voltaje aplicado a la compuerta (ver el recuadro). Tomado de la referencia van Wees <i>et al.</i> (1988b).	2
2	Esquema de las bandas de dispersión de los estados electrónicos en una constricción (QPC) para dos valores diferentes del potencial de compuerta mostrando la modificación del potencial electrostático efectivo V_0 en la constricción. Al aumentar V_0 se reduce el número de sub-bandas ocupadas a la energía de Fermi. La diferencia en los potenciales químicos ocasiona un flujo de corriente eléctrica a través del QPC. Tomado de la referencia van Wees <i>et al.</i> (1991).	4
3	Efecto de un campo magnético sobre la conductancia a través de una constricción cuántica (QPC). El ancho de la constricción crece con el aumento del voltaje aplicado a la compuerta (ver el recuadro), mientras que el confinamiento magnético efectivo se incrementa con el campo, lo que ocasiona una disminución en el número de modos que participan en el transporte. Tomado de la referencia van Wees <i>et al.</i> (1988a).	5
4	<i>a)</i> Gráfica experimental de la conductancia en un nanodispositivo (micrografía en el recuadro inferior izquierdo) con dos constricciones cuánticas en paralelo como función de los voltajes V_1 y V_2 variados independientemente. <i>b)</i> Configuración esquemática de la apertura de las constricciones para diferentes valores de V_1 y V_2 . El número de modos que se transmiten a través de cada constricción es controlado por su nivel de apertura. Tomado de la referencia Chen <i>et al.</i> (2009)	6
5	Esquema de una heteroestructura formada de InP y InGaAs con una estequiometría específica. En la interfaz se crea un gas de electrones bidimensional. La función de onda esta cuantizada en la dirección de crecimiento de la estructura (línea verde) debido al potencial triangular creado en la interfaz por los dos materiales semiconductores diferentes (línea roja).	11

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
6	El esquema muestra una heteroestructura semiconductor formada de GaAs y AlGaAs. En ésta interfaz se crea un gas de electrones bidimensional (2DEG). En éste gas es posible crear un nanoalambre a través de electrodos colocados sobre la superficie de la heteroestructura.	14
7	Un conductor balístico está colocado entre contactos que se encuentran a un potencial químico determinado. Se muestra también los modos de propagación dentro del conductor definidos por N . Se aplica una diferencia de potencial entre los contactos para generar una corriente eléctrica.	16
8	(a) Conductor conectado a través de terminales a dos contactos. (b) Distribución de energía de los electrones en las terminales a temperatura cero. (c) Distribución de energía (Fermi-Dirac) a una temperatura diferente de cero. Figura tomada de Datta (1995).	20
9	Confinamiento parabólico en un nanoalambre cuántico en la dirección transversal a la dirección de propagación de los electrones.	22
10	Confinamiento parabólico efectivo en un nanoalambre cuántico desplazado por la intensidad de un campo magnético hacia los bordes del alambre. Donde la flecha azul representa el corrimiento del origen de la parábola con la magnitud del campo magnético.	23
11	Esquema de los estados que se transportan por el borde de un alambre y estados localizados centrales siguiendo trayectorias ciclotrónicas. . . .	24
12	Imagen SEM de una estructura metálica anular colocada sobre la superficie de una heteroestructura de InAs/AlInAs. Esta estructura anular (de radio aproximado de 1 micra) permite estudiar fenómenos de interferencia cuántica. Figura tomada del artículo de Nitta, Koga (2003). .	26

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
13	Micrografía de la superficie de una heteroestructura semiconductor en donde se muestran los electrodos colocados sobre ella para generar un nanodispositivo. El efecto electrostático creado por los electrodos debajo de la superficie, en el gas de electrones bidimensional, permite crear diferentes tipos de canales estrechos para construir nanodispositivos con confinamientos específicos. En la figura se muestra el caso particular de electrodos que generan una trayectoria anular para los electrones que se transportan en el gas, típicamente situado alrededor de 100 nm debajo de la superficie de la heteroestructura. La S simboliza la región fuente de electrones y D el colector a través de los cuales se hace pasar una corriente eléctrica. Figura tomada de Yacoby et al. (1995).	27
14	En la figura se muestra un esquema del transporte de un electrón a través de un anillo y en donde se observa la posibilidad de interferencia que podrá ser controlada con un campo magnético mediante el efecto Aharonov-Bohm.	28
15	Figura esquemática de las líneas de campo magnético generados por un solenoide. El campo magnético está confinado sólo en la región del solenoide mientras que el potencial vectorial magnético permea todo el espacio (círculos concéntricos verdes). Es este potencial vectorial, según la teoría de Aharonov-Bohm, el cual interacciona con los electrones (flechas azules en la figura) y causa una diferencia de fase según la dirección relativa del potencial vectorial y la dirección de propagación del electrón. Figura tomada del artículo de Batelaan, Tonomura (2009)	30
16	a) Se muestra un esquema de una heteroestructura con electrodos en su superficie que generan una constricción cuántica QPC . Dichos electrodos generan un potencial efectivo en el plano del nanoalambre. b) se muestra cómo varía la densidad electrónica espacialmente como consecuencia del potencial electrostático de los electrodos. Se observa en la parte central la constricción que permite observar el transporte cuantizado de carga eléctrica (figura tomada de Ihnatsenka, Zozoulenko, 2007).	32
17	En la parte superior se observa un esquema del QPC modelado. El nanoalambre tiene una longitud L_x y un ancho L_y . En la parte inferior se muestra un mapa de color del potencial del QPC en donde puede apreciarse la constricción en la parte central que obstruye el transporte electrónico.	35

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
18	Unión de varias celdas que contienen M sitios transversales hasta obtener un alambre de largo determinado.	50
19	La recursión para calcular la función de Green total del sistema inicia con una celda de la terminal (representada por el punto izquierdo) y una celda de la región central (representada por el punto derecho). Este proceso continúa hasta unir la terminal derecha en el otro extremo del nanodispositivo.	51
20	El esquema muestra puntos en donde cada uno pueden representar un sitio en un alambre unidimensional, una sección o celda en un alambre bidimensional o una columna de una estructura tridimensional. Los puntos grises representan el inicio y fin de la región central del dispositivo (denotados por 1 y N), en donde pueden estar presentes impurezas y/o campos magnéticos. Los puntos denotados por 0 y $N + 1$ representan dos terminales ideales unidas a la región central	53
21	En la gráfica a) se muestra el cálculo numérico de las dispersiones en un nanoalambre y en la gráfica b) el cálculo de la conductancia (G) como función de la energía incidente en dicho sistema. Ésto permite observar como la conductancia se cuantiza.	59
22	La gráfica a) corresponde al cálculo analítico realizado por Bagwell de la conductancia como función de la energía incidente en un nanoalambre con una impureza atractiva y repulsiva. La gráfica b) corresponde a nuestra simulación numérica aplicando RGF en donde la línea negra punteada corresponde al caso del alambre <i>sin</i> dispersor, la línea negra continua al caso de la impureza repulsiva y la línea roja continua al caso de la impureza atractiva. La simulación se realiza en un nanoalambre de 100 sitios de ancho y en donde la impureza puntual es localizada en forma asimétrica. Note la coincidencia entre los cálculos de Bagwell y nuestros cálculos empleando el método RGF.	61
23	El disco central en el nanoalambre actúa como un dispersor. El potencial del disco puede ser atractivo o repulsivo, y puede representar tanto a un disco creado electrostáticamente así como un hueco creado por ataque químico. La región del disco representa una barrera impenetrable para los electrones para el caso repulsivo y un pozo para el caso atractivo. .	62

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página	
24	Gráfica de la conductancia como función de la energía de Fermi en unidades de t . La curva <i>a</i>) (línea negra) es el caso sin disco dispersor en el nanoalambre. Las curvas <i>b</i>) y <i>c</i>) representan el caso de un disco dispersor atractivo (línea roja) y repulsivo (línea azul), respectivamente.	64
25	La barrera de potencial cuántica bidimensional inmersa en el nanoalambre, tiene una longitud L y una altura del potencial U . El nanoalambre tiene un ancho fijo W . La altura de la barrera puede modularse con el fin de estudiar el transporte electrónico a través del nanoalambre bajo la influencia de la magnitud del potencial repulsivo.	66
26	Las gráficas <i>a</i>) y <i>b</i>) muestran el cálculo numérico de Takagaki y nuestra simulación, respectivamente, de la conductancia en un nanoalambre en el cual se encuentra inmersa una barrera cuántica bidimensional de longitud L y altura U . Figura <i>a</i>) tomada de Takagaki y Ferry (1993b).	67
27	Cálculo numérico de las relaciones de dispersión de un nanoalambre sin campo magnético ($B = 0$). Se muestran diferentes sub-bandas de energía, el parámetro Φ representa el flujo magnético (Ba^2) y $\Phi_0 = h/e$ es el cuanto de flujo magnético, donde h y e son respectivamente la constante de Planck y la carga del electrón.	69
28	Cálculo numérico de la dispersión para un nanoalambre con un campo magnético B perpendicular al plano del mismo. En la gráfica <i>a</i>) el flujo magnético $\Phi/\Phi_0 = 0.02$, donde Φ representa el flujo magnético (Ba^2) y $\Phi_0 = h/e$ es el cuanto de flujo magnético. En la gráfica <i>b</i>) $\Phi/\Phi_0 = 0.07$ y la energía está en unidades del parámetro de tunelamiento t . Se observa una pendiente cero en el borde de las sub-bandas.	70
29	Cálculo de la magnetoconductancia como función de la magnitud del campo magnético para el caso de un disco con un potencial repulsivo. La gráfica <i>a</i>) corresponde al cálculo original de Nonoyama y la <i>b</i>) a la simulación numérica desarrollada. La figura <i>a</i>) es tomada de Nakamura y Nonoyama (1997).	73
30	Cálculo de la magnetoconductancia como función de la magnitud del campo magnético para el caso de un disco con un potencial atractivo. La gráfica <i>a</i>) corresponde al cálculo original de Nonoyama y la <i>b</i>) a la simulación numérica desarrollada. La figura <i>a</i>) es tomada de Nakamura y Nonoyama (1997).	75

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
31	La gráfica muestra el cálculo original de la conductancia en un nanoalambre en el cual se encuentra inmersa una barrera cuántica. Figura tomada de Takagaki y Ferry (1993b).	78
32	La gráfica muestra el comportamiento de la conductancia en un nanoalambre cuasi-unidimensional que tiene una barrera cuántica en el centro del mismo en función de la altura U de la barrera. La línea negra representa el sistema <i>sin</i> campo magnético y la línea roja cuando el campo está presente. Se observa un comportamiento descendente de la conductancia en ambos casos conforme la altura de la barrera aumenta.	79
33	Gráfica de la conductancia en unidades de $2e^2/h$ como función del potencial de la altura de la barrera en unidades de la energía de Fermi E_F . Las curvas c y d representan un alambre de ancho fijo $55a$ y diferente longitud de la barrera. La curva e representa un alambre de menor ancho $18a$ pero con una longitud de la barrera de $55a$, donde a es el parámetro de red.	80
34	Gráfica de la conductancia en unidades de $2e^2/h$ a través de un QPC como función de la energía del potencial en el punto central del QPC (<i>bottom energy</i>) para diferentes magnitudes de campo magnético. . . .	81
35	Gráfica de la conductancia en unidades de $2e^2/h$ a través de un QPC como función de la energía del potencial en el punto central del QPC (V). La magnitud del campo magnético se encuentra como parámetro en la figura y esta presente la interacción Zeeman que rompe la degeneración de espín.	85
36	Gráfica de la conductancia en unidades de $G_0 = 2e^2/h$ a través de un QPC como función de la energía del potencial en el punto central del QPC (V). La magnitud del campo magnético se encuentra como parámetro en la figura y está presente la interacción Zeeman que rompe la degeneración de espín. Se observa el desarrollo del plateau a $0.5 G_0$ cuando el campo es intenso.	86
37	a) Micrografía del dispositivo experimental. La impureza central crea dos constricciones (QPC_1 y QPC_2) en donde el ancho efectivo (apertura) puede ser controlado mediante los voltajes V_1 y V_2 , b) Esquema del nanodispositivo simulado.	89

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página
38 Medidas experimentales de la conductancia a través del nanodispositivo con dos constricciones cuánticas (QPCs) paralelas. En la figura <i>a</i> la conductancia es reportada en un mapa en tono de gris en donde los ejes corresponden a los voltajes V_1 y V_2 aplicados en los electrodos para modular la apertura de las QPCs. Entre más oscura sea una región sobre el mapa, menor es el valor de la conductancia que representa. Las letras rojas sobre el mapa indican una condición específica de modos que participan en el transporte a través de cada una de las QPC, y cuya representación esquemática se muestra en la figura <i>b</i> . (Gráfica tomada de Chen et al. 2009).	91
39 Gráfica de la conductancia a través del nanodispositivo estudiado por Chen <i>et al.</i> (2009), medida en unidades del cuanto de conductancia $G_0 = 2e^2/h$ como función del voltaje (V_1) aplicado en el <i>QPC</i> ₁ . Se muestran curvas para tres valores del voltaje V_2 aplicado en la <i>QPC</i> ₂ , -0.6 V, -0.7 V y -1.0 V, respectivamente. Las flechas sobre la curva para $V_2 = -1.0$ V señalan aumentos en la conductancia debido a fenómenos de resonancias tipo Ramsauer. Gráfica tomada de Chen et al. 2009.	92
40 A la izquierda se muestra la micrografía de la parte superior del nanodispositivo en donde se marca esquemáticamente la dirección del transporte electrónico. A la derecha un esquema del nanodispositivo en donde se define la dirección x como la dirección de propagación, en tanto que la dirección transversal es y . La impureza central (hueco) tiene un diámetro $d = 2R_h$. En la descripción discretizada del sistema se tiene una longitud de N sitios y un ancho de M sitios.	95
41 Representación tridimensional del potencial que simula el nanodispositivo estudiado experimentalmente. a) representa una configuración simétrica de las constricciones y b) una configuración asimétrica. Las letras n y m describen un sitio longitudinal y transversal respectivamente. La intensidad de la energía del potencial se mide en unidades de la energía de Fermi E_F	97
42 Mapa de color de la conductancia como función de los voltajes de compuerta V_1 y V_2 . En la figura se muestra la conductancia en donde colores oscuros se relacionan con valores bajos de conductancia, según la escala mostrada. Se observan líneas punteadas que representan valores constantes de V_1 (ver figura 43) (Villarreal <i>et al.</i> 2011).	98

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página
43	Cálculo de la conductancia en unidades de G_0 ($2e^2/h$) en función de la <i>apertura</i> de la constricción QPC_1 . Se observan curvas para diferentes valores fijos de la apertura del QPC_1 . Las flechas indican una configuración del sistema que permite que cierto número de modos pasen por una QPC específica, discutidas en el texto (Villarreal <i>et al.</i> 2011). 99
44	Esquema del potencial efectivo de la parte central del nanodispositivo en donde se muestran diferentes configuraciones particulares de apertura de las QPCs y el número específico de modos de transporte permisibles. En la figura de la izquierda ambas QPCs están cerradas, mientras que en la figura central se permite que un modo pase por una de las QPC y la otra permanece cerrada. Finalmente en la figura de la derecha se muestra una configuración en donde ambas QPCs están abiertas, por una de ellas pasan dos modos mientras que por la otra sólo uno. 100
45	Cálculo numérico de la conductancia como función de V_1 y V_2 teniendo en cuenta una capacitancia electrostática entre los electrodos que definen las dos QPCs. Se usó una constante capacitiva igual a 0.1. Note la similitud con la gráfica experimental de la figura 38. 103
46	Gráfica de la conductancia G como función del flujo magnético Φ . Se muestran cuatro configuraciones de apertura de las constricciones (QPCs) en donde se observa la aparición de resonancias a flujos magnéticos ≤ 0.05 y de antiresonancias en la conductancia para flujos altos. La figura muestra claramente la modulación de las antiresonancias mediante la asimetría de apertura de los QPCs. Las flechas señalan condiciones específicas de flujo y campo para las cuales se ha calculado la <i>densidad local de estados LDOS</i> (ver figura 47). 105
47	Mapa de color de la densidad local de estados <i>LDOS</i> para diferentes valores de flujo magnético aplicado sobre el nanodispositivo. Las figuras <i>a, b, c</i> y <i>d</i> corresponden a puntos específicos señalados en la figura 46. La escala de color muestra un alto valor de la densidad local de estados <i>LDOS</i> para colores claros y un valor bajo para colores oscuros. Las figuras <i>a, b, c</i> representan una configuración simétrica de apertura de las QPCs en el nanodispositivo, en tanto que <i>d</i> representa una configuración asimétrica. Los flujos magnéticos simulados son $\Phi = 0.06, 0.066, 0.042, 0.109$ para las figuras <i>a, b, c</i> y <i>d</i> respectivamente (Villarreal <i>et al.</i> 2011). 110

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página
48	Gráfica de la conductancia como función del flujo magnético para diferentes valores de la energía térmica (kT) en unidades de E_F . La configuración de la apertura de las constricciones del nanodispositivo es simétrica $V_1 = V_2 = 0.62(E_F)$. Se observa una rápida desaparición de las resonancias con la temperatura. 111
49	Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es simétrica. Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm. 114
50	Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es <i>asimétrica</i> . Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = 0.60E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm que son moduladas por la asimetría de apertura de las constricciones. 115
51	Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es <i>asimétrica</i> . Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = 0.58E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm que son moduladas por la asimetría de apertura de las constricciones. 116
52	Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es <i>asimétrica</i> . Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = 0.56E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm que son moduladas por la asimetría de apertura de las constricciones. 117

- 53 Se muestra un esquema de un conductor central al cual se le unen terminales en los extremos para generar un nanodispositivo cuasi unidimensional. Los puntos describen los puntos de la red que se utilizan para describir el sistema mediante el formalismo de amarre fuerte. 135

Lista de Tablas

Tabla	Página
I Dimensiones de la barrera cuántica.	77

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

En 1988 Bart J. van Wees siendo aún estudiante de doctorado en el grupo de investigación de Leo P. Kouwenhoven en la Universidad Tecnológica de Delf (Holanda), publica en colaboración con investigadores de los laboratorios Philips en el Reino Unido y Holanda la medición experimental de un novedoso fenómeno cuántico de transporte electrónico (van Wees *et al.*, 1988b). Reportan la primera observación experimental de la *cuantización de la conductancia* eléctrica en nanoconstricciones semiconductoras de dimensiones nanométricas. El fenómeno se manifiesta como saltos discretos o *plateaus* (mesetas) en la conductancia como función del ancho W de la constricción (variado por medio de voltajes de compuerta) en múltiplos enteros de $2e^2/h$, donde e es la carga del electrón y h la constante de Planck (ver figura 1). El carácter universal del cuanto de conductancia con una dependencia única a través de las constantes físicas fundamentales e y h demostraba bellamente la naturaleza cuántica de las propiedades de transporte electrónico como resultado de los efectos de confinamiento y tamaño (van Wees *et al.* (1988b), Wharam *et al.* (1988), van Wees *et al.* (1991), Yacoby (1990)).

Tomando ventaja de avanzadas técnicas de crecimiento de materiales semiconductores como la de crecimiento epitaxial por haces moleculares, le permitió a van Wees *et al.* fabricar heteroestructuras de GaAs-AlGaAs con gases de electrones bidimensionales (2DEG por sus siglas en inglés) en su interfaz, con una alta densidad ($\sim 3.6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$) y movilidad electrónica ($\sim 85 \text{m}^2/\text{V s}$) a bajas temperaturas ($\lesssim 1\text{K}$). Condiciones que son ideales para el estudio del transporte electrónico balístico, régimen donde el camino

libre medio elástico l_e e inelástico l_i son mayores que las dimensiones del conductor por el cual los electrones se mueven. Así pues, el movimiento de los electrones al no ser afectado por interacciones de la red cristalina (fonones, impurezas, etc.), es completamente determinado por la influencia de potenciales electrostáticos externos que definen el canal conductor en el 2DEG.

Cuando las dimensiones del dispositivo son comparables a la longitud de Fermi λ_F de los electrones (típicamente $\sim 40 \text{ nm}$), entonces la naturaleza ondulatoria de los electrones empieza a ser significativa, entrando al régimen balístico cuántico de transporte. Así pues, utilizando la técnica de litografía (de *split-gate*) por haces de electrones, van Wees *et al.* fabricaron una constricción cuántica (QPC por sus siglas en inglés) que operaba en el régimen cuántico balístico.

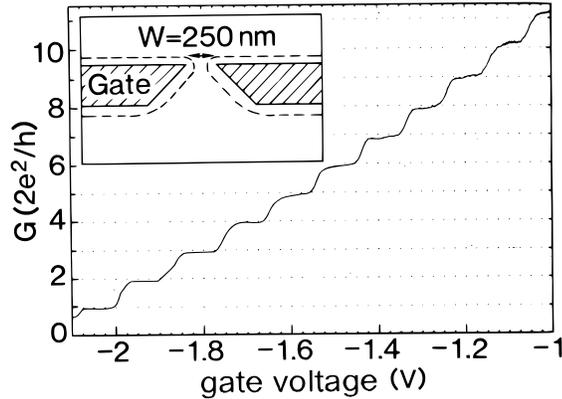


Figura 1. La conductancia en una constricción cuántica (QPC) como función del voltaje de la compuerta. La cuantización de la conductancia se presenta en unidades $2e^2/h$. El ancho (electrostático) W de la constricción crece efectivamente con el aumento del voltaje aplicado a la compuerta (ver el recuadro). Tomado de la referencia van Wees *et al.* (1988b).

Sorprendentemente, la física del efecto de la cuantización de la conductancia puede ser explicada en el marco de *partícula independiente* (sin interacciones). Fundamentalmente lo que ocurre es que al tener un sistema bidimensional de un ancho pequeño, en relación a la longitud del mismo ($W \ll L$), es decir, lo que se denomina un *alam-*

bre cuántico cuasi-unidimensional, los estados de energía se cuantizan debido al confinamiento de la función de onda en la dirección transversal a la dirección de transporte electrónico, esto siempre y cuando $\lambda_F \sim W$ (Beenakker y van Houten, 1991; Büttiker, 1990; Castaño y Kirczenow, 1990). Estos estados cuantizados generan *sub-bandas* en el perfil de dispersión energética, las cuales pueden contener como máximo dos electrones por sub-banda (uno por cada espín) a la energía de Fermi de acuerdo al principio de exclusión de Pauli. De esta forma, la constricción cuántica permite controlar el paso o la transmisión de electrones de cada sub-banda o *canal de transporte*. Por tanto sólo un número pequeño (discreto) de modos puede propagarse al nivel de Fermi produciendo el comportamiento escalonado en unidades de $2e^2/h$ de la conductancia a medida que se varía el voltaje de compuerta ¹ (ver figura 2).

van Wees *et al.* reportan ese mismo año (1988) la primera medición experimental de la influencia de un campo magnético sobre la conductancia a través de un QPC (van Wees *et al.*, 1988a). En la figura 3 se muestra la medición de la conductancia como función del voltaje de compuerta para diferentes valores de campo magnético. Es posible observar la disminución drástica de la conductancia conforme la magnitud del campo aumenta, aunque se preserva el comportamiento cuántico escalonado. Lo anterior es debido al incremento del confinamiento magnético efectivo que genera el campo induciendo una depopulación de los canales permitidos para el transporte.

Cabe mencionar que cuando se aplica un campo magnético perpendicular al plano de la constricción las sub-bandas adquieren un carácter híbrido debido a una combinación de un confinamiento eléctrico y magnético (sub-bandas magnetoeléctricas). Además

¹Note que la condición de cuantización de la conductancia no depende de la forma (perfil) de la estructura de las sub-bandas sino del número de modos permitidos (accesibles) para el transporte de electrones a la energía de Fermi E_F .

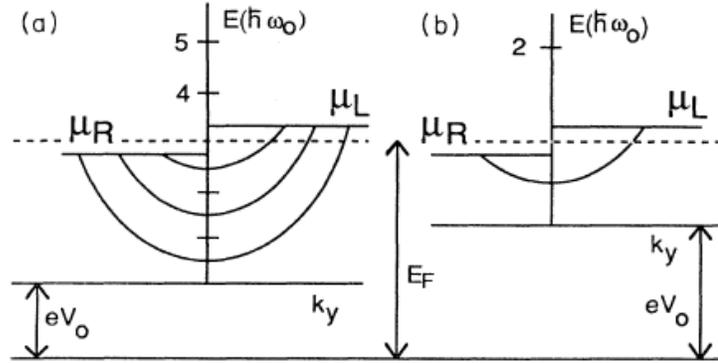


Figura 2. Esquema de las bandas de dispersión de los estados electrónicos en una constricción (QPC) para dos valores diferentes del potencial de compuerta mostrando la modificación del potencial electrostático efectivo V_0 en la constricción. Al aumentar V_0 se reduce el número de sub-bandas ocupadas a la energía de Fermi. La diferencia en los potenciales químicos ocasiona un flujo de corriente eléctrica a través del QPC. Tomado de la referencia van Wees *et al.* (1991).

debe notarse que en presencia de un campo magnético suficientemente grande ($> 1T$) los procesos de dispersión electrónica debido a un cambio abrupto en el potencial en la entrada y salida de la constricción (*backscattering*) se ven minimizados debido a la formación de estados de borde. Estos estados que efectivamente permiten el transporte de electrones por el borde de la muestra son la base del fenómeno llamado Hall cuántico. Asimismo es importante señalar que la presencia de campos magnéticos transversales también se ha empleado como una forma de direccionar electrones (*electron focusing*) a través de constricciones cuánticas (Molenkamp *et al.*, 1990; Goldman *et al.*, 1994).

Hoy en día QPCs y alambres cortos unidimensionales (nanoalambres) siguen siendo dispositivos experimentales que continúan motivando el estudio de física fundamental y de novedosos fenómenos de transporte cuántico. Entre tales estudios destaca la in-

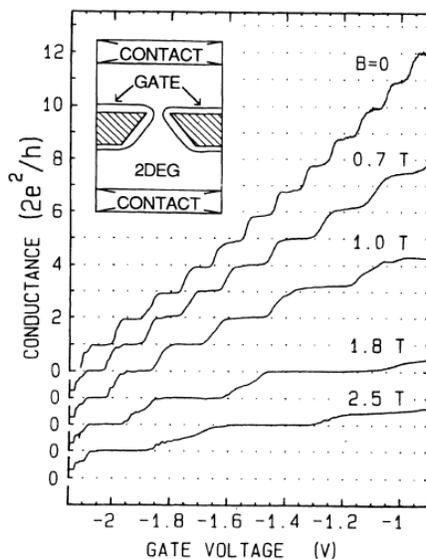


Figura 3. Efecto de un campo magnético sobre la conductancia a través de una constricción cuántica (QPC). El ancho de la constricción crece con el aumento del voltaje aplicado a la compuerta (ver el recuadro), mientras que el confinamiento magnético efectivo se incrementa con el campo, lo que ocasiona una disminución en el número de modos que participan en el transporte. Tomado de la referencia van Wees *et al.* (1988a).

investigación sobre la influencia en el transporte electrónico de impurezas y desorden, interacciones electrón-electrón, así como fenómenos relacionados con el espín, como la interacción espín-órbita (Mireles y Kirczenow (2001)), efecto Kondo (Meir *et al.* (2002); Rejec y Meir (2006)) o la llamada *anomalía 0.7* (Thomas *et al.* (1996)) aún sin un consenso en la literatura sobre su origen físico.

En particular, el acoplamiento de dos constricciones cuánticas próximas (en paralelo) creadas en 2DEGs ha permitido estudiar también fenómenos de interferencia cuántica. Por ejemplo recientemente, mediante la creación de una impureza central artificial, fabricada por ataque químico sobre una región de un alambre cuántico cuasi-unidimensional, fue posible crear un dispositivo con dos QPCs paralelos, cuyas aper-

turas pueden ser controladas electrostáticamente en forma independiente (Chen *et al.* (2009)). En la figura 4 se muestra una micrografía de este tipo de dispositivo, así como un mapa de color (en tonos de gris) de la medida de su conductancia G como función del voltaje aplicado a los electrodos que controlan la apertura efectiva de ambos QPCs.

Hasta donde sabemos, estas mediciones constituyen la primera observación experimental de la influencia que tiene sobre la conductancia la presencia de una impureza de un tamaño comparable con la longitud de onda de Fermi λ_F de un electrón en un 2DEG de AlGaAs-GaAs en el límite en donde el diámetro d de la impureza central es $d \geq \lambda_F$. Lo anterior gracias a las técnicas mejoradas actuales de litografía con haces moleculares y de electrones, aunado con las técnicas de ataque químico y/o nanoindentaciones que permiten tener un control experimental preciso de la forma, posición y tamaño de la impureza en el rango de nanómetros ($\sim 50 \text{ nm}$).

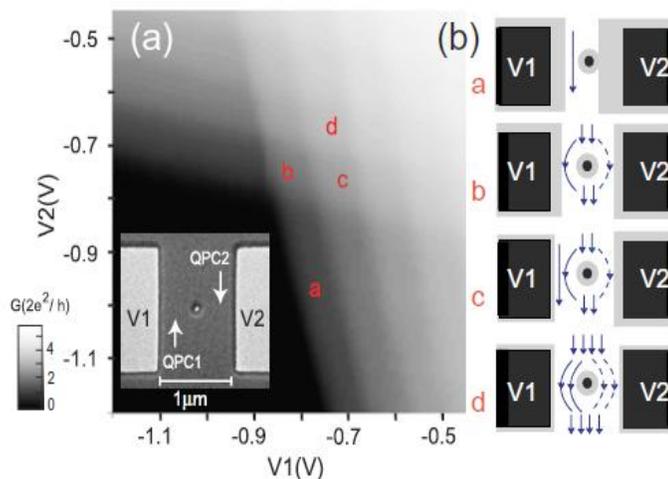


Figura 4. *a)* Gráfica experimental de la conductancia en un nanodispositivo (micrografía en el recuadro inferior izquierdo) con dos constricciones cuánticas en paralelo como función de los voltajes V_1 y V_2 variados independientemente. *b)* Configuración esquemática de la apertura de las constricciones para diferentes valores de V_1 y V_2 . El número de modos que se transmiten a través de cada constricción es controlado por su nivel de apertura. Tomado de la referencia Chen *et al.* (2009)

El acoplamiento de dos constricciones cuánticas en proximidad creadas en un 2DEG, ha sido también estudiado como un sistema que permite la medición muy sensible de carga eléctrica. Esto gracias al acoplamiento coherente entre una constricción de detección (detector) y otra constricción de operación. Física interesante tiene lugar cuando se considera el transporte electrónico en tales sistemas acoplados de QPCs. Por ejemplo la observación experimental de una resonancia en la conductancia asociada a la constricción de detección ha sido reportada recientemente en la literatura (Yoon *et al.* (2009); Bird y Ochiai (2004)). Este fenómeno ha sido atribuido a una resonancia Fano ocasionada por el traslape de la función de onda de los electrones itinerantes con un estado localizado, creado en la región entre uno de los QPCs y la constricción de detección, justo en la condición de transmisión de un solo modo a través del doble QPC.

Este tipo de acoplamiento entre QPCs ha sido también empleado en el estudio del transporte de espines en nanodispositivos. Se ha observado que la presencia de asimetrías en el potencial de confinamiento que define un QPC puede producir conductancias espín polarizadas (Debray *et al.*, 2009). Presumiblemente, los efectos de espín-órbita en el QPC via el gradiente de potencial del QPC generado por su asimetría espacial, en conjunción con efectos de correlación electrónica, producen una polarización espontánea de espín en la región del QPC. Un aspecto crucial en tal dispositivo es el control puramente electrostático de la asimetría del potencial y por ende del flujo de corriente espín-polarizada a través del QPC, operando así como un filtro de espín.

El presente trabajo de tesis doctoral comprende un estudio teórico sistemático de la magnetoconductancia en nanodispositivos basados en QPCs acopladas, tal como los estudiados en el experimento de Chen *et al.* (2009). Específicamente se está interesado en modelar su experimento e incluir la presencia de un campo magnético perpendicular que nos permita estudiar fenómenos de interferencia cuántica como el efecto *Aharonov-*

Bohm en este tipo de nanodispositivos.

En el proceso de estudio teórico-numérico del transporte electrónico balístico del dispositivo de Chen *et al.* se modelaron diversos sistemas cuánticos reportados en la literatura como alambres cuasi-unidimensionales con diferentes tipos de dispersores, *e.g.* con impurezas puntuales (Bagwell, 1990), discos (Nakamura y Nonoyama, 1997) y barreras cuánticas (Takagaki y Ferry, 1993b), además de QPCs (Ando, 1991) en ausencia y presencia de campos magnéticos externos. Esto nos permitió establecer una plataforma teórica y metodología numérica confiable y versátil para el subsecuente análisis del transporte cuántico en QPCs acoplados. Específicamente para la modelación de estos sistemas se implementó un esquema recursivo vía la ecuación de Dyson para calcular la función de Green total del sistema incluyendo los efectos de confinamiento, dispersores tales como impurezas, vacancias y barreras de potencial, además del campo magnético. Expresiones analíticas estándar (ecuaciones de Fisher-Lee) que relacionan la función de Green con las amplitudes de transmisión y reflexión electrónica son luego usadas para el subsecuente cálculo de la conductancia en respuesta lineal dentro del formalismo de Landauer de dos terminales.

Se logró modelar con éxito el experimento estudiado por Chen *et al.* La inclusión del efecto del campo magnético en tal dispositivo reveló comportamientos muy interesantes de la conductancia. Nuestros cálculos predicen la aparición de estados de borde y estados localizados alrededor de la impureza central del dispositivo. La interacción de estos estados localizados y los estados propagantes genera la aparición de resonancias y antiresonancias tipo Fano que promueven/inhiben el transporte electrónico como función de la asimetría del potencial de confinamiento de los QPCs. Estos y otros resultados importantes de mi tesis han sido publicados recientemente en la revista *Applied Physics Letters* (Villarreal *et al.*, 2011).

El resto de la tesis esta organizado de la siguiente manera: en el capítulo II se describe el marco de referencia para estudiar nanodispositivos semiconductores, en tanto que en el capítulo III se detalla el formalismo de amarre fuerte utilizado para modelar el sistema cuasi-unidimensional. En el capítulo IV se particulariza sobre el modelo teórico del cálculo recursivo de la función de Green en este tipo de dispositivos. En los capítulos V, VI y VII se presentan los resultados del estudio de magnetoconductancia en nanodispositivos creados sobre alambres cuánticos, modelación teórica de un sistema experimental de doble constricción cuántica y el sistema de doble constricción cuántica con interacción tipo Zeeman, respectivamente. Finalmente en el capítulo VIII se presentan las conclusiones y líneas futuras de investigación del presente trabajo.

Capítulo II

DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES DE DIMENSIONALIDAD REDUCIDA

En esta capítulo nos enfocaremos a describir en detalle las características y propiedades físicas de interés en variedad de dispositivos bidimensionales y cuasi-unidimensionales, tales como alambres, constricciones y anillos cuánticos conectados a reservorios de electrones (terminales). Dado que los dispositivos de interés se suponen fabricados en heteroestructuras semiconductoras (*e.g.* GaAs/AlGaAs) en las que usualmente se confinan gases de electrones bidimensionales (2DEGs) de alta movilidad electrónica, se discutirá primeramente la física y fabricación experimental de los mismos.

II.1 Formación de un 2DEG

Cuando se crece una heteroestructura semiconductor de materiales con distinta brecha energética, el material de menor brecha puede quedar distribuido entre dos capas de un material con una brecha energética mayor. La estructura que se genera se denomina *pozo cuántico*. Un ejemplo de lo anterior es una capa de GaAs colocada entre dos capas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, donde x es la fracción molar de Al con que se impurifica el GaAs (un valor típico de $x = 0.3$ produce barreras en la banda de conducción de $\sim 0.23 \text{ eV}$).

Si la función de onda esta confinada en la dirección de crecimiento de la heteroestructura z , los electrones se comportan como partículas libres en el plano x - y , es decir, sin potencial de confinamiento sobre el mismo. A este tipo de sistemas se les denomina *gases de electrones bidimensionales* (2DEGs) y constituyen la base sobre la cual se

fabrican muchos de los nanodispositivos para el estudio de transporte de carga y espín actuales. En la figura 5 se muestra un esquema de una heteroestructura semiconductor en cuya interfaz se forma un 2DEG.

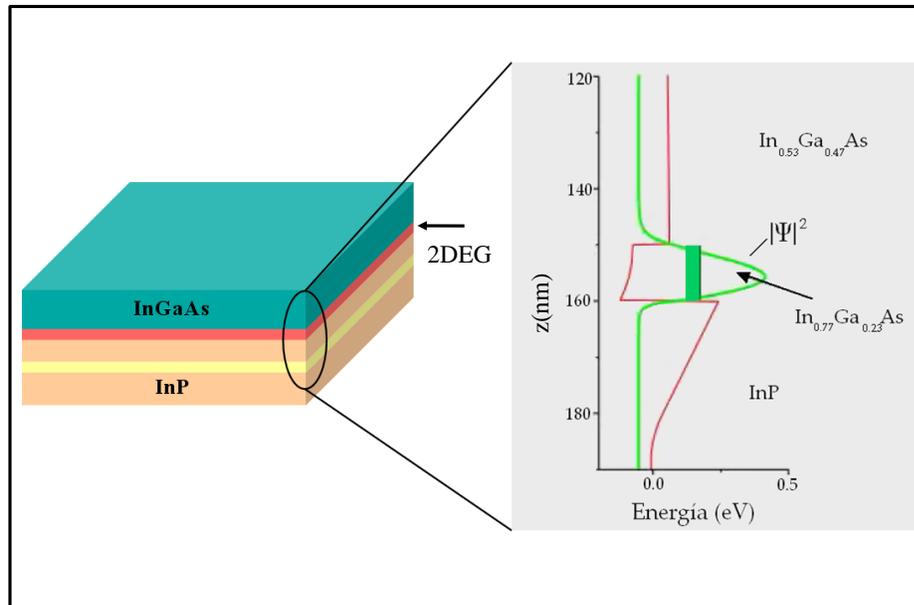


Figura 5. Esquema de una heteroestructura formada de InP y InGaAs con una estequiometría específica. En la interfaz se crea un gas de electrones bidimensional. La función de onda está cuantizada en la dirección de crecimiento de la estructura (línea verde) debido al potencial triangular creado en la interfaz por los dos materiales semiconductores diferentes (línea roja).

En una heteroestructura semiconductor como la formada por GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en conjunto con la aproximación de la función envolvente permite describir el comportamiento de los electrones de conducción mediante la ecuación de Schrödinger para la función de onda envolvente $\psi(\mathbf{r}, z)$ ¹

¹La función envolvente varía suavemente en comparación con las dimensiones de la celda unitaria del material.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\hbar^2}{2m_{||}} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_{efectivo}(z) \right] \psi(\mathbf{r}, z) = E\psi(\mathbf{r}, z) \quad (1)$$

donde $m(z)$ es la masa efectiva en la dirección de crecimiento de la heteroestructura, $m_{||}$ es la masa paralela a la interfaz, $\mathbf{r} = (x, y)$ es un vector de posición paralelo a la interfaz. El término $V_{efectivo}$ es el potencial efectivo en la dirección perpendicular a la interfaz. Este potencial puede contener contribuciones de la discontinuidad en la banda de conducción debido a la unión de dos materiales diferentes, del potencial electrostático debido a átomos donadores o aceptores con los que se dopa el material, o contribuciones debido a un potencial de interacción electrón-electrón. Finalmente, E describe el espectro de energías solución de (1).

Debido a que el potencial efectivo es sólo función de z , es posible separar la función envolvente como el producto de una función $\phi(z)$ y una función dependiente de las coordenadas espaciales en el plano. Dado que no existe un potencial en el plano para un 2DEG, esta última función se puede representar a través de una onda plana

$$\psi(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{A^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_n(z) \quad (2)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda paralelo a la interfaz, A es el área lateral de la heteroestructura y n (número entero) determina el *eigenestado* en la dirección transversal o de crecimiento de la misma. Por tanto la función de onda en la dirección de crecimiento de la heteroestructura satisface la ecuación:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V_{efectivo}(z) \right] \phi_n(z) = E_n \phi_n(z) \quad (3)$$

con E_n el eigenvalor de la ecuación anterior y en donde la energía total E esta dada por

$$E_{n,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{||}} + E_n \quad (4)$$

De esta forma, el estado de un electrón se *cuantiza* debido al potencial en la interfaz entre los dos materiales semiconductores.

II.2 Alambres cuánticos cuasi-unidimensionales

Con el desarrollo actual de técnicas litográficas de alta resolución (*e.g.* de haces moleculares y de electrones) es posible crear un sistema en donde el transporte de los electrones se realiza prácticamente en una sola dirección, es decir, un sistema *unidimensional*. A partir de un 2DEG, se puede confinar el sistema en otra de las direcciones espaciales sobre el plano. El sistema que resulta, dado que ahora los electrones son libres de moverse en sólo una de las direcciones sobre el plano, se denomina *alambre cuántico*. En dicho sistema existirá una invarianza traslacional en una de las direcciones mientras que los estados electrónicos estarán confinados en las otras dos direcciones espaciales.

Tradicionalmente los alambres cuánticos son fabricados mediante la combinación de técnicas litográficas de alta resolución y técnicas de ataque químico o físico (*etching*) (Ferry, 2009). Una técnica muy utilizada para crear alambres cuánticos, en particular para estudios de transporte electrónico, es la llamada *técnica de electrodos de compuerta* (Yacoby *et al.*, 1995). Mediante esta técnica se depositan electrodos metálicos sobre la superficie de la heteroestructura que contiene el 2DEG. Estos electrodos se someten a un potencial negativo para repeler los electrones justo por debajo de ellos, creando una región estrecha de transporte (canal de transporte).

En un alambre cuántico cuasi unidimensional la función de onda esta confinada espacialmente en dos direcciones, lo cual permite que los electrones que inciden a través del alambre sean transportados en una sola dirección a través de los diferentes modos de transporte. En la Figura 6 se muestra un esquema de un alambre cuántico creado

mediante electrodos colocados en la superficie de una heteroestructura semiconductor, formada por GaAs y AlGaAs.

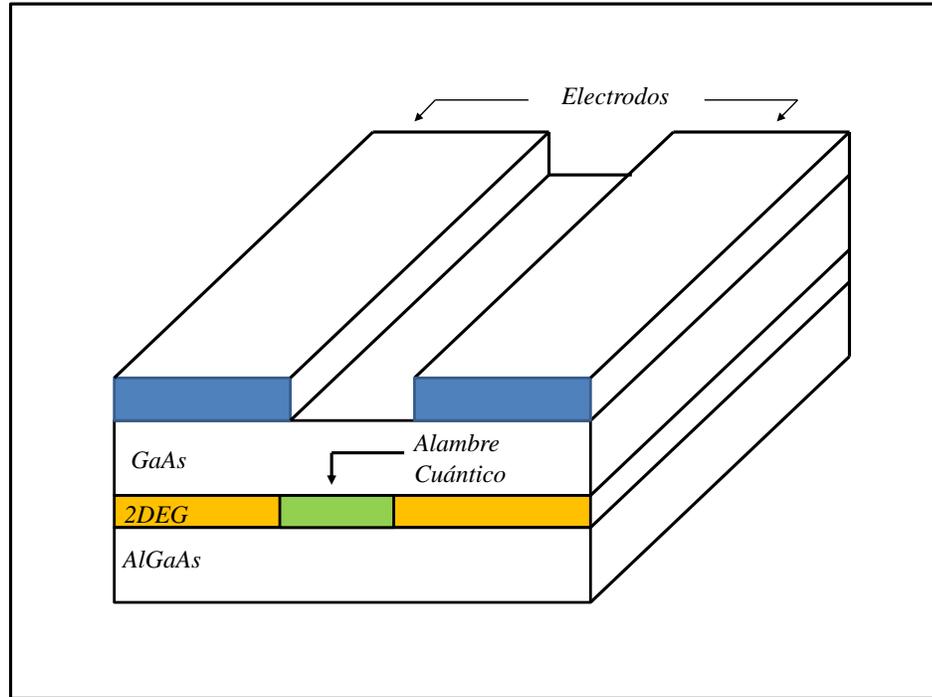


Figura 6. El esquema muestra una heteroestructura semiconductor formada de GaAs y AlGaAs. En ésta interfaz se crea un gas de electrones bidimensional (2DEG). En éste gas es posible crear un nanoalambre a través de electrodos colocados sobre la superficie de la heteroestructura.

Similarmente como en la descripción de un 2DEG en la aproximación de la función envolvente, la función de onda puede ser escrita como el producto de una solución unidimensional en una dirección y una solución del sistema confinado en las otras dos direcciones:

$$\psi(\mathbf{r}, x) = \frac{1}{L} \phi_{n,m}(\mathbf{r}) e^{ik_x x}. \quad (5)$$

donde \mathbf{r} es el vector de posición en el plano $y - z$ paralelo a la sección transversal del alambre, L es la longitud del alambre y x es la dirección de transporte. La función

$\phi_{n,m}(\mathbf{r})$ satisface la ecuación bidimensional de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right] \phi_{n,m}(\mathbf{r}) = E_{n,m} \phi_{n,m}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

donde V es el potencial de confinamiento y m^* la masa efectiva del electrón. En particular, si se considera una sección transversal del alambre en forma rectangular y se considera un potencial infinito en las paredes (paredes duras), la solución para la función $\phi_{n,m}(y, z)$ estará dada por

$$\phi_{n,m}(y, z) = \left[\frac{4}{L_y L_z} \right]^{\frac{1}{2}} \text{Sen} \frac{n\pi y}{L_y} \text{Sen} \frac{m\pi z}{L_z}. \quad (7)$$

donde n, m son números enteros y L_y, L_z son las dimensiones del alambre en la dirección y, z respectivamente. Las correspondientes eigenenergías son:

$$E_{k_x, n, m} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L_y^2} + \frac{m^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L_z^2}. \quad (8)$$

Donde k_x es el vector de onda en la dirección de propagación. Las ecuaciones anteriores permiten definir un concepto importante para el estudio del transporte en este tipo de sistemas. Cada par de número enteros n, m caracteriza lo que se denomina *sub-banda, modo o canal* de transporte.

Cada modo tiene una dispersión como la mostrada en la figura 7 y que corresponde a la ecuación 8.

La corriente eléctrica generada por los modos puede ser descrita en términos de la conductancia ($G = 1/R$) del sistema. Es posible relacionar la conductancia con la amplitud de transmisión a través del sistema mediante la *fórmula de Landauer*. A continuación se delinearán los argumentos básicos de la deducción de dicha fórmula, no en forma rigurosa pero sí con la física básica esencial.

Suponiendo que sólo el primer estado m en la dirección z se encuentra ocupado (ecuación 8) entonces, cada modo tiene una *energía de corte* ϵ_n por debajo de la cual

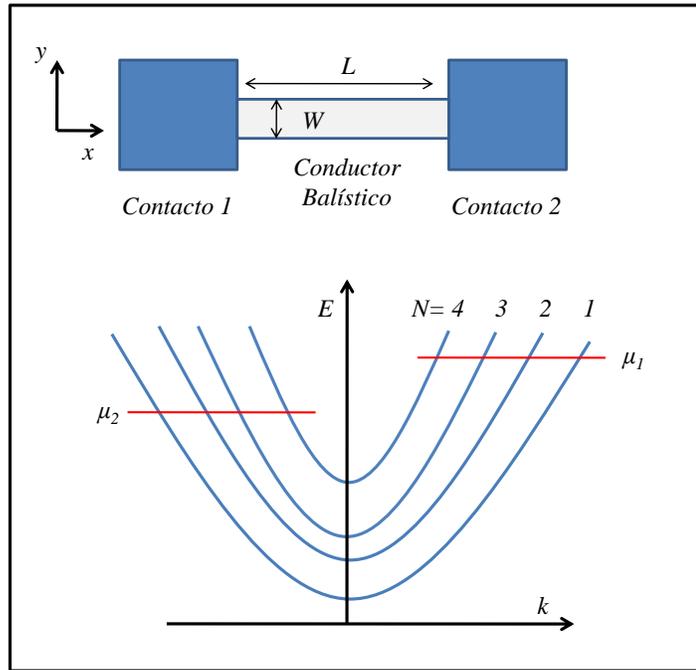


Figura 7. Un conductor balístico está colocado entre contactos que se encuentran a un potencial químico determinado. Se muestra también los modos de propagación dentro del conductor definidos por N . Se aplica una diferencia de potencial entre los contactos para generar una corriente eléctrica.

el modo no se propaga.

$$\epsilon_n = E(n, k = 0) \quad (9)$$

De esta forma, el número de modos para una energía E se obtiene contando todos aquellos modos cuya energía de corte ϵ_n sea menor a E

$$M(E) = \sum_n \Theta(E - \epsilon_n) \quad (10)$$

donde Θ es la función escalón.

Si se considera un sólo modo transversal en donde los estados $+k$ están ocupados de acuerdo a la función de distribución de Fermi-Dirac $f^+(E)$. Entonces la corriente eléctrica generada en el gas de electrones, con una densidad por unidad de longitud n

y una velocidad de los portadores v , será env . La densidad para un solo estado k en un conductor de longitud L es $1/L$, así que es posible escribir la corriente I^+ que se origina por los estados $+k$ como (Datta, 1995)

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E), \quad (11)$$

donde la sumatoria se aplica a todos los estados presentes y la velocidad v está dada por

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad (12)$$

donde k el número de onda de un estado particular.

Si se asumen condiciones periódicas y convirtiendo la sumatoria en una integral sobre k , tenemos que la corriente eléctrica moviéndose hacia la derecha puede escribirse como

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\varepsilon}^{\infty} f^+(E) dE \quad (13)$$

donde ε es la energía de corte de un modo n en el alambre. Si éste resultado se extiende para el caso en donde existen múltiples modos, tenemos:

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} f^+(E) M(E) dE \quad (14)$$

donde $M(E)$ contiene el número de modos que se encuentran por arriba de la energía de corte a una energía E dada. Si se supone además que el número de modos M es constante en el rango de energía $\mu_1 > E > \mu_2$, es posible escribir la corriente I^+ como la corriente I (a $T=0$ K) dada por

$$I = \frac{2e^2}{h} M \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}, \quad (15)$$

de donde podemos definir la conductancia

$$G_c = \frac{2e^2}{h} M, \quad (16)$$

de forma que se origina una resistencia R_c de contacto ($G_c = 1/R_c$) dada por:

$$G_c^{-1} = \frac{(\mu_1 - \mu_2)/e}{I} = \frac{h}{2e^2 M} \approx \frac{12.9 \text{ k}\Omega}{M}. \quad (17)$$

Claramente en el caso de conductores macroscópicos, el número de modos es muy grande ($M \gg 1$), de manera que la resistencia de contacto es prácticamente despreciable. Por el contrario, la resistencia de un conductor mesoscópico o menor (nanoscópico) con un solo modo ($M=1$) es aproximadamente $12.9 \text{ k}\Omega$, el cuál representa un valor de resistencia importante.

Se puede generalizar la ecuación (16) al caso en donde el conductor tiene un coeficiente de transmisión T diferente de 1, y en donde los electrones tienen una probabilidad de reflejarse. Consideremos que una sección central del conductor está conectada a terminales y que el contacto entre ellas y el conductor es *no reflectivo*. Suponga además que cada una de las dos terminales se encuentra a un potencial químico μ_1 y μ_2 respectivamente en donde los estados en la terminal izquierda están caracterizados por vector de onda $+k$ mientras que en la terminal derecha por $-k$. Entonces es posible escribir el flujo de carga que incide por la terminal izquierda (*terminal 1*) como

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} M (\mu_1 - \mu_2) \quad (18)$$

mientras que el flujo de corriente en la terminal derecha (*terminal 2*) será el flujo incidente por la probabilidad T de que el portador sea transmitido

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} M T (\mu_1 - \mu_2). \quad (19)$$

De la misma forma el flujo reflejado a la terminal 1 estará dado por

$$I_1^- = \frac{2e}{h} M (1 - T) (\mu_1 - \mu_2). \quad (20)$$

Por lo tanto el flujo *neto* de corriente en el conductor central o nanodispositivo se puede escribir como

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2). \quad (21)$$

Así, es posible reconocer el término de la conductancia en la expresión anterior

$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/|e|} = \frac{2e^2}{h}MT. \quad (22)$$

A la expresión (22) se le conoce como la fórmula de *Landauer*. Esta describe la conexión entre la conductancia eléctrica a través de un conductor mesoscópico en términos de la probabilidad de transmisión cuántica de los electrones a través del mismo (Imry y Landauer, 1999).

La fórmula de *Landauer* (22) que se derivó anteriormente supone que la temperatura es cero, además se supuso que el transporte o flujo de corriente ocurre sólo del contacto 1 al contacto 2 y no en sentido inverso. Además, se consideró que la corriente se debe a sólo un canal de energía cercano a la energía de Fermi. Estos argumentos permitieron escribir la ecuación (19). Sin embargo, en general, el transporte se lleva a cabo a través de múltiples canales de energía en el rango:

$$\mu_1 + \gamma k_B T > E > \mu - \gamma k_B T. \quad (23)$$

donde k_B es la constante de Boltzman, T la temperatura y γ una constante del orden de 1. Cada canal puede tener en general una transmisión diferente.

De esta forma, se deberá considerar la inyección de electrones a través de ambas terminales para describir el transporte en el sistema. Los electrones que inciden por la terminal izquierda (*terminal 1*) tienen una función de distribución local en equilibrio f_1 a un valor de potencial químico μ_1 , mientras que los electrones que inciden por la terminal derecha (*terminal 2*) tienen una función de distribución local en equilibrio f_2 que corresponde a un valor del potencial químico de μ_2 .

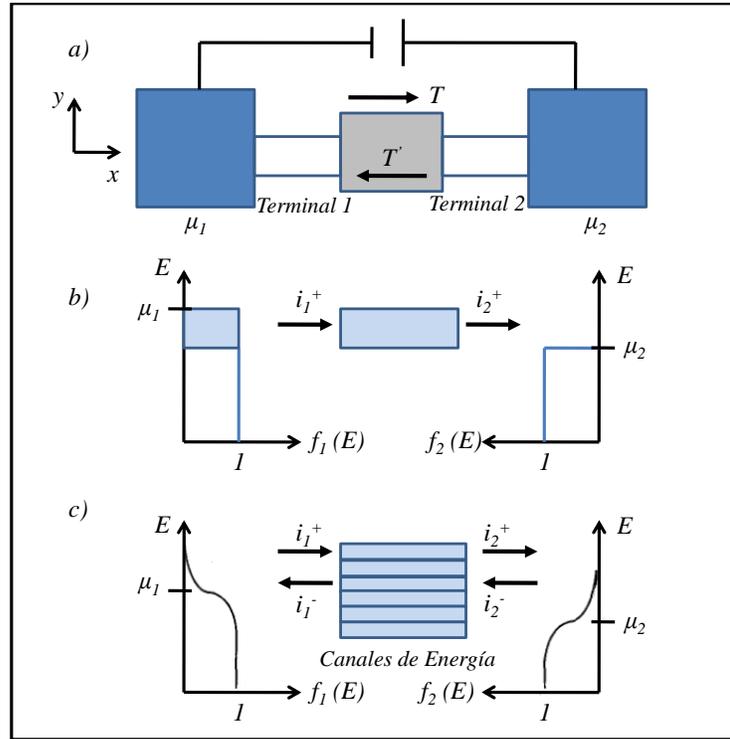


Figura 8. (a) Conductor conectado a través de terminales a dos contactos. (b) Distribución de energía de los electrones en las terminales a temperatura cero. (c) Distribución de energía (Fermi-Dirac) a una temperatura diferente de cero. Figura tomada de Datta (1995).

La función de distribución en ambas terminales es la función de distribución de Fermi-Dirac

$$f_{1,2}(E) = \left(\frac{1}{e^{\left(\frac{E-\mu_{1,2}}{k_B T}\right)} + 1} \right). \quad (24)$$

De modo que la corriente eléctrica a primer orden en $\mu_1 - \mu_2$ tomando en cuenta una temperatura finita y definiendo $\bar{T}(E) = M(E)T(E)$ se escribe como

$$I = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_1(E)}{\partial E} \Big|_{\mu_2} \right) dE \quad (25)$$

Que es la generalización de (21) a temperatura finita.

II.2.1 Efecto del campo magnético en un alambres cuánticos

Las propiedades electrónicas y de transporte de alambres cuánticos en particular, y de nanodispositivos en general, es modificada totalmente por la inclusión de un campo magnético estático aplicado sobre el dispositivo.

Si analizamos un alambre cuántico cuasi-unidimensional en el cual se define la dirección espacial y como aquella a lo largo de la cual se transportan los electrones y suponemos que tanto la dirección x como la z están confinadas, se puede estudiar el efecto de un campo magnético perpendicular al plano del alambre a través de su potencial vectorial magnético \mathbf{A} . Si suponemos que el potencial de confinamiento en la dirección transversal x es parabólico con una magnitud ω_d (ver figura 9) dado por

$$V(x) = \frac{m}{2}\omega_d^2 x^2 \quad (26)$$

donde m es la masa del electrón, entonces el Hamiltoniano efectivo de partícula independiente que describe el sistema estará dado por

$$H = \frac{\pi_x^2 + \pi_y^2}{2m} + V(x) \quad (27)$$

con $\pi = (\pi_x, \pi_y)$ que representa el momento canónico definido como $\pi = \mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r})$, donde π_x y π_y son las componentes en el plano del 2DEG del momento canónico, \mathbf{p} es el vector de momento, e y c son la carga eléctrica del electrón y la velocidad de la luz en el vacío, respectivamente.

Si se define el potencial vectorial magnético \mathbf{A} en la norma de Landau, es decir: $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, donde B es el campo magnético, el Hamiltoniano (27) toma la forma

$$H = \frac{\omega_d^2}{\omega_T^2} \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega_T^2}{2}(x - x_0)^2 \quad (28)$$

donde se ha definido

$$\omega_c = \frac{eB}{mc} \quad (29)$$

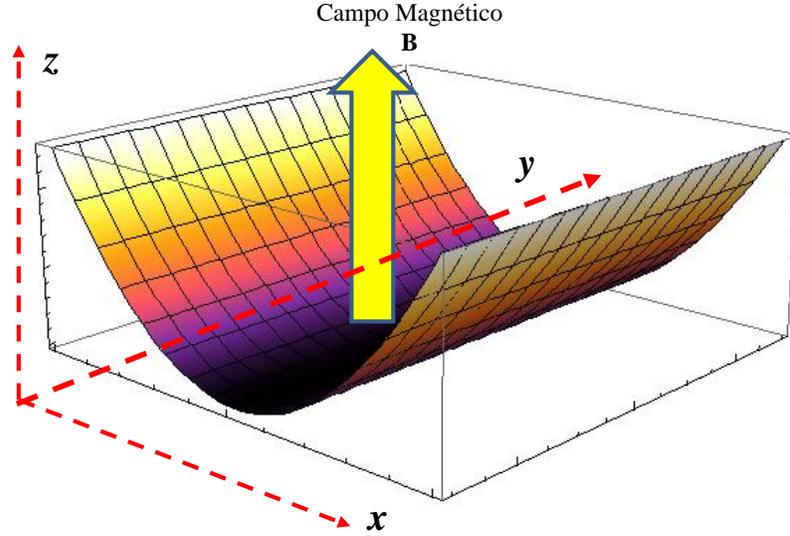


Figura 9. Confinamiento parabólico en un nanoalambre cuántico en la dirección transversal a la dirección de propagación de los electrones.

$$\omega_T = \sqrt{\omega_d^2 + \omega_c^2} \quad (30)$$

Al término ω_c se le conoce como *frecuencia de ciclotrón*. Esto muestra como el Hamiltoniano de un sistema bidimensional con un confinamiento espacial parabólico en la dirección transversal más la influencia de un campo magnético perpendicular, se puede expresar como el Hamiltoniano de un sistema con un potencial parabólico efectivo (ver ecuación 28) donde la intensidad de confinamiento se renormaliza a ω_T . Sin embargo, el centro de la parábola que origina el confinamiento efectivo esta dado por $x_0 = \omega_c p_y / \omega_T^2 m$. Lo que pone de manifiesto que el origen de la parábola se desplaza hacia los bordes del alambre conforme el campo magnético se incrementa (ver figura 10). Esto da origen a que los modos de transporte se propagen espacialmente muy cerca de los bordes, dando lugar a lo que se conoce como *estados de borde* (ver figura 11).

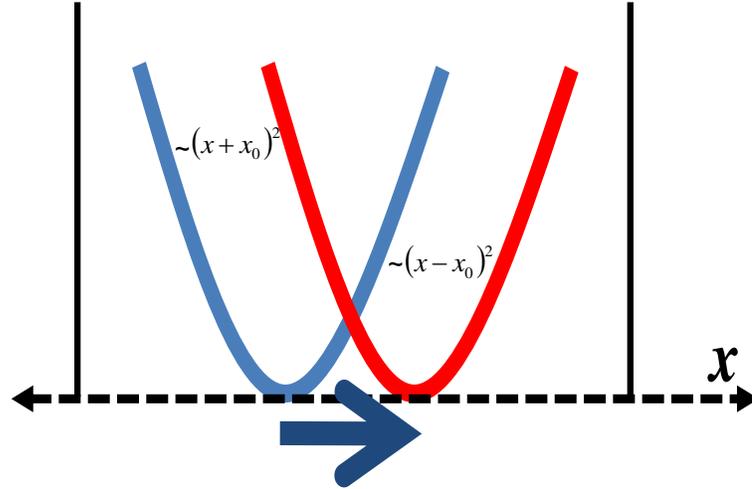


Figura 10. Confinamiento parabólico efectivo en un nanoalambre cuántico desplazado por la intensidad de un campo magnético hacia los bordes del alambre. Donde la flecha azul representa el corrimiento del origen de la parábola con la magnitud del campo magnético.

Las eigenenergías del Hamiltoniano descrito en la ec. (28) tiene solución analítica (tipo oscilador armónico) y están dadas por

$$\epsilon_{n,k} = \frac{\omega_d^2}{2m\omega_T^2} \hbar^2 k^2 + \hbar\omega_T \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (31)$$

donde n representa cada uno de los estados discretos que surgen del potencial de confinamiento. Esto muestra como la influencia de un campo magnético sobre las sub-bandas de dispersión de energía hace que se distorsionen con relación al caso sin campo magnético. Este cambio en el perfil se manifiesta en parte en un desplazamiento en energía de las sub-bandas para una energía fija. Además, conforme el campo magnético se hace más intenso, el número de modos que contribuyen al transporte va decreciendo debido al aumento en la intensidad del potencial efectivo de confinamiento ω_T (en la

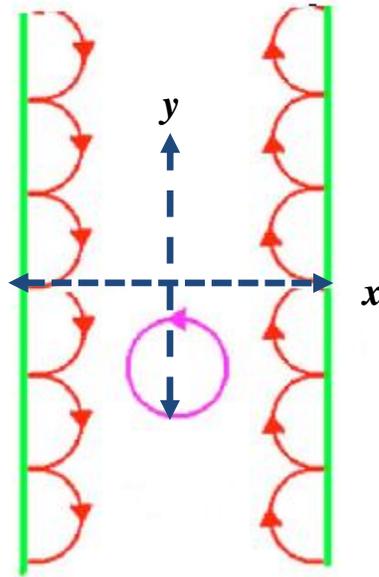


Figura 11. Esquema de los estados que se transportan por el borde de un alambre y estados localizados centrales siguiendo trayectorias ciclotrónicas.

ec. 31) hasta el caso límite en que ningún modo contribuye al transporte y por ende la conductancia es cero (esto se le conoce como depoblación de las sub-bandas).

Otro fenómeno predicho por el análisis anterior es la aparición de *estados atrapados*, es decir, de velocidad cero, cuando la magnitud del campo magnético es suficientemente grande. Lo anterior puede entenderse en simples términos, tomando en cuenta que la velocidad de propagación de un electrón en el alambre está definida como

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n, k_y)}{\partial k_y} = \frac{\hbar k_y \omega_d^2}{m \omega_T^2} \quad (32)$$

por tanto, al incrementarse la magnitud del campo magnético la velocidad va disminu-

yendo hasta el límite de tener estados que no se propagan. Estos estados se encuentran espacialmente localizados en el centro del alambre (Bellucci y Onorato, 2006; Datta, 1995). Lo anterior puede verse si se reescribe el centro de la parábola de confinamiento x_0 en términos de la velocidad

$$x_0 = v \frac{\omega_c}{\omega_d^2}, \quad (33)$$

de modo que si la velocidad tiende a cero debido a un campo magnético intenso (ver ecuación 32) entonces el origen de la parábola de confinamiento, x_0 es cero. De esta forma los estados se localizan en el centro del alambre, siguiendo (semi-clásicamente) trayectorias cerradas ciclotrónicas.

La interrelación entre estados localizados y propagantes en un nanoalambre en presencia de un campo magnético perpendicular, y con impurezas artificiales (definidas electrostáticamente o por ataque químico), será un fenómeno fundamental en la modulación del sistema experimental estudiado en el capítulo VI.

II.3 Anillos Cuánticos

Los anillos cuánticos también pueden ser fabricados a partir de un 2DEG mediante la colocación de electrodos en la superficie de la heteroestructura semiconductor y/o mediante ataque químico. En la figura 13 se muestra este tipo de electrodos que definen un anillo efectivo sobre el plano del 2DEG.

En el transporte electrónico en este tipo de sistemas se pueden generar fenómenos de interferencia cuántica cuando la longitud de onda de Fermi $\lambda_F \sim n\pi R$, con n entero positivo y R el radio del anillo. El origen de tal interferencia puede entenderse como sigue. Si consideramos la función de onda de un electrón que se propaga por trayectorias diferentes, es posible expresarlas en general como $\psi_i = A_i e^{i\phi_i}$, donde A_i es la

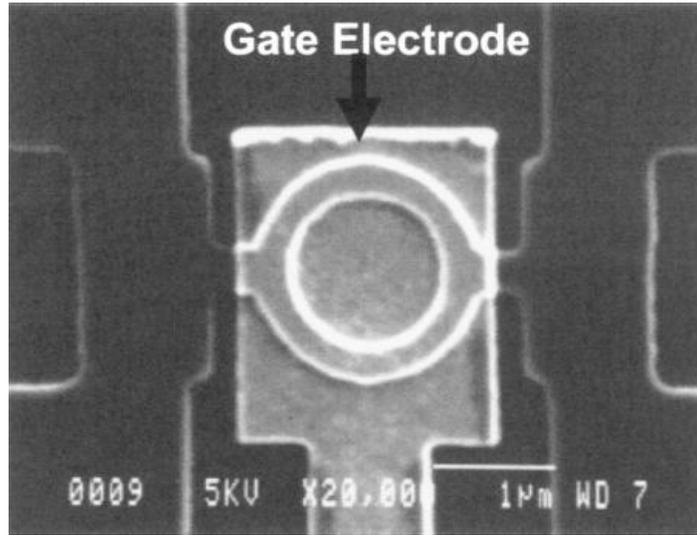


Figura 12. Imagen SEM de una estructura metálica anular colocada sobre la superficie de una heteroestructura de InAs/AlInAs. Esta estructura anular (de radio aproximado de 1 micra) permite estudiar fenómenos de interferencia cuántica. Figura tomada del artículo de Nitta, Koga (2003).

amplitud de la onda ψ que se transporta por la trayectoria i con una fase ϕ_i , donde $i = 1, 2$ con 1 denotando la trayectoria sobre la rama superior/derecha (semicírculo) y con 2 denotando la trayectoria sobre la rama inferior/izquierda (semicírculo). Cuando la geometría propia del sistema hace que estas ondas interfieran en un punto, la probabilidad de interferencia es la superposición de las amplitudes de probabilidad de ambas trayectorias y está dada por

$$P = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 4 |A_1^*| |A_2| \text{Cos}(\phi_1 - \phi_2). \quad (34)$$

Claramente, tal probabilidad depende de la diferencia de fase entre las dos ondas electrónicas. Esto tiene consecuencias importantes para el transporte electrónico. Por ejemplo, al variar tal diferencia de fase a través de un campo magnético (como veremos en detalle adelante), es posible modular la probabilidad de interferencia de las ondas

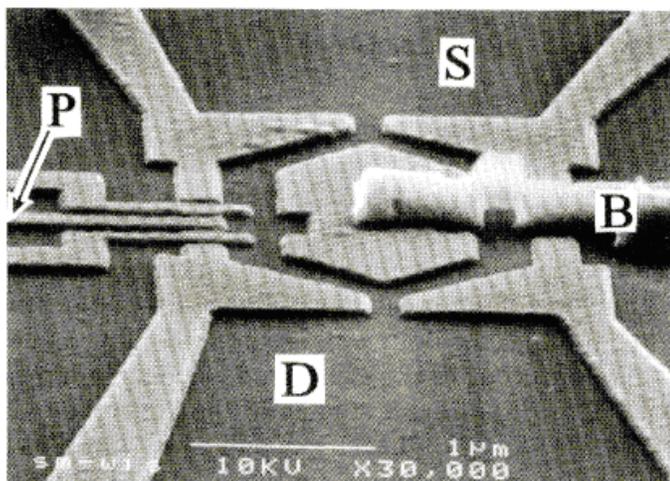


Figura 13. Micrografía de la superficie de una heteroestructura semiconductor en donde se muestran los electrodos colocados sobre ella para generar un nanodispositivo. El efecto electrostático creado por los electrodos debajo de la superficie, en el gas de electrones bidimensional, permite crear diferentes tipos de canales estrechos para construir nanodispositivos con confinamientos específicos. En la figura se muestra el caso particular de electrodos que generan una trayectoria anular para los electrones que se transportan en el gas, típicamente situado alrededor de 100 nm debajo de la superficie de la heteroestructura. La *S* simboliza la región fuente de electrones y *D* el colector a través de los cuales se hace pasar una corriente eléctrica. Figura tomada de Yacoby et al. (1995).

electrónicas y por ende las propiedades de transporte como la conductancia a través del anillo. En la figura (14) se muestra un esquema en donde un electrón es propagado a lo largo de dos trayectorias que interfieren en un punto final y esta presente un campo magnético perpendicular al anillo.

Los electrones incidentes por la parte izquierda del anillo son divididos en dos trayectorias que corresponden a cada una de las ramas del anillo y posteriormente se recombinan en la parte derecha del dispositivo. En general, la transmisión a través del sistema depende del tamaño relativo de la longitud de la circunferencia del anillo con respecto a la longitud de onda del electrón. Si el tamaño del radio del anillo es pequeño en com-

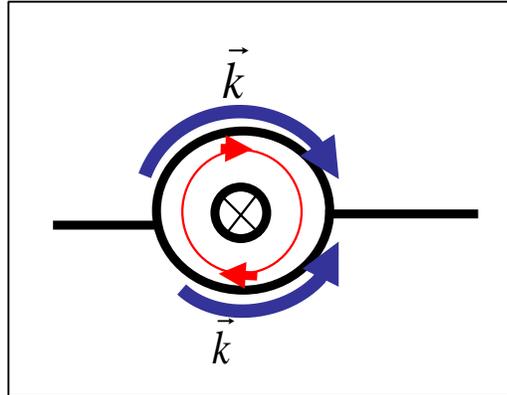


Figura 14. En la figura se muestra un esquema del transporte de un electrón a través de un anillo y en donde se observa la posibilidad de interferencia que podrá ser controlada con un campo magnético mediante el efecto Aharonov-Bohm.

paración con la longitud libre media, la transmisión a través del dispositivo depende de la fase que adquiere el electrón en cada trayectoria que describe el anillo.

La fase que adquiere un electrón en presencia del potencial vectorial magnético está dado en términos de la sustitución de Pierls, en la cual, el vector de momento \mathbf{p} es reemplazado por $(\mathbf{p} + e\mathbf{A})/\hbar$, donde \mathbf{A} es el potencial vectorial magnético, e la carga del electrón, \hbar la constante de Planck dividida por 2π y en donde es posible definir el potencial vectorial magnético a través del anillo en dirección azimutal. Esta fase está descrita por

$$\phi = \phi_0 + \frac{1}{\hbar}(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \cdot \mathbf{r} \quad (35)$$

Si suponemos que la dirección del potencial vectorial sigue el sentido contrario a las manecillas del reloj, es posible definir la fase adquirida por el electrón en cada una de las trayectorias del anillo (ver figura 14):

$$\phi_{trayectoria\ inferior} = \phi_0 + \int_{\pi}^0 \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{a}_{\theta} r d\theta \quad (36)$$

$$\phi_{trayectoria\ superior} = \phi_0 - \int_{-\pi}^0 \left(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{a}_\theta r d\theta \quad (37)$$

donde ϕ_0 es una fase que el electrón tiene inicialmente y \mathbf{a}_θ es un vector unitario en la dirección azimutal.

De esta forma, la diferencia de fases entre las dos trayectorias esta dada por

$$\delta\phi = \frac{e}{\hbar} \int_0^{2\pi} \mathbf{A} \cdot \mathbf{a}_\theta r d\theta = \frac{e}{\hbar} \int_{anillo} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dS = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (38)$$

donde $\Phi_0 = h/e$ es el *cuanto de flujo magnético* y Φ es el flujo magnético a través del anillo. Así, el término de la diferencia de fases produce una oscilación completa cada vez que el flujo magnético se incrementa en un cuanto de flujo magnético. En otras palabras, es posible modular la diferencia de fases al variar la intensidad del campo vectorial (campo magnético). Esto produce que la conductancia en un nanodispositivo en forma de anillo pueda ser modulada y sea periódica en el campo magnético con un período de h/eS donde S es el área del anillo. Esta modulación periódica es lo que se llama *efecto Aharonov-Bohm* (Aharonov y Bohm, 1959).

En este punto es importante señalar que, de acuerdo con la física clásica, una partícula cargada es influenciada por un campo magnético únicamente si la partícula se encuentra en una región del espacio en donde la magnitud del campo magnético no es cero. Sin embargo, de acuerdo a la mecánica cuántica, la onda que representa el estado de una partícula cargada, como el electrón, puede ser influenciada por un campo magnético aún cuando la partícula esté en una región donde el campo es cero. Aharonov y Bohm predijeron este fenómeno hace más de 50 años (Aharonov y Bohm, 1959) que si la onda que representa a una partícula cargada es dividida en dos ondas que van por trayectorias separadas alrededor de una solenoide que confina dentro de él un campo

magnético y estas ondas interfieren, el resultado de esta interferencia está influenciado por la magnitud del campo magnético dentro del solenoide (Batelaan y Tonomura, 2009) a pesar de que las partículas cargadas no esten expuestas directamente al campo.

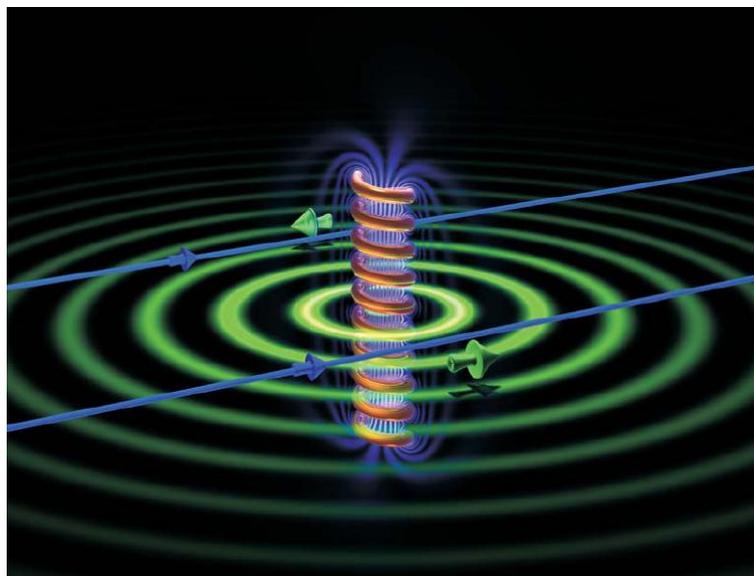


Figura 15. Figura esquemática de las líneas de campo magnético generados por un solenoide. El campo magnético está confinado sólo en la región del solenoide mientras que el potencial vectorial magnético permea todo el espacio (círculos concéntricos verdes). Es este potencial vectorial, según la teoría de Aharonov-Bohm, el cual interacciona con los electrones (flechas azules en la figura) y causa una diferencia de fase según la dirección relativa del potencial vectorial y la dirección de propagación del electrón. Figura tomada del artículo de Batelaan, Tonomura (2009)

En 1984 Richard Webb y Sean Washburn realizaron mediciones de la corriente eléctrica como función de la magnitud de un campo magnético aplicado perpendicularmente sobre una geometría de anillo evidenciando la presencia del efecto Aharonov-Bohm. Utilizando técnicas de micrografía desarrolladas en IBM fue posible producir anillos de oro con diámetros entre 0.2 y $0.8 \mu m$ en donde fue medida su magneto-

resistencia a temperaturas debajo de 1 K. Después de hacer un filtrado de las señales de ruido del experimento, encontraron que la resistencia como función del campo magnético a través del anillo exhibía oscilaciones periódicas en el campo magnético con un período de $\Delta\Phi = h/e$ que es precisamente el período predicho por Aharonov y Bohm, en donde Φ es el flujo magnético encerrado por el área del anillo (Webb y Washburn, 1988).

Es importante resaltar que este tipo de efecto es posible observarlo también en sistemas en donde no hay físicamente un anillo, pero, a través de DOTs (región con un potencial $V < 0$) o antiDOTs (región con un potencial $V > 0$) donde se crea una configuración anular *efectiva*. Lo anterior debido a que este tipo de elementos inmersos en un alambre cuántico puede generar que la propagación de los electrones se lleve a cabo en una trayectoria cerrada, como se describirá en el capítulo V donde se modela un sistema experimental de este tipo. Estos DOTs y antiDOTs pueden ser creados tanto por ataque químico como por efectos electrostáticos a través de electrodos.

II.4 Constricciones cuánticas (QPCs)

Una constricción cuántica puede ser creada similarmente mediante electrodos de compuerta colocados sobre la superficie de una heteroestructura semiconductor que contenga un 2DEG. Estos electrodos modifican el potencial efectivo que los electrones pueden experimentar durante su transporte en un alambre cuántico por ejemplo. Aplicando voltajes de compuerta, electrostáticamente, se puede producir un cuello de botella al transporte de electrones en el alambre, de ahí el término *constricción cuántica*.

El QPC puede conectarse por sus extremos a reservorios macroscópicos que suministran los electrones que se transmiten a través de él. El fuerte confinamiento lateral (semiclásicamente puede describirse a través de un potencial de punto silla) que sufren

los electrones conforme pasan a través del QPC hace que su energía se cuantice en una serie de sub-bandas.

En la figura 16 se muestra un esquema en donde se observan los electrodos colocados en la superficie de una heteroestructura que generan un potencial electrostático efectivo sobre el plano del nanoalambre, además en la misma figura se presenta la densidad electrónica en la constricción calculada numéricamente. Se observa también cómo la densidad es mínima justo por debajo de los electrodos, debido a la aplicación de un potencial repulsivo, lo que genera una constricción en el sistema (Ihnatsenka y Zozoulenko, 2007).

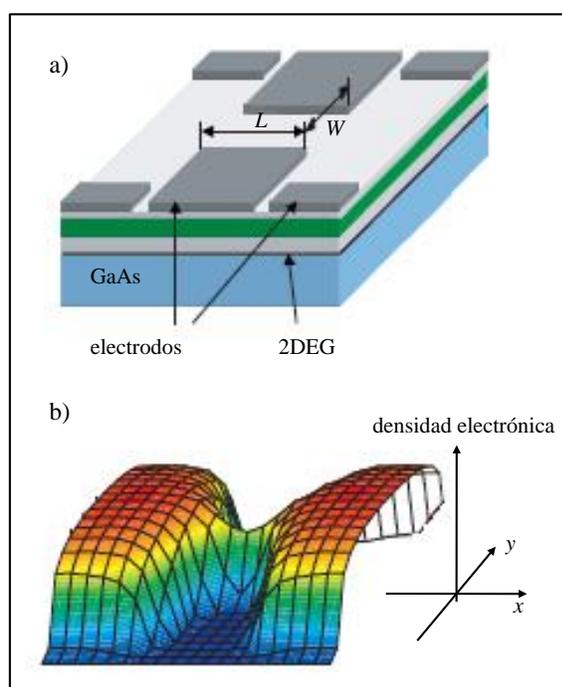


Figura 16. a) Se muestra un esquema de una heteroestructura con electrodos en su superficie que generan una constricción cuántica *QPC*. Dichos electrodos generan un potencial efectivo en el plano del nanoalambre. b) se muestra cómo varía la densidad electrónica espacialmente como consecuencia del potencial electrostático de los electrodos. Se observa en la parte central la constricción que permite observar el transporte cuantizado de carga eléctrica (figura tomada de Ihnatsenka, Zozoulenko, 2007).

Un aspecto importante en este tipo de sistemas es la posibilidad de modular electrostáticamente el ancho efectivo de la constricción mediante el potencial aplicado a los electrodos, esto permite controlar el paso de electrones a través del sistema y observar como la conductancia se cuantiza (van Wees *et al.*, 1988b; van Houten *et al.*, 1988; Wharam *et al.*, 1988; Yacoby, 1990).

Con la aplicación de un campo magnético perpendicular al plano de la constricción es posible estudiar fenómenos como la transición del régimen de cuantización de la conductancia a campo cero al régimen Hall cuántico (van Wees *et al.*, 1988a), efectos de enfocamiento de electrones (Molenkamp *et al.*, 1990) o efectos de no aditividad de la conductancia en presencia de varias constricciones cuánticas (Beenakker y van Houten, 1989).

La modelación teórica del transporte electrónico a través de constricciones cuánticas requiere de un modelo efectivo para simular el potencial electrostático del QPC en el nanoalambre.

La modelación del potencial de la constricción mediante un potencial cuadrático de la forma de silla de montar $V(x, y) = -U_x x^2 + U_y y^2 + V_0$, donde U_x y U_y es la intensidad del confinamiento en la dirección x y y respectivamente, V_0 es el punto de mínima energía del potencial y el transporte es en la dirección y , permite obtener una expresión analítica simple para el coeficiente de transmisión T en presencia de un campo magnético. Esta está dada por

$$T = \frac{1}{1 + e^{-\pi\epsilon}} \quad (39)$$

donde ϵ es un parámetro adimensional que depende de la intensidad del campo magnético y de las intensidades de confinamiento U_x y U_y en el plano (Fertig y Halperin, 1987; Büttiker, 1990).

Otro modelo (más realista) de la forma del potencial de una constricción cuántica (útil para simulaciones numéricas) es a través de la siguiente expresión (Ando, 1991)

$$V(x, y) = \frac{V}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{2\pi x}{L_x} \right) \right) + E_F \sum_{\pm} \left(\frac{y - y_{\pm}(x)}{\Delta} \right)^2 \Theta(y^2 - y_{\pm}(x)^2) \quad (40)$$

con:

$$y_{\pm}(x) = \pm \frac{L_y}{4} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi x}{L_x} \right) \right), \quad (41)$$

y donde L_x y L_y representan la longitud y ancho del nanoalambre respectivamente (ver Figura 17), V es la energía del potencial en el punto central del QPC ($x = y = 0$), Θ es la función escalón. El parámetro Δ , medido en unidades de la longitud de onda de Fermi λ_F , caracteriza el ancho del canal de la constricción.

En la Figura 17b se muestra un mapa de color del potencial modelado por la ecuación 40, en donde la dirección x es la dirección de transporte electrónico como se muestra en Figura 17a. En la Figura 17c se muestra el perfil del potencial para diferentes valores constantes de la posición longitudinal L_x .

Este tipo de constricciones cuánticas constituye la base para el estudio de nanodispositivos experimentales como el estudiado por Chen *et al.* (2009), en donde se desea estudiar la fenomenología presente en el sistema cuando se tienen dos QPCs acopladas y en donde el potencial aplicado en cada QPC puede generar una configuración asimétrica, que en conjunto con un campo magnético perpendicular permita la creación de un nanodispositivo que controle el flujo de carga eléctrica y de espín.

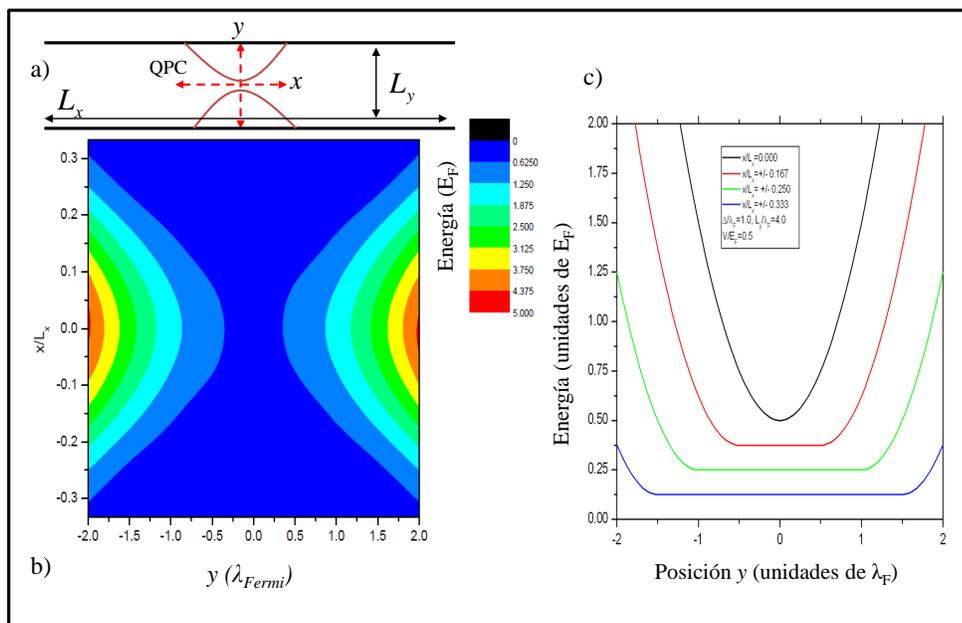


Figura 17. En la parte superior se observa un esquema del QPC modelado. El nanoalambre tiene una longitud L_x y un ancho L_y . En la parte inferior se muestra un mapa de color del potencial del QPC en donde puede apreciarse la constricción en la parte central que obstruye el transporte electrónico.

II.5 Efecto del espín en el transporte

La electrónica convencional se ha basado en la manipulación y el transporte de cargas eléctricas, ignorando por completo el grado de libertad adicional que representa el espín electrónico. No es hasta 1988, con el descubrimiento de la *magneto resistencia gigante* (GMR²) por Baibich y colaboradores (Baibich *et al.*, 1988) que se empieza a explorar las

²El efecto GMR (por sus siglas en inglés, Giant Magneto Resistance) se manifiesta cuando se hace pasar una corriente eléctrica a través de una heteroestructura compuesta de un material metálico no magnético en contacto con una capa de material ferromagnético (como hierro o cobalto) por ambos lados. En este sistema la corriente es máxima cuando la magnetización de los materiales ferromagnéticos es paralela, mientras que la corriente se minimiza cuando esta magnetización es antiparalela.

virtudes cuánticas del espín en estado sólido. El descubrimiento de GMR es considerado el comienzo de una nueva electrónica basada en el espín, llamada espín-electrónica o espintrónica (Prinz, 1998; Ziese y Thornton, 2001).

La investigación fundamental actual en espintrónica incluye la investigación teórica y experimental del control magnético, electrónico y óptico de portadores de carga polarizados en espín en semiconductores y metales. También se busca la optimización de la vida media del espín del electrón en estructuras meso y nanoscópicas (Wolf, 2001), así como el transporte de electrones y huecos con espines polarizados (Zutic *et al.*, 2004). Importante énfasis se ha dado asimismo al estudio de dispositivos espintrónicos que sean capaces de funcionar a temperatura ambiente y sean compatibles con la tecnología actual de electrónica de semiconductores (Datta y Das, 1990; Chappert *et al.*, 2007).

Un efecto que permite introducir el grado de libertad del espín en el transporte electrónico es el llamado efecto Zeeman. Este efecto es tomado en cuenta por la introducción de un Hamiltoniano que expresa el acoplamiento de un campo magnético \mathbf{B} con el momento angular de espín de los electrones, y explícitamente adquiere la forma:

$$H_{Zeeman} = \frac{1}{2}g^*\mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (42)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el operador de las matrices de Pauli, $\mu_B = e\hbar/2m_0c$ es el magnetón de Bohr, g^* es el factor efectivo de Landé (el cual es 2 en el vacío pero es diferente en semiconductores) y \mathbf{B} es el campo magnético. De esta forma, si el campo se encuentra en la dirección z , conforme la magnitud se incrementa, los estados electrónicos para espín arriba (up) y abajo (down) se encuentran separados en energía por una cantidad igual a $\Delta_{Zeeman} = g^*\mu_B B(z)$. Para semiconductores típicos este corrimiento energético es del orden ~ 10 meV para un campo magnético de $\sim 1T$ y un factor de Landé $g^* = 6$, que es comparable a la energía de Fermi característica de éstos materiales. Este

fenómeno es un mecanismo útil y explotado en el estudio de polarización de estados de espín en nanodispositivos y será estudiado en el capítulo VII. A continuación en los capítulos III y IV se describirán las técnicas y modelos numéricos que se utilizarán para el cálculo de la conductancia en los sistemas nanoscópicos de interés.

Capítulo III

FORMALISMO DE AMARRE FUERTE

III.1 Modelo de amarre fuerte (tight binding)

El modelo de *amarre fuerte* o *tight binding* es un formalismo muy utilizado en física del estado sólido en el cual se utilizan orbitales con características atómicas posicionados en un sitio específico de una nanoestructura. El Hamiltoniano de amarre fuerte es utilizado como punto de partida para el cálculo de propiedades de transporte electrónico a través de nanodispositivos en el presente trabajo. A continuación se describirá brevemente el formalismo.

III.1.1 El Hamiltoniano de amarre fuerte

El Hamiltoniano de amarre fuerte o *tight binding* tiene características periódicas que hacen que permanezca invariante cuando se realiza una operación de traslación por un vector \mathbf{l} , donde el conjunto de sitios $[\mathbf{l}]$, forma una red regular, en general en $d = 1, 2, 3$ dimensiones descrita por:

$$\mathbf{l} = \sum_{a=1}^d l_a \mathbf{r}_a. \quad (43)$$

donde $l_a = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ y \mathbf{r}_a ($a = 1, \dots, d$) son d vectores linealmente independientes que forman la base de la red. Los estados localizados en cada uno de estos sitios, forman un conjunto de funciones ortonormales con características de orbitales atómicos. En particular si $d = 3$, cada uno de los sitios \mathbf{l} de la red estará descrito por $\mathbf{l} = l_1 \mathbf{r}_1 + l_2 \mathbf{r}_2 + l_3 \mathbf{r}_3$, donde cada l_i toma valores enteros.

Con el fin de describir la dinámica de los electrones (dispersión electrónica), se calculan los elementos de matriz del Hamiltoniano de amarre fuerte en el subespacio de las funciones de orbitales atómicos, esto es

$$\langle l | H | m \rangle = \epsilon_l \delta_{lm} + V_{lm}. \quad (44)$$

donde H es el Hamiltoniano que describe al sistema cuántico, con $|m\rangle$, $|l\rangle$ los orbitales atómicos centrados en los sitios m, l respectivamente. Estos orbitales se suponen bien localizados en los sitios (m, l) , por lo que pueden modelarse a través de funciones de Wannier, por ejemplo. Los elementos de matriz diagonales están denotados por ϵ_l que representan una energía de sitio, mientras que los elementos no diagonales por V_{lm} que representa el traslape de funciones de onda entre sitios. En general se asume que $V_{ll} = 0$, lo que anula la situación sin sentido físico del traslape de los orbitales de un sitio consigo mismo.

El Hamiltoniano de amarre fuerte puede ser escrito equivalentemente en la notación de Dirac de la siguiente forma,

$$H = \sum_l |l\rangle \epsilon_l \langle l| + \sum_{lm} |l\rangle V_{lm} \langle m|, \quad V_{ll} = 0. \quad (45)$$

Es posible simplificar el Hamiltoniano asumiendo la interacción dominante es entre *primeros vecinos* y que el término de traslape $V_{l,m}$ es isotrópico y uniforme también a primeros vecinos y despreciable en cualquier otro caso, esto es que,

$$V_{lm} = \begin{cases} V, & l, m \text{ primeros vecinos} \\ 0, & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (46)$$

Se asume que el conjunto de estados ($|l\rangle$) son ortogonales (como en el caso para funciones localizadas de Wannier)

$$\langle l | m \rangle = \delta_{l,m} \quad (47)$$

Así pues, el primer término del Hamiltoniano de amarre fuerte en la ecuación 45 describe un electrón que se encuentra en un sitio l con una energía ϵ_l , mientras que el segundo término describe la energía de traslado de un electrón desde un sitio l a un sitio m mediante un elemento de la matriz de traslape V_{lm} .

Las eigenfunciones del Hamiltoniano de amarre fuerte pueden describirse a través de la superposición

$$|k\rangle = c_0 \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} |\mathbf{l}\rangle. \quad (48)$$

Estos estados corresponden a ondas propagantes en las cuales la amplitud es la misma en cada sitio y la fase varía en forma regular como $\phi_{\mathbf{l}} = \mathbf{k}\cdot\mathbf{l}$. En tanto que las eigenenergías están dadas por

$$E(k) = \epsilon_0 + V \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}}. \quad (49)$$

donde ϵ_0 es la energía de sitio (que se supone idéntica para átomos/sitios de la misma especie) y la sumatoria se realiza sobre primeros vecinos de un punto de origen.

Explícitamente, el Hamiltoniano en el formalismo de amarre fuerte para un sistema bi-dimensional en notación de Dirac puede ser escrito como:

$$H = \sum_{nm} \epsilon_{nm} |nm\rangle \langle nm| - \sum_{n,m} (V_{nm,n-1m} |nm\rangle \langle n-1m| + V_{nm,nm-1} |nm\rangle \langle nm-1| + H.c.). \quad (50)$$

en donde se ha escogido una red cuadrada tal que los puntos que la describen están situados en $x = na$ y $y = ma$, donde n y m son enteros, a es el parámetro de red y H.c. denota el Hermitiano conjugado de la expresión en cuestión. Por lo tanto $|nm\rangle$ es un conjunto ortonormal de dos componentes en la base de sitios n, m donde n representa un sitio longitudinal, m un sitio transversal y t es el parámetro de tunelamiento ($t = \hbar^2/2m^*a^2$).

El parámetro de tunelamiento en ambas direcciones puede ser expresado en forma

general, tomando en cuenta que puede existir un campo magnético perpendicular al sistema, como:

$$V_{nm,n-1m} = V_x e^{-ieA_x a/\hbar}. \quad (51)$$

$$V_{nm,nm-1} = V_y e^{-ieA_y a/\hbar}. \quad (52)$$

donde $V_x = V_y = t$ y A_x y A_y son las componentes del potencial vectorial magnético. De forma que si se escoge adecuadamente la norma para el potencial vectorial, es posible que la fase en las ecuaciones (51, 52) se anule en una de las direcciones. En particular si se escoge la norma de Landau con $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$, se produce un campo magnético en la dirección z , mientras que la fase en la dirección y se anula y sólo es diferente de cero en la dirección x (ver apéndice A).

Para el caso de un sistema de sitios bidimensional cuadrada, la eigenenergía está dada por

$$E(k) = \epsilon_0 - 2V[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]. \quad (53)$$

en donde $k_{x,y}$ son los vectores de onda en la dirección x y y respectivamente y a es el parámetro de red. En el caso particular en donde el vector de onda está cuantizado en una dirección, y por ejemplo, como en el caso de un nanoalambre cuasi-unidimensional de ancho $(M + 1)a$, la energía de cada modo j que se propaga a través del mismo, está descrita por

$$E = 4t - 2t \left[\cos k_j + \cos \left(\frac{\pi j}{M + 1} \right) \right]. \quad (54)$$

en donde se tiene que $V = t$, t es denominado parámetro de traslape o *hopping* y se ha fijado una energía de referencia ϵ_0 en el sitio igual a $4t$. Esta ecuación constituye la relación de dispersión para un nanoalambre cuántico cuasi-unidimensional en el formalismo de amarre fuerte en ausencia de iteraciones.

Capítulo IV

MODELACIÓN DE LA MAGNETOCONDUCTANCIA EN NANODISPOSITIVOS

Dentro del formalismo de transporte balístico cuántico de Landauer, la modelación de la *magnetoconductancia* en nanodispositivos requiere de la obtención de la amplitud de transmisión total del sistema, como se ha comentado anteriormente. Una forma de obtener la amplitud de transmisión a través de un nanodispositivo es mediante el cálculo de la *función de Green*. Ambas magnitudes se relacionan a través de la *relación de Fisher-Lee* (Fisher y Lee, 1981). El cálculo de la función de Green supone a su vez el conocimiento del Hamiltoniano que describe al sistema. Haciendo uso del Hamiltoniano del sistema en cuestión en el formalismo de *amarre fuerte* (*tight binding*) se calcula la función de Green total en forma discretizada del mismo. Por conveniencia numérica del método, el cálculo de la función de Green del nanodispositivo requiere utilizar un formalismo recursivo vía la ecuación de Dyson que será descrito en detalle más adelante. De esta forma, es posible tener una plataforma teórica/numérica que nos permitirá describir las observaciones experimentales y predicciones teóricas realizadas con diferentes metodologías reportadas en la literatura del transporte electrónico en nanodispositivos.

IV.1 Formalismo de funciones de Green

La aparición de problemas con valores a la frontera es una consecuencia del uso de las matemáticas en la descripción del mundo físico mediante ecuaciones diferenciales. Uno de los métodos matemáticos para resolver este tipo de problemas es conocido con el nombre de *método de funciones de Green*. El procedimiento consiste en construir una función auxiliar llamada *función de Green* la cuál permite expresar la solución de la ecuación diferencial estudiada en términos de dicha función. Por lo tanto el trabajo consiste en encontrar la función de Green apropiada para un operador diferencial determinado (Roach, 1982). En el presente trabajo la ecuación diferencial que permite la descripción del transporte electrónico en nanodispositivos está dada por una ecuación tipo Schrödinger en el contexto de teoría de masa efectiva.

IV.1.1 Definición de función de Green

La función de Green es un concepto muy útil en matemáticas puras y aplicadas. En física de estado sólido, esta puede representar la respuesta en un punto dentro del conductor debido a una excitación o perturbación en otro punto cualquiera del mismo. Podemos definir la función de Green para un sistema en términos de su Hamiltoniano a través del operador

$$G = [E - \hat{H}]^{-1}, \quad (55)$$

donde E representa la energía total y el operador \hat{H} denota el Hamiltoniano del sistema, que en el modelo en el continuo de masa efectiva está dado por

$$\hat{H} = \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (56)$$

donde \mathbf{A} , como definido anteriormente denota el potencial vectorial magnético, e es la carga eléctrica y U es el potencial total al que se encuentran sujetos los electrones. Con el fin de ejemplificar la forma de calcular explícitamente la función de Green asociada al operador (55) en forma analítica, consideraremos un sistema consistente de un alambre cuántico unidimensional con potencial constante U_0 y un potencial vectorial magnético igual a cero. El operador (55) para este caso adquiere la forma

$$G = \left[E - U_0 + \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} \right]^{-1} \quad (57)$$

el cual debe satisfacer la siguiente ecuación diferencial,

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (58)$$

Esta ecuación es muy similar a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, excepto por el término $\delta(x - x')$. Así pues, puede interpretarse a la función de Green como la función de onda evaluada en un punto x dado que se ha aplicado una excitación en un punto x' . La ecuación (58) tiene dos soluciones matemáticamente válidas que son

$$G^R(x, x') = -\frac{i}{\hbar v} e^{(ik|x-x'|)}. \quad (59)$$

$$G^A(x, x') = +\frac{i}{\hbar v} e^{(-ik|x-x'|)}. \quad (60)$$

donde $k = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$ y $v = \hbar k/m$. La función G^R , se conoce como función de Green *retardada*, en tanto que G^A se conoce como función de Green *avanzada*. De estas dos soluciones únicamente la función de Green retardada tiene un significado físicamente aceptable, ya que describe el hecho de que apartir del punto x' donde se realiza la excitación, la señal de dicha excitación se propaga hacia algún otro punto, satisfaciendo así la condición física invariante de causalidad. Por este motivo, a partir de aquí se referirá a la *función de Green retardada* únicamente con el término genérico

de *función de Green*. Solamente algunos sistemas sencillos tienen una solución analítica de la función de Green, por lo que en general se requerirá de hacer este cálculo en forma numérica, con la ventaja de poder incorporar en el sistema dispersores o potenciales de confinamiento determinado.

IV.1.2 Densidad local de estados (LDOS)

La función de Green puede ser relacionada con algunas propiedades físicas de interés, una de ellas es la densidad local de estados (LDOS¹). La forma explícita de la relación entre la función de Green y la densidad local de estados en un punto \mathbf{r} a la energía E está dada por (ver apéndice B)

$$\rho(\mathbf{r}; E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)], \quad (61)$$

note que la función de Green está evaluada en un mismo punto \mathbf{r} del espacio ($\mathbf{r}' = \mathbf{r}$). La densidad local de estados será un concepto importante utilizado en el estudio del transporte electrónico a través de un nanodispositivo particular. Básicamente, esta nos provee de información de la probabilidad que un electrón con una energía dada E se encuentre en cierta región. En particular, será útil para visualizar la aparición de regiones de alta densidad de estados en los bordes de un nanodispositivo en presencia de un campo magnético perpendicular, dando origen a los estados de borde descritos en el capítulo II.

¹por sus siglas en inglés *Local Density Of States (LDOS)*.

IV.2 Ecuación de Dyson: sumas parciales de diagramas de Feynman

Muchos de los métodos desarrollados en la teoría cuántica de interacciones electromagnéticas han sido aplicados con éxito al campo de la física del estado sólido. Algunos de éstos métodos implican el cálculo de propagadores o funciones de Green. Una forma de calcular este tipo de funciones es a través de un procedimiento general, sistemático y pictórico llamado diagramas de Feynman, después de que su inventor Richard P. Feynman los utilizó en su trabajo del premio Nobel sobre electrodinámica cuántica.

El método para calcular el propagador o función de Green consiste en expandirlo perturbativamente en una serie infinita y evaluar esta serie. Cada término de la serie, es posible representarlo a través de un diagrama de Feynman.

La forma usual de sumar términos de la serie no funciona para el propagador, debido a que la serie converge muy lentamente. Sin embargo, es posible sumar sobre algunos tipos de términos en particular hasta orden infinito. Este procedimiento es llamado sumas *parciales o selectivas*.

La ecuación de Dyson suma la contribución parcial de cierto tipo de interacciones representadas por diagramas de Feynman y es exacta. Esta ecuación relaciona la función de Green perturbada del sistema G con la función de Green no perturbada G_0 . Si se tiene un Hamiltoniano $H = H_0 + V$, donde H_0 es el Hamiltoniano del sistema no perturbado y V es una perturbación, es posible escribir la identidad

$$G = [E - H]^{-1} = [E - H_0 - V]^{-1} = [G_0^{-1} - V]^{-1}, \quad (62)$$

lo que conduce a la relación

$$G^{-1} = G_0^{-1} - V \quad (63)$$

La ecuación anterior al multiplicarse por la izquierda por G_0 y por la derecha por G puede escribirse como

$$G = G_0 + G_0VG. \quad (64)$$

A la expresión 64 se le conoce como ecuación de Dyson, y es exacta. Note que la función de Green total (perturbada) aparece en ambos lados de la ecuación, esto conduce a que su determinación sea a través de un proceso recursivo, como se discute a continuación.

IV.3 Esquema recursivo de funciones de Green

Como hemos venido comentando, la importancia de conocer la función de Green de un sistema radica en que es posible relacionar dicha función con la amplitud de transmisión y ésta a su vez con la conductancia. Esta primera relación será discutida en detalle en otra sección, en tanto que en esta sección se describirá el cálculo de la función de Green total del sistema bajo un proceso recursivo, conveniente para cálculos numéricos.

Si consideramos un nanodispositivo cuasi-unidimensional, como un alambre cuántico conectado a terminales ideales, el sistema puede ser dividido para su descripción en una región central en donde es posible introducir potenciales electrostáticos de confinamiento adicional, impurezas y/o campos magnéticos, con sus dos terminales conectadas a cada uno de los extremos de la región central.

El Hamiltoniano de partícula independiente en el formalismo de amarre fuerte para un alambre bi-dimensional puede ser escrito en términos de segunda cuantización como:

$$H = -t \sum_{n,m} (c_{n,m+1}^\dagger c_{n,m} + c_{n,m}^\dagger c_{n,m+1}) - t \sum_{n,m} (c_{n+1,m}^\dagger c_{n,m} + c_{n,m}^\dagger c_{n+1,m}) + \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} c_{n,m}^\dagger c_{n,m} \quad (65)$$

donde $c_{n,m}/c_{n,m}^\dagger$ es el operador de aniquilación/creación de un electrón en el sitio (n, m) situado en $x = na$ y $y = ma$, donde n y m son enteros. La energía de sitio

está dada por $\epsilon_{n,m} = U_{n,m} + \epsilon_0$, donde $U_{n,m}$ es un potencial en el sitio (n, m) , t es el parámetro de tunelamiento y ϵ_0 es una energía de referencia igual a $4t$. El Hamiltoniano (65) es equivalente al descrito en la sección III1.1.

También es posible describir el sistema del nanodispositivo cuasi-unidimensional a través de un Hamiltoniano escrito en términos de una sección transversal o *celda* del sistema, en lugar de sitios como en (50). Dicho Hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \sum_{n=1}^N |n\rangle H_n \langle n| + \sum_{n=1}^{N-1} [|n\rangle H_{n,n+1} \langle n+1| + H.c.] \quad (66)$$

donde $|n\rangle$ es un conjunto de M vectores de estado correspondiente a la celda n que corresponden a cada uno de los M sitios transversales de la celda. Los elementos diagonales del Hamiltoniano están dados por:

$$H_n = \begin{pmatrix} \epsilon_{n1} & -V_y^\dagger & 0 & \cdots & 0 \\ -V_y & \epsilon_{n2} & -V_y^\dagger & \cdots & 0 \\ 0 & -V_y & \epsilon_{n3} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \epsilon_{nM} \end{pmatrix}, \quad (67)$$

en donde cada uno de los elementos de la matriz son escalares, $\epsilon_{nm} = U_{nm} + 4t$ y el tunelamiento en la dirección y está dado por $V_y = t$. Es importante mencionar que si se toma en cuenta algún mecanismo dependiente del espín, cada uno de los elementos de la matriz del Hamiltoniano se transforma a una matriz de 2×2 . Si se incluye una interacción del tipo Zeeman por ejemplo, el término de la energía de sitio se transforma en $\epsilon_{nm} = (U_{nm} + 4t)\tau_0 + \gamma\sigma_z$, donde τ_0 es una matriz unidad de 2×2 y σ_z es la matriz de Pauli, además de que el término de tunelamiento se transforma en $V_y = t\tau_0$.

Los términos no diagonales del Hamiltoniano (66), que corresponden al tunelamiento

entre celdas, es decir en la dirección x , están dados por

$$(H_{n,n+1})_{p,p'} = -V_x^\dagger e^{-2\pi i\beta[p-\frac{(M+1)}{2}]} \delta_{p,p'}. \quad (68)$$

en donde $p, p' = 1, \dots, M$ y $\beta = Ba^2/\phi_0$. En (68) la fase debida al campo magnético es absorbida en el parámetro de tunelamiento en la dirección x , debido a la selección de la norma de Landau, como se ha explicado anteriormente. Una vez más, si existe un mecanismo tipo Zeeman, por ejemplo, el término de tunelamiento se transforma en una matriz de 2×2 dada por $V_x = t\tau_0$, donde τ_0 es la matriz unidad de 2×2 .

En la figura (18) se muestra un diagrama en donde se esquematiza la forma en que es posible describir un nanodispositivo cuasi-unidimensional mediante la unión de varias celdas, cada una de ellas constituida de M sitios transversales, y para la cual la forma analítica explícita de la función de Green se supone conocida. Esto hace posible la construcción de la función de Green total del sistema mediante la adición consecutiva de una celda a la vez, hasta construir un alambre de largo determinado mediante un esquema recursivo.

La idea básica en la construcción de la función de Green total de un sistema en forma recursiva se basa en que al conocer la función de Green de las partes del sistema en forma aislada, mediante la utilización de la ecuación de Dyson es posible unir estas partes aisladas, para obtener una función de Green total del sistema.

En figura (19) se representan dos puntos, cada uno de los cuales puede representar un sitio de una red unidimensional, una cadena transversal de sitios o una *rebanada* de sitios en 3D. A cada punto se asocia la correspondiente función de Green en cada sitio y las ecuaciones para obtener la función de Green total que se derivarán a continuación, son válidas para cualquier dimensionalidad.

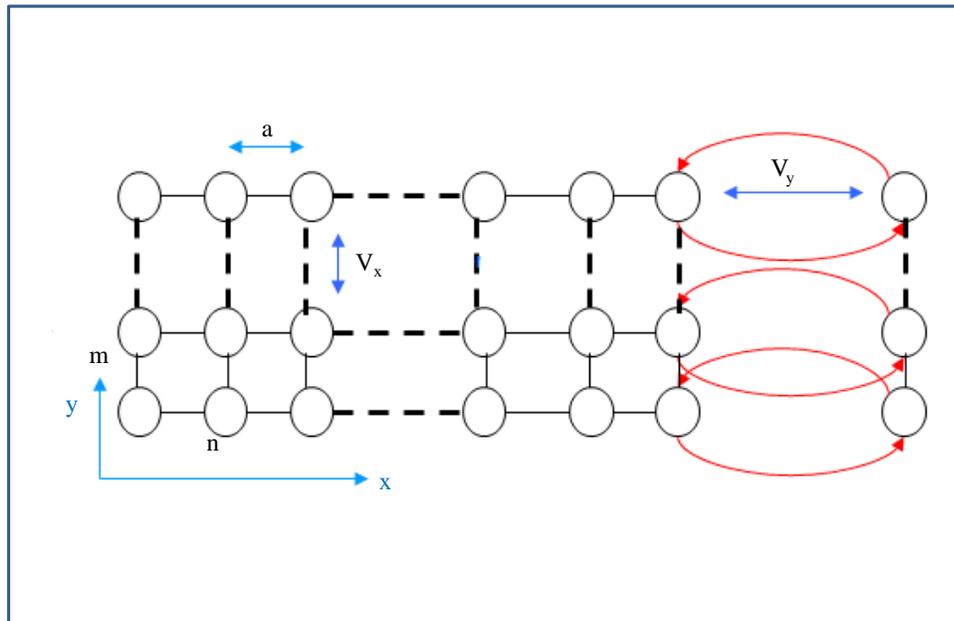


Figura 18. Unión de varias celdas que contienen M sitios transversales hasta obtener un alambre de largo determinado.

Debido a que se está interesado en calcular las propiedades de transporte a través de nanodispositivos cuasi unidimensionales, se requiere del cálculo de la función de Green total evaluada entre los puntos extremos del sistema. La recursividad para obtener una función de Green total del sistema inicia con los puntos iniciales (ver figura 19), que representan dos celda de sitios transversales. El punto izquierdo tiene una función de Green no perturbada conocida $\langle 0|G_0|0\rangle$, que representa una celda en una terminal ideal, es decir, sin impurezas ni campos magnéticos. El punto derecho representa una celda de la parte central del nanodispositivo, en donde en principio puede haber impurezas y/o campos magnéticos. La función de Green sin perturbar de este punto también es conocida, y se representa por $\langle 1|G_0|1\rangle$. Aplicando la ecuación de Dyson para obtener la función de Green total del sistema $\langle 1|G|0\rangle$ debido a una perturbación V , que implica

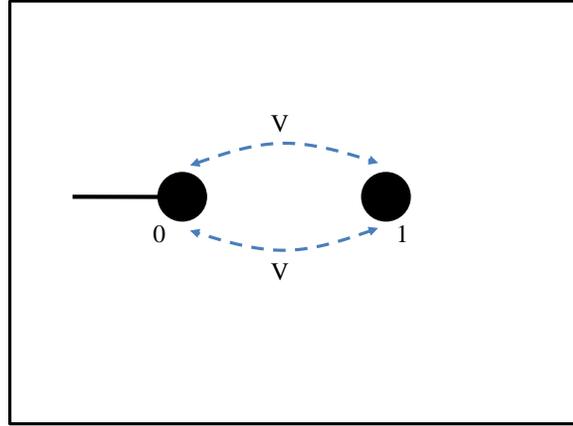


Figura 19. La recursión para calcular la función de Green total del sistema inicia con una celda de la terminal (representada por el punto izquierdo) y una celda de la región central (representada por el punto derecho). Este proceso continúa hasta unir la terminal derecha en el otro extremo del nanodispositivo.

unir éstas dos secciones, se obtiene:

$$\langle 1 | G | 0 \rangle = \langle 1 | G_0 | 0 \rangle + \langle 1 | G_0 V G | 0 \rangle \quad (69)$$

Introduciendo la propiedad de cerradura, o expansión de la unidad en términos de los estados $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$, que son eigenestados del Hamiltoniano $H |n\rangle = E_n |n\rangle$, tenemos

$$\langle 1 | G | 0 \rangle = \langle 1 | G_0 | 0 \rangle + \sum_{n,n'} \langle 1 | G_0 | n \rangle \langle n | V | n' \rangle \langle n' | G | 0 \rangle \quad (70)$$

Debido a que únicamente los elementos no diagonales de la matriz de perturbación $\langle n | V | n' \rangle$ son diferente de cero, es posible escribir la ecuación (70) como:

$$\langle 1 | G | 0 \rangle = \langle 1 | G_0 | 1 \rangle \langle 1 | V | 0 \rangle \langle 0 | G | 0 \rangle \quad (71)$$

donde el término $\langle 1|G_0|0\rangle = 0$ debido a que la función de Green no perturbada G_0 sólo tiene elementos de matriz entre los estados de la sección respectiva.

Si ahora se aplica la ecuación de Dyson al término $\langle 0|G|0\rangle$ que aparece en la ecuación anterior y se introduce la propiedad de cerradura de los estados, tenemos:

$$\langle 0|G|0\rangle = \langle 0|G_0|0\rangle + \langle 0|G_0|0\rangle \langle 0|V|1\rangle \langle 1|G|0\rangle \quad (72)$$

que representa la ecuación de Green perturbada, o total, entre los eigenestados $|0\rangle$ de la sección de la terminal. Si se sustituye (72) en la ecuación (71), tenemos:

$$\langle 1|G|0\rangle = \langle 1|G_0|1\rangle \langle 1|V|0\rangle [\langle 0|G_0|0\rangle + \langle 0|G_0|0\rangle \langle 0|V|1\rangle \langle 1|G|0\rangle] \quad (73)$$

que puede escribirse como:

$$\langle 1|G|0\rangle = [1 - \langle 1|G_0|1\rangle \langle 1|V|0\rangle \langle 0|G_0|0\rangle \langle 0|V|1\rangle]^{-1} \langle 1|G_0|1\rangle \langle 1|V|0\rangle \langle 0|G_0|0\rangle. \quad (74)$$

Esta ecuación representa la función de Green total de un sistema compuesto de dos puntos (que pueden representar secciones), la cual sólo depende de las funciones de Green sin perturbar que se suponen conocidas.

El proceso se continúa hasta adicionar el número de secciones necesarias para describir un nanodispositivo de $N + 1$ secciones (representadas por puntos en el diagrama de la fig. 20), donde la última iteración para el punto $N + 1$ corresponde a la terminal ideal derecha. De esta forma se llega a expresiones generales de recurrencia, en donde en cada paso se redefinen como funciones de Green no perturbadas a las funciones calculadas un paso de iteración anterior. La expresión genérica para obtener la función de Green total $\langle N + 1|G|0\rangle$, en donde la región central del dispositivo tiene una longitud N y las terminales están en los puntos 0 y $N + 1$ está dada por la expresión

$$\langle N + 1 | G | 0 \rangle = [1 - \langle N + 1 | G_0 | N + 1 \rangle \langle N + 1 | V | N \rangle \langle N | G_0 | N \rangle \langle N | V | N + 1 \rangle]^{-1} \langle N + 1 | G_0 | N + 1 \rangle \langle N + 1 | V | N \rangle \langle N | G_0 | 0 \rangle. \quad (75)$$

En la figura (20) se muestra un esquema con un número arbitrario de puntos para construir un nanodispositivo. Los puntos en gris representa el punto inicial y final de la sección central del nanodispositivo, en donde pueden estar presente tanto impurezas como campos magnéticos. A esta sección central se adicionan las terminales ideales izquierda y derecha como se muestra en la figura.

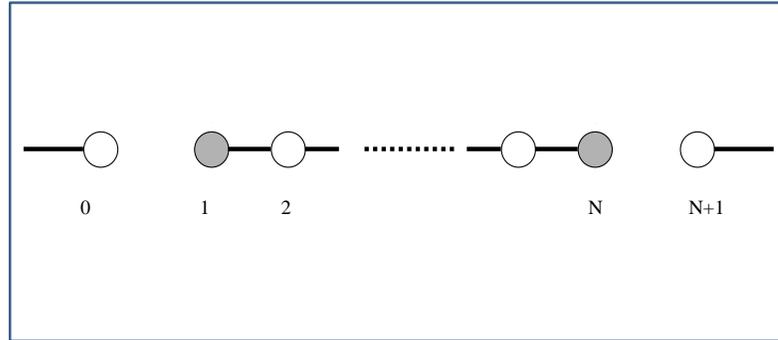


Figura 20. El esquema muestra puntos en donde cada uno pueden representar un sitio en un alambre unidimensional, una sección o celda en un alambre bidimensional o una columna de una estructura tridimensional. Los puntos grises representan el inicio y fin de la región central del dispositivo (denotados por 1 y N), en donde pueden estar presentes impurezas y/o campos magnéticos. Los puntos denotados por 0 y $N + 1$ representan dos terminales ideales unidas a la región central

La función de Green total del sistema está dada por (ver apéndice C)

$$G_{n'+1,0} = g^{n'+1} H_{n'+1,n'} G_{n',0}, \quad (0 \leq n' \leq N). \quad (76)$$

donde

$$g^{n'+1} = \left[E - \tilde{H}_{n'+1} - \Lambda^{n'} \right]. \quad (77)$$

es una matriz de dimensión $M \times M$ si no existe algún mecanismo que involucre espín, de lo contrario la matriz tiene una dimensión de $2M \times 2M$. Los elementos de la matriz $\Lambda^{n'}$ estan dados por

$$\begin{aligned} (\Lambda^{n'})_{p,p'} &= e^{2\pi i(p-p')Ba^2/\phi_0} V_x^\dagger (g^{n'})_{p,p'} V_x \\ &(p, p' = 1, \dots, M). \end{aligned} \quad (78)$$

donde a es el parámetro de red, B es el campo magnético y ϕ_0 el cuanto de flujo magnético (h/e). La recursión descrita permite calcular la función de Green total del sistema (ver apéndice C) y relacionarla con la amplitud de transmisión. Esta relación será discutida a continuación.

IV.4 Relación de Fisher-Lee

La importancia de calcular la función de Green entre los sitios extremos de un nanodispositivo de 2 terminales (contactos) radica en que dicha función puede relacionarse con la amplitud de probabilidad de que una partícula incidente sea transmitida a través del sistema (Fisher y Lee, 1981).

La relacion de Fisher-Lee establece que la amplitud de probabilidad de que un electrón incidente en el modo j sea transmitido en el modo l con una energía E está

dada por

$$t_{l,j} = \sqrt{\frac{v_j}{v_l}} \phi_{k_j}^\dagger G_{N+1,0} \Theta(E) \phi_{k_l} e^{-ik_j L_x}. \quad (79)$$

con

$$\Theta(E) = -2it \sum_{i=1}^M \text{sen } k_l Q_l. \quad (80)$$

y los elementos de la matriz Q_l dados por:

$$(Q_l)_{p,p'} = \frac{2}{M+1} \text{sen} \left(\frac{l\pi p}{M+1} \right) \text{sen} \left(\frac{l\pi p'}{M+1} \right) \\ (p, p' = 1, \dots, M). \quad (81)$$

El vector ϕ_{k_j} contiene la función de onda, en unidades del parámetro de red, en la dirección transversal en cada uno de los m sitios de la celda, y para un modo particular j está dado por

$$\phi_{k_j} = \sqrt{\frac{2}{M+1}} \left(\text{sen} \frac{\pi j}{M+1}, \dots, \text{sen} \frac{\pi j m}{M+1}, \dots, \text{sen} \frac{\pi j M}{M+1} \right)^T \quad (82)$$

La velocidad v_j para el modo j está dada por

$$v_j = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_j}. \quad (83)$$

Si en el sistema está presenta algún mecanismo en donde se conserva el espín, como la interacción Zeeman, las dimensiones de las matrices anteriores son de $2M \times 2M$, y la relación de Fisher-Lee establece la amplitud de probabilidad de que un electrón incidente en el modo j con espín σ' sea transmitido en el modo l con espín σ :

$$t_{l,j}^{\sigma,\sigma'} = \sqrt{\frac{v_j}{v_l}} \phi_{k_j,\sigma'}^\dagger G_{N+1,0} \Theta(\sigma) \phi_{k_l,\sigma} e^{-ik_j L_x}. \quad (84)$$

con

$$\Theta(\sigma) = -2it \sum_{i=1}^M \text{sen } k_l [Q_l \otimes \xi(\sigma_z)]. \quad (85)$$

donde \otimes representa el producto directo y

$$\xi(+)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (86)$$

$$\xi(-)=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (87)$$

De esta forma es posible calcular la amplitud de transmisión en términos de la función de Green del sistema. De forma similar es posible obtener una expresión para el coeficiente de reflexión $r_{l,j}^{\sigma,\sigma'}$.

Capítulo V

TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN NANODISPOSITIVOS: CÁLCULOS NUMÉRICOS

El presente capítulo inicia con un estudio numérico del comportamiento de la conductancia en un alambre con un dispersor puntual utilizando el formalismo del cálculo recursivo de la función de Green (RGF). El dispersor puntual puede representar una imperfección en la red cristalina o un potencial producido por impurezas remotas. Posteriormente se estudia la influencia de otro tipo de elementos dispersores (en forma de discos) que por la magnitud del potencial dispersor pueden considerarse impenetrables inclusive cuánticamente, así como dispersores cuánticos que pueden experimentar fenómenos de tunelamiento (barreras angostas). Finalmente se presenta un estudio del transporte electrónico a través de una *constricción cuántica (QPC)*. Adicionalmente se incorpora la influencia de un campo magnético en tales sistemas para estudiar su *magnetoconductancia*. Una vez establecida la veracidad y precisión de nuestro algoritmo al reproducir resultados numéricos reportados en la literatura, procederemos a aplicar esta metodología a sistemas más complejos, como el sistema experimental de constricciones paralelas acopladas de Chen *et al.* y el cual se discutirá en detalle en el capítulo VI.

V.1 Conductancia en nanoalambres con dispersores

En primera instancia, con el propósito de verificar la exactitud del algoritmo implementado, se calculó numéricamente la conductancia para un nanoalambre en ausencia

de dispersores. Su comparación con el resultado analítico esperado nos provee de una buena medida de la precisión de nuestros cálculos numéricos. Además estos cálculos nos servirán de referencia posteriormente cuando consideremos la situación del transporte en nanoalambres en presencia de dispersores. En la figura 21b se muestra el cálculo numérico de la conductancia para un nanoalambre en unidades del *cuanto de conductancia* $2e^2/h$ como función de la energía de Fermi de los electrones (en unidades de t). La simulación presentada se desarrolló para un nanoalambre de ancho $42a$, donde a representa el parámetro de red y el parámetro de tunelamiento está dado por $t = \hbar^2/2m^*a^2$. Y donde la energía se mide en unidades de t y las distancias en unidades de a .

El comportamiento ascendente en forma escalonado, o por *plateaus*, responde al hecho de que conforme la energía incidente aumenta, existe un mayor número de modos que contribuyen al transporte (ver figura 21b), y cada vez que la energía tiene un valor que permite que un nuevo modo contribuya, se observa un incremento en la conductancia en $2e^2/h$. El cálculo numérico de la conductancia en el nanoalambre coincide con el resultado analítico predicho por la fórmula (22) hasta la precisión de cálculo de mi computador.

Por supuesto, la cuantización de la conductancia será significativamente afectada, como se verá en las secciones siguientes, cuando en el alambre cuántico existe algún tipo de dispersor elástico.

Cabe señalar que los dispersores aquí mencionados pueden ser también creados electrostáticamente a través de electrodos de compuerta colocados en la superficie de la heteroestructura semiconductor en la que se construye el nanoalambre.

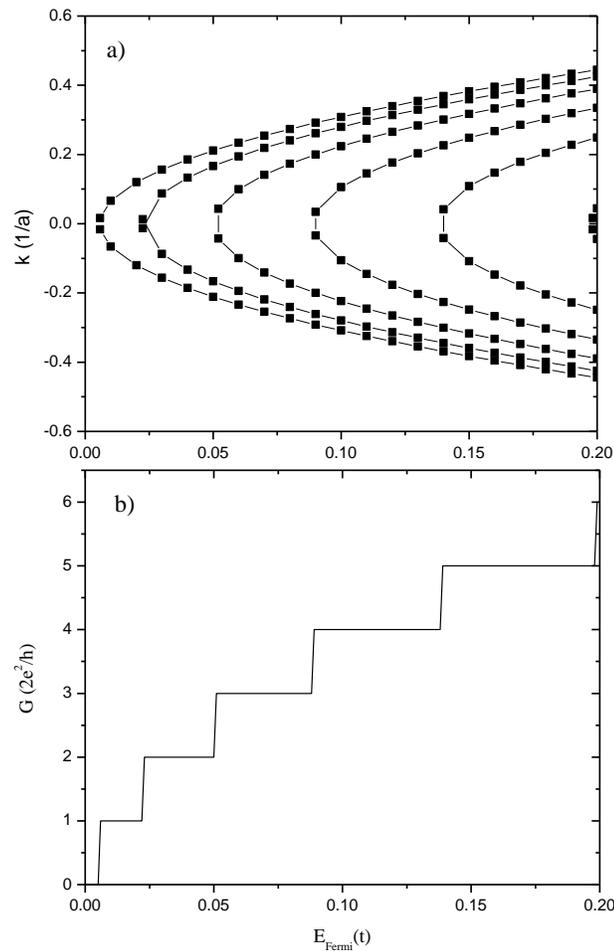


Figura 21. En la gráfica a) se muestra el cálculo numérico de las dispersiones en un nanoalambre y en la gráfica b) el cálculo de la conductancia (G) como función de la energía incidente en dicho sistema. Ésto permite observar como la conductancia se cuantiza.

V.1.1 Nanoalambres con una impureza puntual

Suponga un defecto en la red cristalina o un potencial localizado inducido por impurezas dopantes remotas en algún punto dentro del nanoalambre. La magnitud del potencial localizado puede ser tanto de tipo atractivo, es decir, una magnitud negativa del potencial, o del tipo repulsivo, en cuyo caso la magnitud del potencial es positiva (Bagwell, 1990; Chu y Sorbello, 1989).

El estudio de la conductancia a través de sistemas cuasi-unidimensionales con una

impureza puntual pone de manifiesto la influencia de los modos evanescentes creados en una región cercana a la impureza, que a su vez pueden producir un fenómeno de localización espacial de la carga eléctrica promoviendo fuertes antiresonancias en el transporte electrónico.

En la Figura 22a se presenta el cálculo de la conductancia en un nanoalambre con una impureza atractiva, y una repulsiva, como función de la energía incidente calculados por Bagwell en forma *analítica*. La forma del cálculo de la conductancia se hizo a través de la solución de la ecuación de Dyson para la función de Green, la cual tiene *solución exacta* (aunque sumamente engorrosa) para un potencial tipo delta. De esta manera, se relacionó la función de Green con la amplitud de transmisión mediante la relación de Fisher-Lee y se calculó la conductancia electrónica en el sistema.

En la gráfica 22b se presenta el cálculo que hemos efectuado en forma numérica mediante el esquema de RGF descrito en el capítulo IV. La simulación se realizó en un nanoalambre de 100 sitios de ancho, un parámetro de red $a = 2.97 \text{ \AA}$, $m^* = 0.067$, $t = \hbar^2/2m^*a^2 = 6.22eV$, y en donde la impureza puntual se localizó en forma asimétrica (en el sitio 41 de la sección transversal) con un potencial de $7.78eV$.

Puede observarse como la conductancia en el nanoalambre con una impureza repulsiva (línea negra continua) se ve ligeramente disminuida respecto al caso del nanoalambre en *ausencia* de impureza (línea negra punteada), debido a la reflexión causada por la misma. En el caso de una impureza atractiva (línea roja continua) la conductancia sufre una caída pronunciada justo cuando la energía incidente adquiere un valor tal que un nuevo modo del sistema comienza a participar en el transporte electrónico. Este comportamiento es típico en sistemas en donde el potencial es atractivo y puede entenderse como un efecto de localización de carga debido a la presencia de un estado ligado en la impureza atractiva. Este comportamiento reproduce fielmente los resultados obtenidos

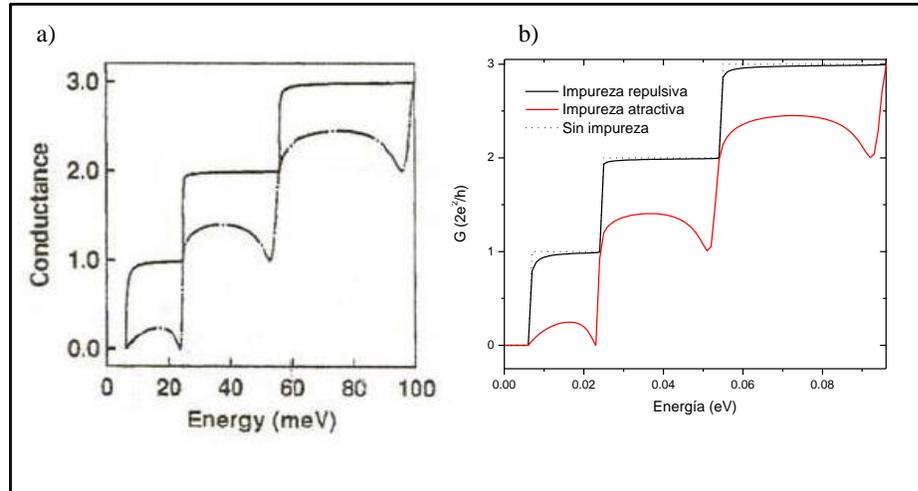


Figura 22. La gráfica a) corresponde al cálculo analítico realizado por Bagwell de la conductancia como función de la energía incidente en un nanoalambre con una impureza atractiva y repulsiva. La gráfica b) corresponde a nuestra simulación numérica aplicando RGF en donde la línea negra punteada corresponde al caso del alambre *sin* dispersor, la línea negra continua al caso de la impureza repulsiva y la línea roja continua al caso de la impureza atractiva. La simulación se realiza en un nanoalambre de 100 sitios de ancho y en donde la impureza puntual es localizada en forma asimétrica. Note la coincidencia entre los cálculos de Bagwell y nuestros cálculos empleando el método RGF.

por Bagwell (Bagwell, 1990), mostrados en la figura 22a.

V.1.2 Nanoalambres con un disco central como dispersor

Mediante la presencia de un dispersor central en forma de disco creado en el nanoalambre, cuyo diámetro ($\sim 200 \text{ nm}$) es mayor que la λ_F de semiconductores típicos ($\sim 500 \text{ nm}$) se han estudiado fenómenos de interferencia cuántica en forma teórica (Nakamura y Nonoyama, 1997) y experimental (Yacoby *et al.*, 1995). Experimentalmente

el disco dispersor puede ser una impureza neutral creada mediante técnicas de ataque químico, o un dispersor creado electrostáticamente mediante electrodos colocados en la superficie de una heteroestructura semiconductor (Nitta y Koga, 2003; Chen *et al.*, 2009). Nuestro interés en este tipo de sistemas se debe a que es posible crear QPCs acopladas mediante la inclusión de este tipo de dispersores en conjunto con electrodos metálicos, como se discutirá en el capítulo VI.

La figura 23 muestra un esquema del sistema en donde se señala la dirección en que inciden y transmiten electrones a través del mismo. La interferencia surge cuando los electrones que recorren la trayectoria superior e inferior con respecto al disco central, interfieren constructiva o destructivamente una vez que se encuentren fuera de la región de dispersión (cuando $n\lambda_F = \text{diámetro } \pi R$, con R el radio efectivo del disco).

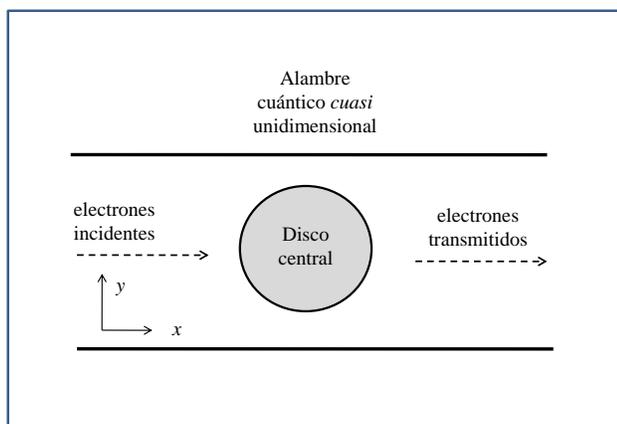


Figura 23. El disco central en el nanoalambre actúa como un dispersor. El potencial del disco puede ser atractivo o repulsivo, y puede representar tanto a un disco creado electrostáticamente así como un hueco creado por ataque químico. La región del disco representa una barrera impenetrable para los electrones para el caso repulsivo y un pozo para el caso atractivo.

Cuando el potencial del disco central es negativo, el dispersor es llamado *punto*

cuántico cuando las dimensiones son de unos cuantos nanómetros o *DOT* si son del orden de micrómetros, mientras que si es positivo se le llama *antiDot*. Ambos tipos de dispersores pueden ser creados mediante la aplicación de un voltaje a los electrodos, o por ataque químico.

En el esquema de amarre fuerte bidimensional es posible modelar este sistema a través de potenciales locales $V_{n,m} = v |n, m\rangle \langle n, m|$ donde n y m representan puntos discretos en la dirección x y y respectivamente y v la magnitud del potencial. El disco central de un radio R es formado por los puntos discretos que cumplen con la condición $\sqrt{n^2 + m^2} \leq R/a$, a los que se les asigna un valor de potencial para modelar el dispersor central. La simulación de la conductancia en este sistema se realizó en un nanoalambre de 41 sitios transversales, un radio del disco central de $16a$ y se estudiaron dos casos. El primero en el cual el disco está formado por potenciales tipo delta *atractivos* con una magnitud $v = -t$ (DOT) de cada uno de los sitios que representan el disco, y el segundo en donde el potencial es *repulsivo* con magnitud $v = 10t$ (antiDOT). Fijando el parámetro de tunelamiento para el *InAs* a un valor de $t = 1.5373eV$, la magnitud del potencial repulsivo modelado es entonces de $v = 15.373 eV$.

El disco central actúa como un dispersor elástico en el transporte electrónico. En la figura 24 se muestra la disminución de la conductancia tanto para el disco atractivo como para el repulsivo (curvas *b* y *c*), en relación al caso en donde no existe un disco dispersor en el alambre (curva *a*). El comportamiento ascendente de la conductancia que se observa en la curva *a* (discutido en la sección V.1.1), tiene su origen en el hecho de que conforme la energía incidente aumenta, también se incrementa el número de modos o sub-bandas que participan en el transporte electrónico.

Cuando el disco central está compuesto de potenciales atractivos, comienza a observarse en la conductancia la influencia de *estados ligados*, presentes en el pozo de

potencial que genera el disco atractivo (potencial negativo). Esta interacción entre los estados discretos del *pozo de potencial* y los estados continuos del alambre, da lugar a fenómenos de *localización* de carga eléctrica en la región central del nanoalambre, y es el origen de la disminución en la conductancia que se observa en la gráfica *b* de la figura 24.

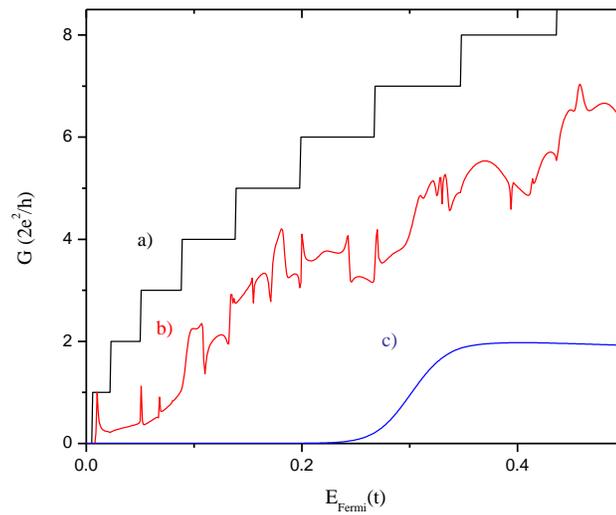


Figura 24. Gráfica de la conductancia como función de la energía de Fermi en unidades de t . La curva *a*) (línea negra) es el caso sin disco dispersor en el nanoalambre. Las curvas *b*) y *c*) representan el caso de un disco dispersor atractivo (línea roja) y repulsivo (línea azul), respectivamente.

Por el contrario, cuando el disco central está compuesto de impurezas puntuales repulsivas, el disco actúa como una barrera al transporte, y se observa una disminución drástica en la conductancia (gráfica *c* de la figura 24), respecto al caso del alambre sin dispersor. Sin embargo, debido a la ausencia de estados ligados en la región central del alambre, la interacción entre ellos y los estados propagantes del alambre desaparece, originando la eliminación de las oscilaciones en la conductancia observadas en el caso del disco atractivo.

V.1.3 Nanoalambres con una barrera de potencial

Otro tipo de sistema dispersor estudiado aquí es la presencia de una barrera cuántica en la parte central del nanoalambre. Esto es, una región central a lo largo de la sección transversal del nanoalambre con una magnitud de potencial repulsivo modulable (altura de la barrera). El interés del estudio de las propiedades de transporte electrónico en este tipo de sistemas involucra la aplicación de un campo magnético perpendicular al alambre, debido a que el transporte se desarrolla a través de estados de borde, que suprimen significativamente los procesos de reflexión en el sistema (Takagaki y Ferry, 1993b). El estudio de este sistema sin la inclusión de un campo magnético se estudia en esta sección por completéz. La descripción de la fenomenología del caso con campo magnético se hace en la siguiente sección.

Un esquema del alambre con la barrera cuántica de longitud y potencial variable L y U , respectivamente, así como un ancho fijo del alambre W se muestra en la figura 25, en donde la región de localización de la barrera está dada por:

$$V(x, y) = \begin{cases} U & 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{en otra parte} \end{cases} \quad (88)$$

En la figura 26a se presenta el cálculo desarrollado por Takagaki y Ferry (1993b) de la transmisión en el nanoalambre como función de la altura U de la barrera. El método de cálculo fue mediante un esquema recursivo para obtener la función de Green basado en el ecuación de Dyson. Sin embargo, el cálculo de la transmisión no se detalla en el artículo. En la figura 26b se presenta nuestro cálculo numérico basado en el esquema descrito en el capítulo IV. Las dimensiones del sistema utilizadas en la simulación son un ancho $W = 55a$ y una longitud del alambre $L = 27a$, donde a es el parámetro de red y la energía de Fermi se mide en unidades de la energía de Fermi de acuerdo a

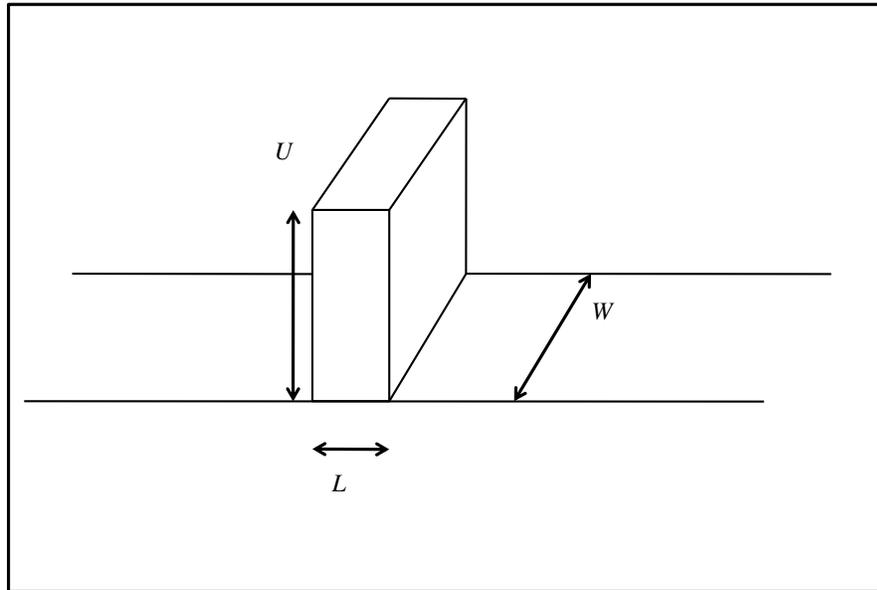


Figura 25. La barrera de potencial cuántica bidimensional inmersa en el nanoalambre, tiene una longitud L y una altura del potencial U . El nanoalambre tiene un ancho fijo W . La altura de la barrera puede modularse con el fin de estudiar el transporte electrónico a través del nanoalambre bajo la influencia de la magnitud del potencial repulsivo.

los parámetros utilizados en el cálculo de Takagaki (figura 26a). Nuestros resultados reprodujeron fielmente el cálculo obtenido por Takagaki y Ferry.

La conductancia de este sistema, expresada en unidades de $2e^2/h$ como función de la altura de la barrera U . Conforme la altura del potencial de la barrera se incrementa, en unidades de la energía de Fermi (E_F), se observa como la conductancia va disminuyendo desde un valor de 12 (debido a los 12 modos propagantes en el sistema a esta energía de Fermi) hasta alcanzar un valor de 0 debido a que la altura máxima del potencial de la barrera inhibe totalmente el transporte.

Note la aparición de una estructura resonante en la conductancia, esto es debido a múltiples dispersiones intramodo, generadas por la presencia de un potencial abrupto.

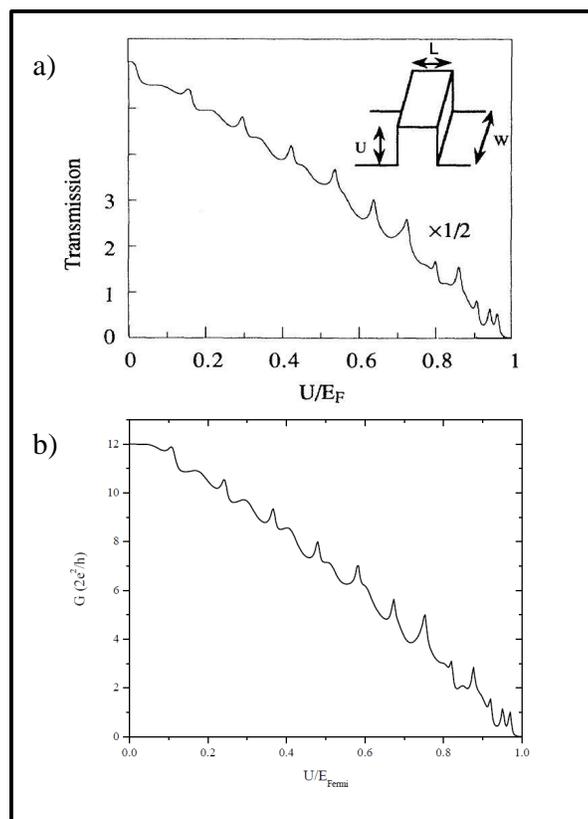


Figura 26. Las gráficas a) y b) muestran el cálculo numérico de Takagaki y nuestra simulación, respectivamente, de la conductancia en un nanoalambre en el cual se encuentra inmersa una barrera cuántica bidimensional de longitud L y altura U . Figura a) tomada de Takagaki y Ferry (1993b).

Además, se observa claramente un decremento paulatino en la conductancia conforme el número de modos de transporte disminuye, debido al incremento de la altura de la barrera.

V.2 Magnetotransporte

En esta sección se estudia la influencia de un campo magnético perpendicular al plano del nanoalambre sobre el transporte de carga para los diferentes tipos de dispersores

discutidos anteriormente. Se estudia primeramente el caso de un alambre libre de dispersores y después la influencia conjunta tanto del campo como de dispersores específicos. Debido a la inclusión de un campo magnético será posible observar la aparición de *estados de borde* y estados localizados en el sistema, que en conjunto con un dispersor, puede dar origen a fenómenos de transmisión o reflexión resonante por la interacción de estos dos tipos de estados. Además de la observación de fenómenos de interferencia cuántica modulada por un campo magnético a través del efecto Aharonov-Bohm.

V.2.1 Efecto de un campo magnético sobre las dispersiones

Antes de entrar a la discusión del efecto del campo magnético en la conductancia en los sistemas de interés, procederemos primero al análisis del efecto de campo en las bandas energéticas de dispersión. Esto nos será de suma utilidad para la interpretación de la física del magnetotransporte.

En ausencia de un campo magnético las sub-bandas de energía o modos de transporte en un nanoalambre tienen un perfil parabólico como función del número de onda k . En la Figura 27 se muestra el cálculo numérico de las dispersiones y el hecho de que para una energía de Fermi constante, se tiene un número determinado de modos que contribuyen al transporte. Las dispersiones son calculadas mediante la relación de cada una de las celdas del nanoalambre a través del teorema de Bloch (Ando, 1991).

En presencia de un campo magnético, el perfil de las dispersiones se modifica en dos aspectos. En primer lugar, cada una de las sub-bandas experimenta un corrimiento en energía con respecto a su valor sin campo magnético, debido a que el campo magnético induce un confinamiento electrónico adicional, tal como se discutió en el capítulo II. Este hecho da origen a la disminución de modos de transporte conforme la magnitud

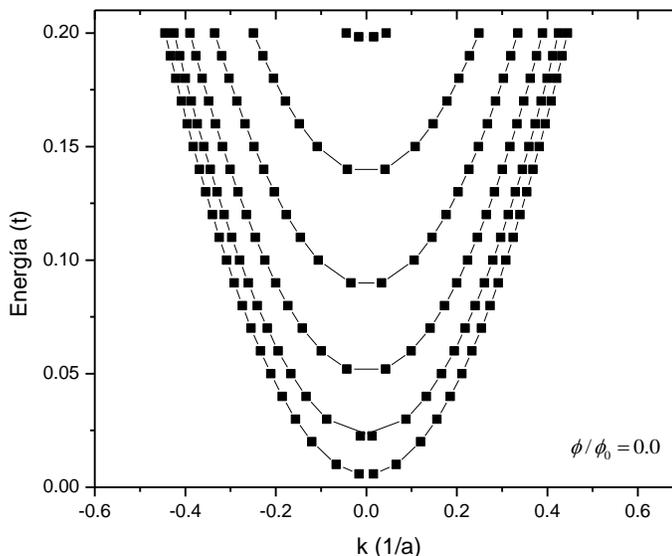


Figura 27. Cálculo numérico de las relaciones de dispersión de un nanoalambre sin campo magnético ($B = 0$). Se muestran diferentes sub-bandas de energía, el parámetro Φ representa el flujo magnético (Ba^2) y $\Phi_0 = h/e$ es el cuanto de flujo magnético, donde h y e son respectivamente la constante de Planck y la carga del electrón.

del campo se incrementa. Así, para una energía de Fermi fija, el número de modos cada vez es menor al aumentar el campo. Otra característica de la introducción del campo en las sub-bandas es la disminución de la pendiente alrededor del eje de simetría de la sub-banda, esto es, cerca del origen las sub-bandas se deforman tal que $\partial E/\partial k \sim 0$. Esto origina la aparición de estados que tienen una velocidad cero ($v = \partial E/\hbar\partial k$) y por lo tanto se encuentran localizados (ver Figura 28). Los estados propagantes se transportan solamente en proximidad al borde del alambre, generando los denominados *estados de borde*.

En la Figura 28 se muestra el cálculo numérico de la dispersión de un nanoalambre con un campo magnético B caracterizado por un flujo magnético Φ/Φ_0 , donde $\Phi = Ba^2$

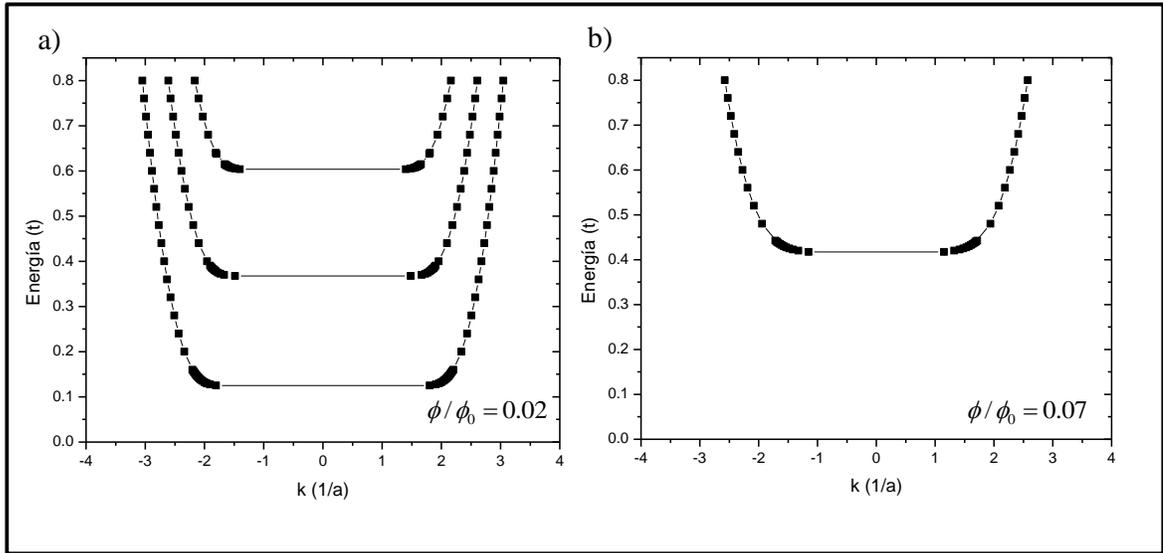


Figura 28. Cálculo numérico de la dispersión para un nanoalambre con un campo magnético B perpendicular al plano del mismo. En la gráfica a) el flujo magnético $\Phi/\Phi_0 = 0.02$, donde Φ representa el flujo magnético (Ba^2) y $\Phi_0 = h/e$ es el cuanto de flujo magnético. En la gráfica b) $\Phi/\Phi_0 = 0.07$ y la energía está en unidades del parámetro de tunelamiento t . Se observa una pendiente cero en el borde de las sub-bandas.

y Φ_0 es el cuanto de flujo magnético (h/e).

En la Figura 28a el flujo magnético tiene un valor $\Phi/\Phi_0 = 0.02$ lo que permite observar una pendiente de valor cero en el borde de las sub-bandas, lo cual origina estados localizados. A energías mayores de $\sim 0.65t$, donde t es el parámetro de tunelamiento, se observa como el transporte electrónico tiene la contribución solamente de 3 modos.

En la Figura 28b el flujo magnético es más intenso y tiene un valor $\Phi/\Phi_0 = 0.07$. El hecho de que esta condición representa un campo magnético más intenso, se pone

de manifiesto en el corrimiento energético que han tenido todas las sub-bandas con relación al caso en donde $\Phi/\Phi_0 = 0.02$, hasta el punto de que sólo una sub-banda contribuye ahora al transporte para cualquier valor de energía mayor que $\sim 0.45t$. Las dispersiones anteriores fueron calculadas numéricamente en un nanoalambre de 41 sitios transversales.

Esta fenomenología de disminución de modos es típica de un sistema cuasi-unidimensional como el nanoalambre estudiado bajo la influencia de un campo magnético perpendicular al mismo, ya que, como hemos venido comentando, el campo actúa como un confinamiento adicional que puede ser modulado precisamente con la magnitud de dicho campo (Palacios y Tejedor, 1993).

V.2.2 Transporte con dispersores a $B \neq 0$

V.2.2.1 Disco central como dispersor con campo finito

El estudio de nanoalambres en los cuales está inmerso un dispersor en forma de disco, ya sea con un potencial atractivo $V < 0$ (DOT), o de potencial repulsivo $V > 0$ (antiDOT), ha sido estudiado tanto experimental como teóricamente en presencia de un campo magnético perpendicular al plano del alambre (Nakamura y Nonoyama, 1997; Weiss *et al.*, 1991, 1993). La presencia del disco causa efectos de interferencia cuántica de las ondas electrónicas y es posible observar oscilaciones en la conductancia relacionadas con el efecto Aharonov-Bohm así como fenómenos de localización de carga.

Para modelar el sistema físico se considera un alambre cuántico cuasi-unidimensional en el cual existe un disco central, repulsivo o atractivo como dispersor (ver figura 23), y se estudia el efecto de la magnitud del campo magnético sobre la conductancia para una energía de Fermi constante. El campo está caracterizado por una relación de flujo

magnético $\Phi = Ba^2$ en unidades del cuanto de flujo magnético $\Phi_0 = h/e$.

La modelación del disco repulsivo implica la discretización del mismo en sitios con un potencial v cuya magnitud es igual a $v = 10t$, donde t es el parámetro de tunelamiento. En las simulaciones numéricas implementadas se ha utilizado un alambre cuya longitud fue de 150 sitios y ancho de 41 sitios, en tanto que la energía de Fermi se mantuvo constante $E_{Fermi} = 0.4t$.

En la Figura 29 se muestra una comparación entre el cálculo de la conductancia con un disco repulsivo efectuado por Nakamura y Nonoyama (1997) (Figura 29a) mediante la resolución del problema de dispersión con la ecuación de Lippmann-Schwinger y el cálculo realizado con el formalismo presentado en el capítulo IV basado en la obtención recursiva de la función de Green (Figura 29b). Se observa que nos ha sido posible reproducir los resultados de Nakamura y Nonoyama en sus más mínimos detalles. Esto nos da certeza de la confiabilidad y exactitud de nuestra metodología RGF implementada numéricamente.

La física del comportamiento de la magnetoconductancia como función del flujo magnético puede entenderse como sigue. Dado que un disco de potencial repulsivo puede imaginarse como una barrera de potencial que experimentan las partículas en el sistema, el número de modos se ve disminuido a causa de la obstrucción al transporte electrónico que genera el disco repulsivo central en comparación con el número de modos del alambre sin disco. Es por ello que la conductancia en la Figura 29 inicia en un valor cercano a 2 (en unidades de $2e^2/h$) para un valor de $\phi/\phi_0 = 0$ (la conductancia en el alambre limpio (sin disco) tiene un valor de 8 ($2e^2/h$) a $\phi/\phi_0 = 0$). Conforme la magnitud del campo magnético se incrementa, el número de modos transmitidos en el sistema disminuye y es posible observar también oscilaciones en la conductancia que son periódicas. Es posible extraer de la Figura 29 el período de las oscilaciones

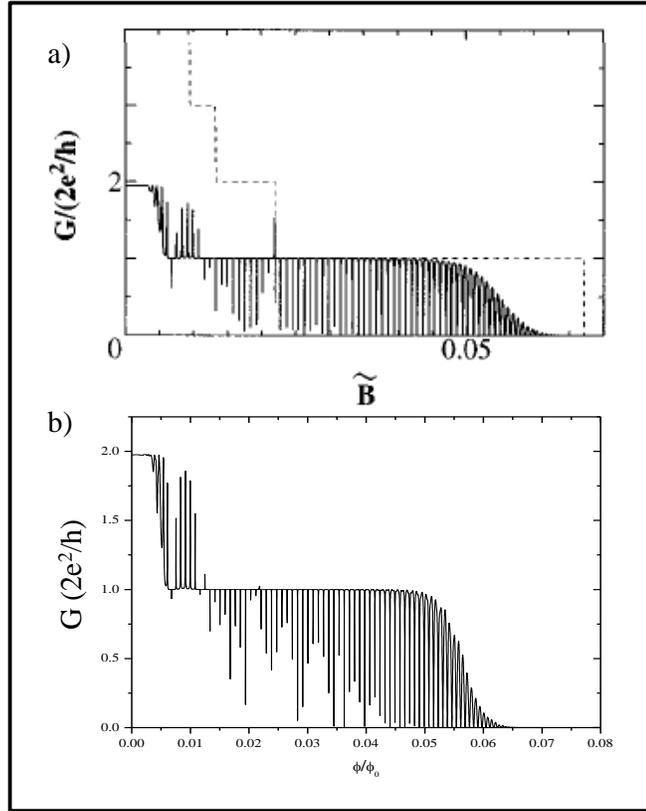


Figura 29. Cálculo de la magnetoconductancia como función de la magnitud del campo magnético para el caso de un disco con un potencial repulsivo. La gráfica a) corresponde al cálculo original de Nonoyama y la b) a la simulación numérica desarrollada. La figura a) es tomada de Nakamura y Nonoyama (1997).

$\Delta\phi$ observadas en la conductancia como función del flujo magnético ϕ . La teoría del fenómeno Aharonov-Bohm, descrita en el capítulo II, muestra que el período de oscilación debe satisfacer la relación:

$$S\Delta\phi = a^2\phi_0. \quad (89)$$

donde S representa el área de la impureza central y $\Delta\phi$ está relacionado con la adición de un cuanto de flujo magnético ϕ_0 al flujo total $\phi = BS$ conforme el campo magnético B se incrementa. De la figura 29 se obtiene un valor del período de oscilación de

$\Delta\phi \sim 9 \times 10^{-4}$, con lo cual se obtiene un área efectiva de $\sim 1100 a^2$. Este valor es muy cercano al área del disco central $\pi r^2 = 804 a^2$, con lo cual es posible afirmar que el origen de las oscilaciones observadas en la conductancia se debe al fenómeno *Aharonov-Bohm*. Este fenómeno se presenta por el hecho de que el electrón puede seguir una trayectoria alrededor del disco central que en forma efectiva es una trayectoria cerrada. Es decir, un electrón interferirá consigo mismo una vez que siga los bordes del disco central y, dado que la fase que adquiere en cada trayectoria depende de la dirección relativa entre el potencial vectorial magnético y la dirección de propagación, esta interferencia podrá ser modulada, ya que la diferencia de fases depende de la magnitud del campo magnético (ver Figura 29).

El caso en donde el disco central es atractivo, constituido por impurezas tipo delta con un *potencial atractivo* de magnitud igual a $v = -t$ se presenta en la Figura 30. En la Figura a) se muestra el cálculo original realizado por Nakamura y Nonoyama (1997) y en la Figura b) se muestra nuestro cálculo mediante la obtención recursiva de la función de Green de la conductancia en el sistema como función del flujo magnético.

La explicación física de las oscilaciones aperiódicas que se observan en la conductancia en la Figura 30, tiene su origen en la interacción de los estados propagantes del nanoalambre con estados discretos que se forman en el disco con potencial atractivo, dando origen a estados *atrapados* o *localizados* que generan una localización de la carga. La generación de caídas en el valor de la conductancia es una combinación no trivial entre la localización de la carga y el transporte por estados de borde de las partículas.

La línea punteada roja en la figura 30 representa el caso en donde no existe ningún disco, es decir, el límite de *alambre limpio*. Se observa cómo los modos transmitidos en el sistema van disminuyendo conforme se incrementa la magnitud del campo magnético. Esto se debe a que el campo actúa como un confinamiento adicional en el sistema que

ocasiona una disminución en el número de modos que participan en el transporte.

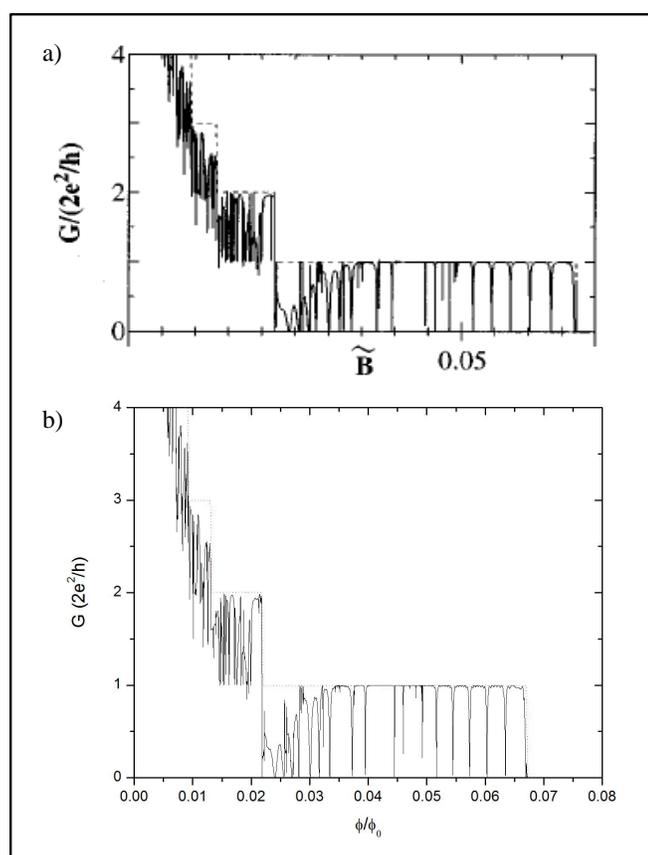


Figura 30. Cálculo de la magnetoconductancia como función de la magnitud del campo magnético para el caso de un disco con un potencial atractivo. La gráfica a) corresponde al cálculo original de Nonoyama y la b) a la simulación numérica desarrollada. La figura a) es tomada de Nakamura y Nonoyama (1997).

La comparación entre el cálculo desarrollado por (Nakamura y Nonoyama, 1997) y el cálculo numérico que hemos realizado por un formalismo independiente basado en RGF que se presenta en las Figuras 29 y 30, permite observar que se reproducen fielmente los resultados. Esto confirma la correcta implementación del formalismo descrito en el capítulo IV.

Finalmente, ya se ha discutido anteriormente que el efecto de un campo magnético además de crear estados de borde, genera también la aparición de estados localizados

de velocidad de propagación cero, ubicados espacialmente en el centro del alambre (Takagaki y Ferry, 1993a). Cuando un disco central está presente en el sistema, estos estados localizados estarán ubicados alrededor del disco central y es posible estudiar el efecto de la interacción de estos estados con los estados propagantes del sistema para modular la corriente eléctrica e incluso polarizar en espín mediante el efecto Zeeman (Zozoulenko y Evaldsson, 2004) como se discutirá más adelante.

V.2.2.2 Barrera cuántica como dispersor y $B \neq 0$

Estudios numéricos de la conductancia de nanoalambres con campo magnético en donde se tiene una barrera de potencial uniforme colocada en la parte central del mismo, sugieren la eliminación de fenómenos dispersivos a campos magnéticos grandes, lo que promueve un incremento en el carácter cuantizado de la conductancia. La influencia de las dimensiones de la barrera y la modulación de la altura de la misma sobre el transporte electrónico con campo magnético ha sido estudiado por Takagaki y Ferry (1993b), Takagaki y Ploog (1995).

En la Figura 25 se muestra un esquema del sistema a modelar. Se han estudiado alambres de diferente ancho (W) y barreras de diferente longitud (L) cuando se varía la altura U de la misma. Las dimensiones de ancho del alambre y largo de las barreras estudiadas en unidades del parámetro de red a se describen en la Tabla I. Esta Tabla hace referencia a cada una de las gráficas que aparecen en la Figura 31 (gráficas (a),(b),(c),(d), y (e)), las cuales corresponden al cálculo desarrollado por Takagaki y Ferry (1993b) en la figura 1 de su artículo. Además en la misma tabla se señala también las gráficas calculadas por el formalismo independiente estudiado aquí, con las mismas letras e indicando la figura donde se muestra el cálculo.

Tabla I. Dimensiones de la barrera cuántica.

Gráfica	$L(a)$	$W(a)$
a (fig. 32)	27	55
b (fig. 32)	27	55
c (fig. 33)	18	55
d (fig. 33)	9	55
e (fig. 33)	55	18

En la Figura 31 se muestra el cálculo realizado por Takagaki y Ferry de la conductancia como función de la altura de la barrera (en unidades de E_F) para las diferentes dimensiones que se describen en la Tabla I. La gráfica (a) corresponde al caso sin campo magnético.

En la Figura 32 y 33 se muestra el cálculo de la conductancia como función de la magnitud del potencial de la barrera U (en unidades de E_{Fermi}) desarrollado con el formalismo del cálculo recursivo de la función de Green (RGF) descrito en el capítulo IV.

La gráfica (a) de la Figura 32 (*línea continua negra*) corresponde al caso en que el alambre tiene un ancho $W = 55a$ y la barrera tiene una longitud $L = 27a$ (ver Tabla I), además, la magnitud del campo magnético es cero ($B = 0$). Esta gráfica servirá de referencia para estudiar la influencia del campo magnético sobre la conductancia, y reproduce las curvas a y b de la figura 31 que corresponde al cálculo realizado por Takagaki y Ferry.

La curva inicia en 12 modos propagantes cuando el valor de la energía del potencial de la barrera es cero ($U/E_F = 0$) y conforme este se incrementa, el número de modos propagantes disminuye y por consecuencia también la conductancia. El origen de las

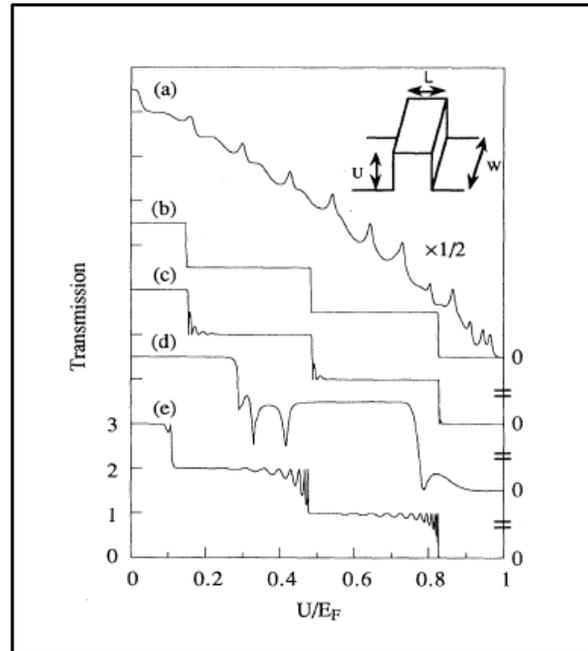


Figura 31. La gráfica muestra el cálculo original de la conductancia en un nanoalambre en el cual se encuentra inmersa una barrera cuántica. Figura tomada de Takagaki y Ferry (1993b).

oscilaciones observadas en la conductancia está relacionado con que cada vez que se completa un número entero de $\lambda/2$ (λ longitud de onda) dentro de la barrera se observa un pico en la conductancia.

Las gráficas (b) de la Figura 32 y (c), (d), (e) de la Figura 33, se obtuvieron considerando un campo magnético perpendicular cumpliendo con la relación $\hbar\omega_c/E_{Fermi} = 0.35$ donde $\omega_c = eB/m$ es la frecuencia de ciclotrón y $\lambda_F = 9.02a$.

La gráfica (b) de la Figura 32 (*línea roja*) es el caso en el que el mismo sistema ($W = 55a$, $L = 27a$) se somete a un campo magnético perpendicular. La magnitud del campo magnético es tal que se observa una disminución en el número de modos propagantes de 12 ($B = 0$) a 3 ($B \neq 0$) para $U/E_F = 0$.

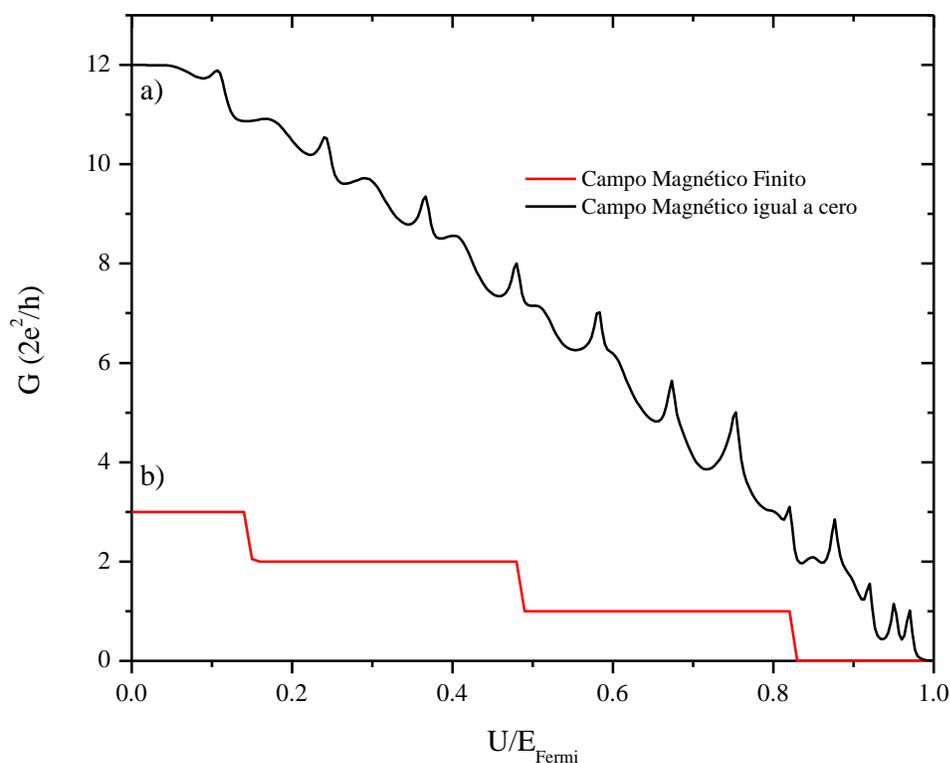


Figura 32. La gráfica muestra el comportamiento de la conductancia en un nanoalambre cuasi-unidimensional que tiene una barrera cuántica en el centro del mismo en función de la altura U de la barrera. La línea negra representa el sistema *sin* campo magnético y la línea roja cuando el campo está presente. Se observa un comportamiento descendente de la conductancia en ambos casos conforme la altura de la barrera aumenta.

En la Figura 33 se muestran las gráficas (c), (d) y (e), que representan la conductancia a través de la barrera cuando un campo magnético perpendicular está presente y las dimensiones del alambre son diferentes. La curva (e) representa el sistema de menor ancho del nanoalambre estudiado y se pone de manifiesto la aparición de oscilaciones en la conductancia debidas a estados virtuales formados por arriba de la barrera. En general las oscilaciones observadas en la conductancia son sensibles al cambio de la longitud de la barrera L . En los sistemas simulados anteriormente se logra reproducir

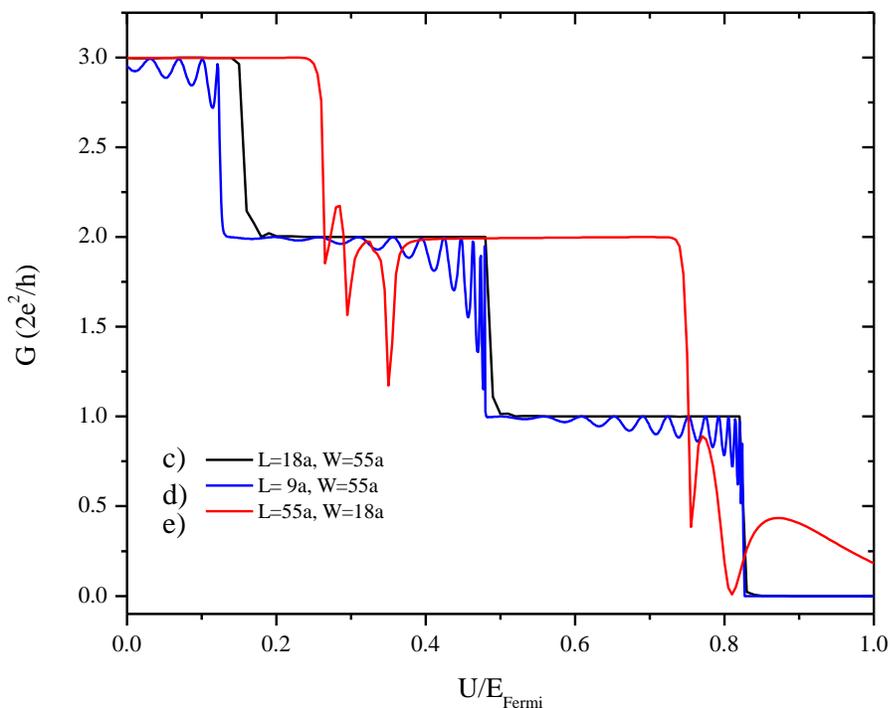


Figura 33. Gráfica de la conductancia en unidades de $2e^2/h$ como función del potencial de la altura de la barrera en unidades de la energía de Fermi E_F . Las curvas *c* y *d* representan un alambre de ancho fijo $55a$ y diferente longitud de la barrera. La curva *e* representa un alambre de menor ancho $18a$ pero con una longitud de la barrera de $55a$, donde a es el parámetro de red.

los cálculos de Takagaki y Ferry (1993b).

V.3 Cálculo de la conductancia en QPC's

V.3.1 Transporte a través de una QPC con campo magnético

En la figura 34a se muestra el cálculo realizado por Ando (1991) de la conductancia a través de una constricción (QPC) como función de la energía del potencial en la parte

central de la constricción ($x = y = 0$). La figura muestra la conductancia para tres diferentes longitudes del nanoalambre $L_x/\lambda_F = 4, 8$ y 16 de un ancho fijo $L_y/\lambda_F = 4$ (ver sección II.4). El campo magnético aparece aquí como un parámetro que permite observar la influencia de la intensidad del mismo sobre el transporte electrónico a través de la constricción. Se estudian tres intensidades de campo magnético caracterizado por una relación $\hbar\omega_c/E_F = 0.25, 0.50$ y 1.0 . El cálculo de la conductancia se realizó mediante un esquema recursivo de la función de Green y posteriormente se calculó la transmisión.

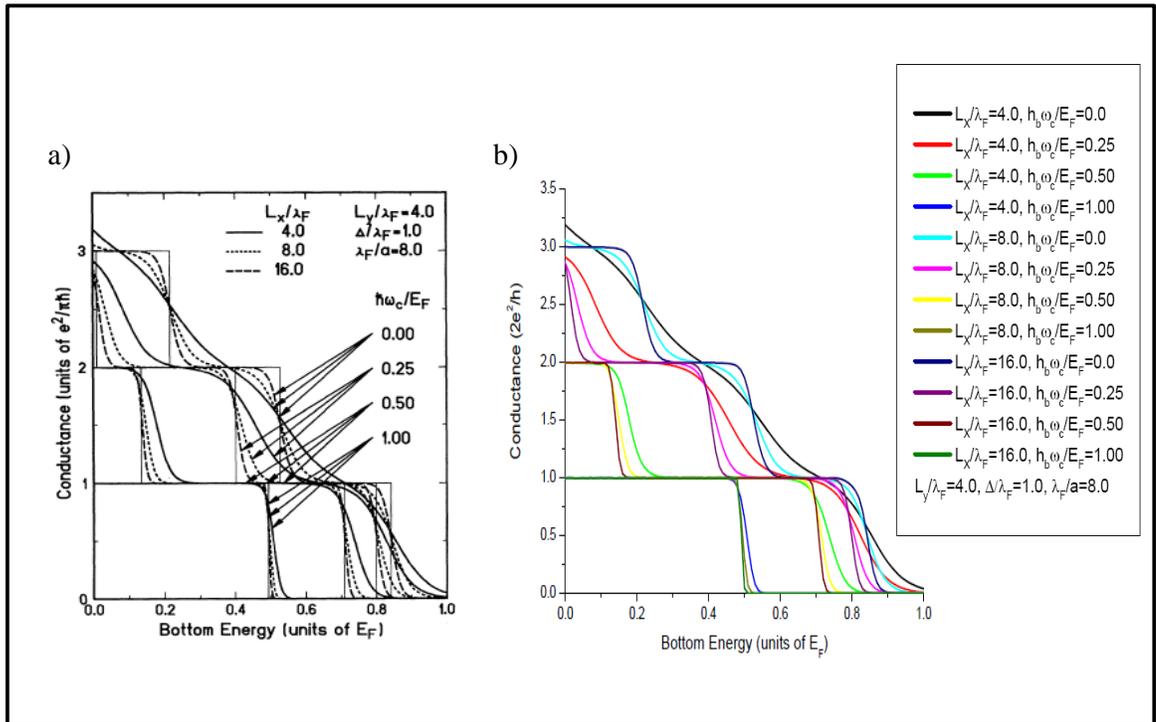


Figura 34. Gráfica de la conductancia en unidades de $2e^2/h$ a través de un QPC como función de la energía del potencial en el punto central del QPC (*bottom energy*) para diferentes magnitudes de campo magnético.

En la misma figura 34b se muestra nuestra simulación para este sistema basado en la metodología de RGF detallada en el capítulo IV. La conductancia para cada una de las dimensiones del alambre e intensidad del campo magnético presente en el mismo es mostrada en diferentes colores (ver detalles de figura). Estos cálculos reprodujeron en detalle los obtenidos por Ando (1991) obtenidos con una metodología diferente basada en la matriz de dispersión.

La explicación física de las curvas sin campo magnético ($\hbar\omega_c/E_F = 0$) en la figura 34 a,b puede entenderse de la siguiente manera. Conforme se va incrementando el punto de mínima energía del potencial de la constricción, el número de modos capaz de transmitirse va disminuyendo hasta eventualmente alcanzar una conductancia cero debido a la creación de una barrera efectiva para el transporte.

La línea de color morado de la figura 34b representa el alambre de mayor longitud ($16 \lambda_F$), esto permite que la variación espacial del potencial de la constricción sea de forma más adiabática (suave) que en el caso del sistema con una longitud menor ($4,8 \lambda_F$). Esto permite observar cómo la conductancia se cuantiza y va disminuyendo escalonadamente, o por *plateaus*, hasta que no existe ningún modo propagante en el sistema.

Cuando el campo magnético está presente actúa como un confinamiento efectivo adicional en el sistema, y el número de modos que contribuyen a la conductancia se ve disminuido. Tal es el caso para las líneas en las cuales el campo magnético ahora es finito con un valor de $\hbar\omega_c/E_F = 0.25$. El hecho de que exista ahora un campo finito es la razón por la cual a una energía del potencial en $x = y = 0$ de la constricción igual a cero, la conductancia esté ligeramente disminuida (menor de 3 en unidades de $2e^2/h$) con respecto al valor que adquiere para el sistema sin campo magnético en donde la conductancia inicia en valores mayores de 3.

Para un campo magnético con un valor de $\hbar\omega_c/E_F = 0.5$, se reduce aún más el número de modos transmitidos en el sistema. Lo anterior puede observarse por el hecho de que ahora la conductancia inicia en un valor de 2 (en unidades de $2e^2/h$). La misma explicación puede darse para el caso en donde el campo magnético es todavía más intenso ($\hbar\omega_c/E_F = 1$), lo que provoca una disminución más drástica de modos transmitidos en el sistema (la conductancia inicia en 1 en unidades de $2e^2/h$). La comparación de estos resultados numéricos con los resultados originales de Ando (1991) permiten verificar que se reproducen fielmente sus cálculos.

V.3.2 Transporte a través de una QPC con interacción Zeeman.

Como se ha descrito en las secciones anteriores, la influencia de un campo magnético genera la aparición de estados de borde y estados localizados que dan lugar a fenómenos que modifican drásticamente la forma en que se propagan los electrones en sistemas nanoscópicos. En dichos fenómenos, los estados propagantes que participan en el transporte están *degenerados* en espín.

La degeneración de espín se rompe al asignar una energía diferente a cada uno de los estados de espín con relación a la dirección del campo magnético (efecto Zeeman). Conforme el campo magnético se incrementa, los estados electrónicos para espín arriba (up) y abajo (down) se encuentran separados en energía por una cantidad igual a $\Delta_{Zeeman} = 2\gamma$, en donde

$$\gamma = \frac{g^* \mu_B B}{2} = g^* Ry \pi \left(\frac{a_0}{a} \right)^2 \frac{\phi}{\phi_0}. \quad (90)$$

con Ry la constante de Rydberg igual a 13.605 eV, a_0 el radio de Bohr igual a

0.529\AA , $\phi = a^2 B$ y $\phi_0 = h/e$ es el cuanto de flujo magnético. Este tipo de interacción, en combinación con estados localizados alrededor de una impureza central, ha sido estudiado como un mecanismo de creación de corrientes polarizadas de espín, siendo de interés para la implementación de dispositivos *espintrónicos* (Zozoulenko y Evaldsson, 2004).

En la figura 35 se muestra el comportamiento de la conductancia como función de la energía del potencial en $x = y = 0$ de la constricción cuántica. Se compara el caso en donde no existe interacción tipo Zeeman con respecto al caso en donde sí esta presente para un campo magnético fijo. La línea negra representa la conductancia en el sistema cuando *no* está presente un campo magnético, y se puede observar la disminución de la conductancia conforme se *cierra* la apertura de la constricción, al modular el potencial en el punto central de la misma.

Cuando un campo magnético está presente en el sistema, disminuye el número de estados propagantes con respecto a la curva sin campo magnético (línea negra). Se observa asimismo como esta disminución de estados electrónicos que participan en el transporte, es más drástica conforme aumenta la magnitud del campo magnético. Este es un comportamiento típico en nanoalambres en donde un campo magnético perpendicular al alambre está presente (van Wees *et al.*, 1988a).

La magnitud del campo magnético descrito en la figura 35 toma valores de 0, 0.25, 0.5 y 1 en unidades de $\hbar\omega_c/E_F$. En esta figura se compara el efecto de la interacción Zeeman con respecto al caso en donde únicamente está presente el campo magnético pero sin la interacción Zeeman. El efecto se hace más pronunciado para una magnitud del campo más intensa, en donde se observa la aparición de un *plateau* en la conductancia a $0.5G_0$ ($G_0 = 2e^2/h$), mostrando la ruptura de la degeneración de espín.

Con el fin de observar la formación del *plateau* a $0.5G_0$, en la gráfica 36 se presentan

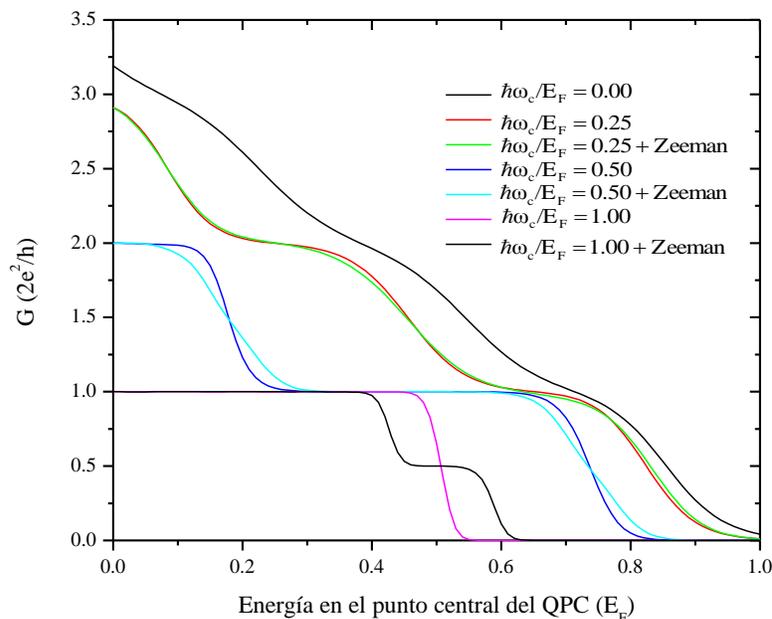


Figura 35. Gráfica de la conductancia en unidades de $2e^2/h$ a través de un QPC como función de la energía del potencial en el punto central del QPC (V). La magnitud del campo magnético se encuentra como parámetro en la figura y esta presente la interacción Zeeman que rompe la degeneración de espín.

curvas a diferentes magnitudes de campo entre 0.5 y 1.0 en unidades de $\hbar\omega_c/E_F$. Se puede apreciar el desarrollo del *plateau* conforme el campo magnético es más intenso. Las simulaciones sobre este sistema se desarrollaron en una nanoalambre de longitud $L_x/\lambda_F = 4$ y de ancho $L_y/\lambda_F = 4$ (ver figura 17).

En resumen, en el presente capítulo se ha estudiado el transporte electrónico a través de nanoalambres cuánticos con diferentes tipos de dispersores. Cada uno de estos sistemas constituye un conjunto de elementos básicos con los cuales es posible construir nanodispositivos cuya función sea el control del transporte de carga eléctrica. La posibilidad de adicionar como elemento externo de control como un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo, permite explotar una gran variedad de

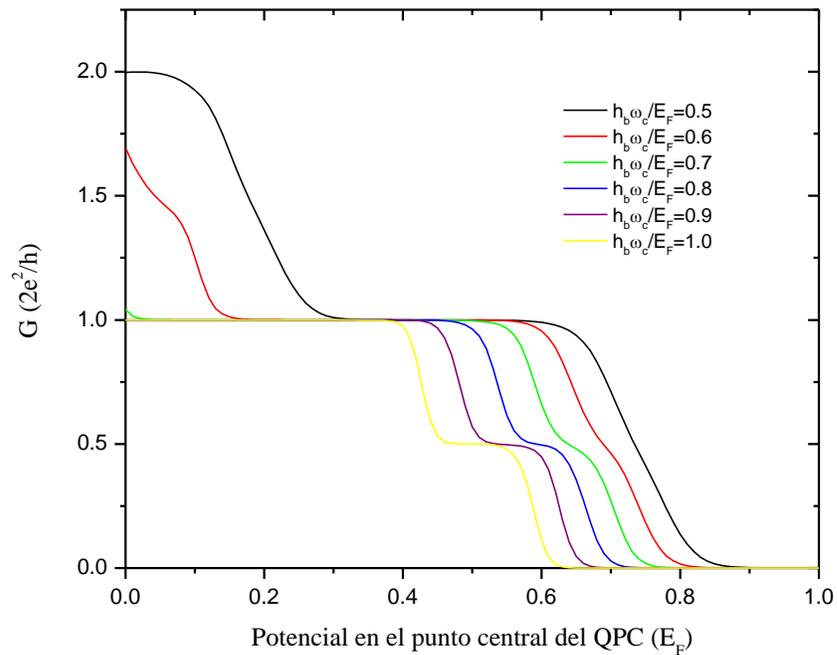


Figura 36. Gráfica de la conductancia en unidades de $G_0 = 2e^2/h$ a través de un QPC como función de la energía del potencial en el punto central del QPC (V). La magnitud del campo magnético se encuentra como parámetro en la figura y está presente la interacción Zeeman que rompe la degeneración de espín. Se observa el desarrollo del plateau a $0.5 G_0$ cuando el campo es intenso.

fenómenos cuánticos para la manipulación y control del transporte de carga. En el siguiente capítulo se estudian las características de transporte electrónico en un sistema experimental constituido por varios de los elementos descritos en el presente capítulo como lo es una constricción cuántica junto con un dispersor en forma de disco.

Capítulo VI

ESTUDIO TEÓRICO DEL MAGNETOTRANSPORTE EN UN NANODISPOSITIVO EXPERIMENTAL

Uno de los paradigmas en la física de estado sólido a escala nanoscópica es la cuantización de la conductancia en alambres cuánticos. El estudio de las propiedades de transporte en alambres que contienen impurezas es de gran importancia debido a que pueden destruir dicha cuantización de la conductancia, e inducir, inclusive, nuevos fenómenos físicos. Recientemente se ha publicado un experimento en donde se estudia la conductancia en un alambre con una impureza central de un tamaño del orden de la longitud de onda de Fermi λ_F ($\sim 86 \text{ nm}$) (Chen *et al.*, 2009). Mediciones con impurezas artificiales de tan reducido tamaño como estas no habían sido reportadas hasta entonces.

En este capítulo se presenta un estudio teórico-numérico de la conductancia del nanodispositivo experimental estudiado por Chen que contiene una impureza central que genera dos constricciones cuánticas (QPCs) dispuestas en forma paralela. Las simulaciones numéricas mostradas se basan en la metodología numérica desarrollada en el capítulo IV a través de la construcción iterativa de la función de Green (RGF) para calcular el transporte electrónico balístico utilizando el formalismo de Landauer.

Como detallaremos más adelante, nuestras simulaciones numéricas permiten describir adecuadamente el fenómeno de cuantización de la conductancia así como las

resonancias de la misma observadas en el experimento. Asimismo, nuestro modelo nos permite hacer algunas predicciones acerca del comportamiento del nanodispositivo cuando un campo magnético perpendicular al sistema está presente.

VI.1 Magnetoconductancia en contricciones cuánticas acopladas

VI.1.1 Evidencia experimental

En el experimento de Chen *et al.* (Chen *et al.*, 2009) se realizan mediciones del transporte electrónico en un alambre cuasi-unidimensional creado en un gas de electrones (2DEG). Dicho gas es creado en la interfaz de una heteroestructura semiconductor de $GaAs$ y $Al_xGa_{1-x}As$ con una densidad típica de portadores de carga eléctrica $n = 1.8 \times 10^{11} cm^{-2}$ y movilidades de $\mu = 8.6 \times 10^5 cm^2/V s$.

Un punto crucial en el nanodispositivo desarrollado es que se realiza un *hueco* en el centro del mismo mediante un procedimiento de ataque químico (*chemical etching*). Dicho hueco constituye una *impureza tipo isla*, y representa físicamente una barrera de potencial infinitamente alta. El experimento se desarrolla en una condición tal que el diámetro de la impureza central $d \gtrsim \lambda_F$, donde λ_F es la longitud de onda de Fermi de los electrones y tiene un valor ~ 86 nm.

A cada lado de este hueco, sobre la superficie de la heteroestructura, se coloca un electrodo de compuerta con el fin de crear en el nanodispositivo dos constricciones cuánticas paralelas, como se muestra en la figura 37. La apertura de dichas constricciones pueden ser manipuladas en el experimento mediante la aplicación de voltajes en los electrodos, lo que permite controlar el transporte electrónico a través de cada una

de las constricciones en forma independiente.

En la figura 37a se muestra una micrografía de la región activa del dispositivo en donde se muestran las constricciones cuánticas (QPC_1 y QPC_2), además de los electrodos de compuerta sobre los que se aplican voltajes V_1 y V_2 con los cuales se controla la apertura (transmisividad) de cada uno de los QPCs. El diámetro de la impureza central es de 180 nm, y está embebida en un nanoalambre cuyo ancho de es 800 nm y de longitud igual a 1.47 micras. De esta forma se generan dos regiones de ancho ~ 310 nm, en las que se definen las dos constricciones cuánticas (indicadas por las flechas en la figura 37a).

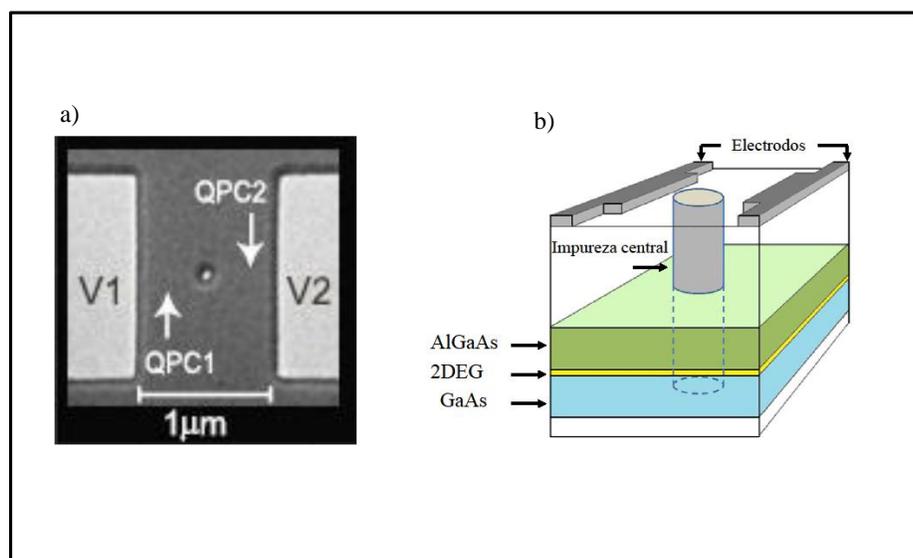


Figura 37. a) Micrografía del dispositivo experimental. La impureza central crea dos constricciones (QPC_1 y QPC_2) en donde el ancho efectivo (apertura) puede ser controlado mediante los voltajes V_1 y V_2 , b) Esquema del nanodispositivo simulado.

En la figura 38 se muestran las mediciones experimentales de la conductancia G

en unidades de $2e^2/h$ en un mapa de tonos de gris como función de los voltajes de compuerta V_1 y V_2 aplicados a los electrodos. La región oscura representa el caso en donde la conductancia es cero, es decir, corresponde a la situación en donde los dos QPCs se encuentran completamente *cerrados* y no permiten el paso de electrones a través de los QPCs. Chen *et al.* (2009) reportan de sus mediciones que un QPC está cerrado para un valor $V_1(V_2) \leq -0.8 V$ como puede observarse en la gráfica. Todas las mediciones de transporte fueron realizadas a una temperatura de 4.2 K.

Conforme se va aumentando el voltaje de compuerta de uno o ambos de los QPCs, la conductancia crece simultáneamente, indicando la contribución de un número cada vez mayor de modos de transmisión (región clara) en la corriente transmitida. Sobre la gráfica *a* de la figura 38 están marcados los caracteres a, b, c y d en color rojo, los cuales corresponden a condiciones particulares del doble QPC, en donde existe un número específico de modos de propagación por cada uno de los QPCs. La representación esquemática de lo anterior se muestra en la gráfica *b* de la misma figura 38. Así por ejemplo, la letra en rojo *a* en la figura, corresponde al caso en donde la conductancia es debida solamente a un modo de propagación y que se transmite específicamente por el QPC₁ ($V_1 > -0.8V$) mientras que el QPC₂ permanece cerrado ($V_2 < -0.8V$) (ver figura 38). Esta situación es representada esquemáticamente a la derecha del mapa de tonos de gris en la ilustración *a* de la misma figura.

De la misma forma la letra roja *b* indica la condición en donde el valor del voltaje de compuerta induce que las dos QPCs se encuentren abiertas, pero con un sólo modo de propagación permisible por cada una de ellas. La situación especificada por la letra roja *c* representa el caso en donde en total existen 3 modos de propagación en el sistema, los cuales se distribuyen de forma que 2 de ellos se transmiten por el QPC₁ (relativamente más abierto) y el tercero por el QPC₂. La condición específica del dispositivo en la

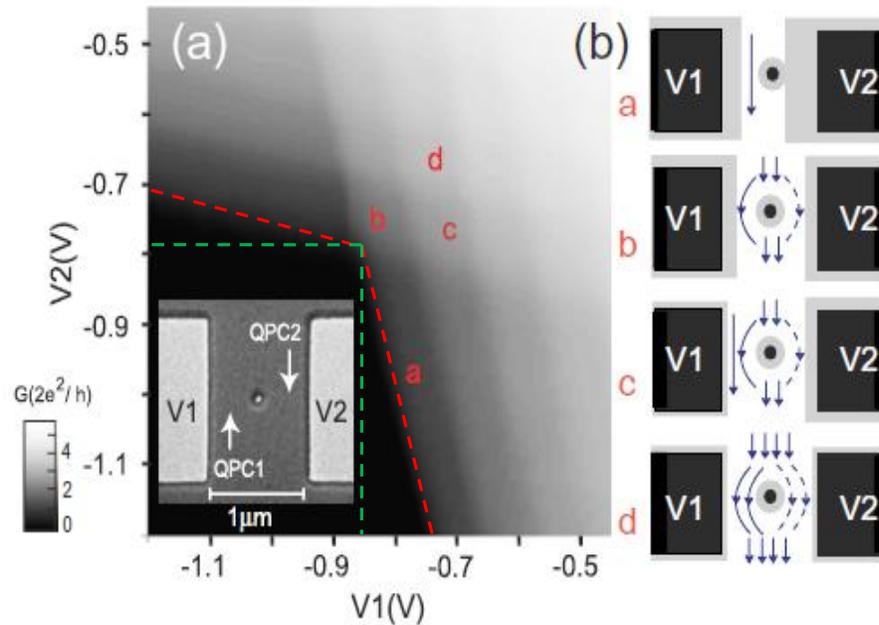


Figura 38. Medidas experimentales de la conductancia a través del nanodispositivo con dos constricciones cuánticas (QPCs) paralelas. En la figura *a* la conductancia es reportada en un mapa en tono de gris en donde los ejes corresponden a los voltajes V_1 y V_2 aplicados en los electrodos para modular la apertura de las QPCs. Entre más oscura sea una región sobre el mapa, menor es el valor de la conductancia que representa. Las letras rojas sobre el mapa indican una condición específica de modos que participan en el transporte a través de cada una de las QPC, y cuya representación esquemática se muestra en la figura *b*. (Gráfica tomada de Chen et al. 2009).

que se propagan 2 modos por cada uno de los QPCs, es decir, en total 4 modos, está indicada por la letra *d* (en rojo).

En la figura 39 se muestran curvas de la conductancia como función del voltaje V_1 aplicado en el QPC_1 para tres valores distintos del voltaje V_2 aplicado en el QPC_2 en el régimen lineal ($V_{SD} = 0$). La curva para el caso en que $V_2 = -1.0$ V, representa la situación en donde el QPC_2 permanece *cerrado*. Conforme el valor del voltaje V_1 disminuye (en términos absolutos), la apertura del QPC_1 aumenta. Así, es posible observar la curva ascendente en donde se forman *plateaus* en la conductancia para un

valor fijo de V_2 . Este comportamiento es similar a los experimentos sobre una sola QPC referidos en el capítulo I, II y V los cuales ponen de manifiesto la cuantización de la conductancia en unidades del cuanto de conductancia G_0 ($2e^2/h$).

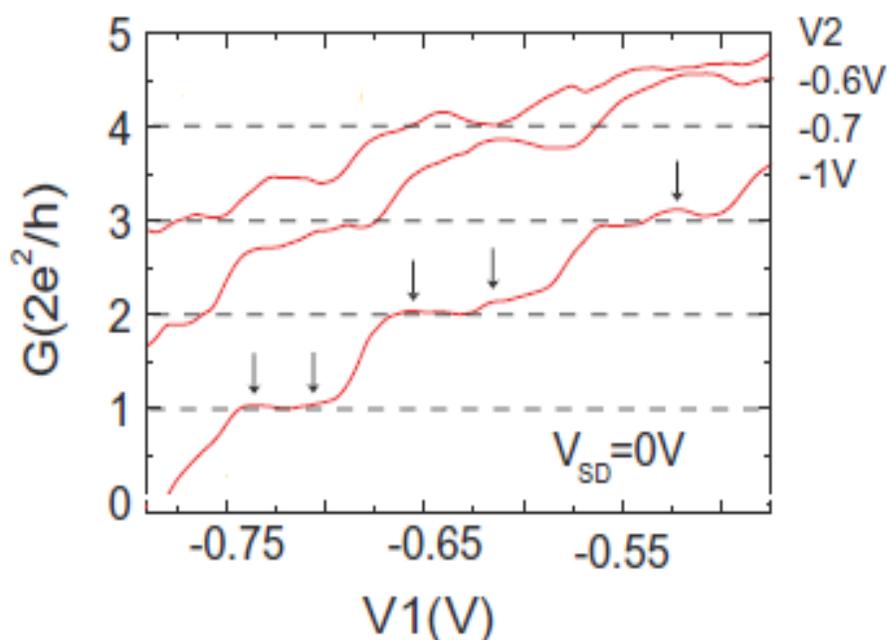


Figura 39. Gráfica de la conductancia a través del nanodispositivo estudiado por Chen *et al.* (2009), medida en unidades del cuanto de conductancia $G_0 = 2e^2/h$ como función del voltaje (V_1) aplicado en la QPC_1 . Se muestran curvas para tres valores del voltaje V_2 aplicado en la QPC_2 , $-0.6V$, $-0.7V$ y $-1.0V$, respectivamente. Las flechas sobre la curva para $V_2 = -1.0V$ señalan aumentos en la conductancia debido a fenómenos de resonancias tipo Ramsauer. Gráfica tomada de Chen *et al.* 2009.

Las flechas negras verticales sobre esta misma curva señalan un aumento en la conductancia ligeramente arriba del valor del *plateau*, presumiblemente (según Chen *et al.*) debido a resonancias tipo *Ramsauer*¹ originadas por el potencial abrupto creado

¹El efecto Ramsauer se presenta cuando la transmisión de un modo a través de una barrera cuántica en un nanoalambre semiconductor tiene un incremento al coincidir la energía de Fermi con el valor de los estados resonantes (virtuales) que se encuentran a una energía por arriba del valor del potencial de

entre en la región de los QPCs y la impureza central.

Note que conforme la constricción 2 (QPC_2) se abre gradualmente, el efecto de interferencia inducido por los modos electrónicos que se transportan por la misma ocasiona que varios modos se superpongan en la conductancia, generando una curva ascendente G conforme la apertura del QPC_1 aumenta. Sin embargo, note que se destruye la cuantización de la misma, probablemente debido a efectos de interferencia cuántica. Esto puede observarse en las curvas para $V_2 = -0.7 V, -0.6 V$ en la figura 39. Es muy importante señalar que todo el desarrollo del experimento se realizó sin que interviniera un campo magnético externo.

Sin embargo, como sabemos, la presencia de un campo magnético puede producir cambios substanciales en el comportamiento de la conductancia. En efecto, los fenómenos de interferencia cuántica observados en este experimento, pueden modificarse en forma importante si un campo magnético perpendicular al dispositivo está presente, ya que, como se ha mencionado anteriormente, pueden surgir estados de borde y estados localizados que pudiesen dar un grado de libertad más en el estudio de interferencia cuántica en este dispositivo y por ende modificar la respuesta del dispositivo. En particular, dado que existe una impureza central, la presencia de un campo magnético hace de este nanodispositivo un sistema en donde es posible estudiar fenómenos relacionados con el efecto *Aharonov-Bohm*, como se discutirá en detalle más adelante.

la barrera.

VI.1.2 Simulación del nanodispositivo

de Chen *et al.*: predicciones teóricas

En la figura 37b se muestra un esquema del nanodispositivo que proponemos modelar dos constricciones cuánticas paralelas como en el experimento de Chen *et al.* También se muestra la colocación de los electrodos en la parte superior de la heteroestructura, así como el hueco o impureza tipo isla en la parte central del nanodispositivo. El gas de electrones bidimensional en el cual se define el nanoalambre está representado por la región amarilla del esquema, justo entre las capas de GaAs (región azul) y AlGaAs (región verde).

Con el fin de describir el transporte electrónico a través de dicho nanodispositivo es necesario modelar adecuadamente el potencial de las dos constricciones junto con la impureza central. Encontramos conveniente el modelar *cada uno* de los dos QPCs con un potencial tipo silla de montar como el descrito en el capítulo anterior por la expresión (40). Presumimos que tal potencial es suficientemente realista como para representar el confinamiento efectivo que sufren los electrones en el dispositivo experimental. Asimismo tal modelo de potencial nos permite simular la manipulación independiente de la apertura de cada uno de los QPCs, tal como se hace en el experimento. Por lo tanto se tendrá un término V_1 y V_2 que caracteriza el mínimo de la energía del potencial para el QPC₁ y QPC₂, convenientemente fijadas en $x = y = 0$.

Para simular la impureza central (hueco) se define un radio dentro del cual el potencial es constante ($V_0 \gg 1$), pero muy grande en comparación con la energía de las partículas incidentes ($1 E_F$). De esta forma se tiene lo que se denomina una *impureza*

artificial (Kirczenow *et al.*, 1994), la cual está definida por el potencial

$$V_{hueco}(x, y) = \begin{cases} V_0 & r \leq R_h \\ 0 & r > R_h \end{cases} \quad (91)$$

donde R_h es el radio del hueco central. Por tanta, el potencial total que simula el potencial en el nanodispositivo en la región de interacción (dispersión) está dado por:

$$U_{total} = V_{QPC_1} + V_{QPC_2} + V_{hueco}. \quad (92)$$

En la figura 41 se muestra una representación tridimensional del potencial. Se muestra una configuración asimétrica del sistema en donde la apertura es diferente para cada QPC. Esto permite observar el tipo de control independiente de cada constricción que puede simularse tal y como sucede en el experimento.

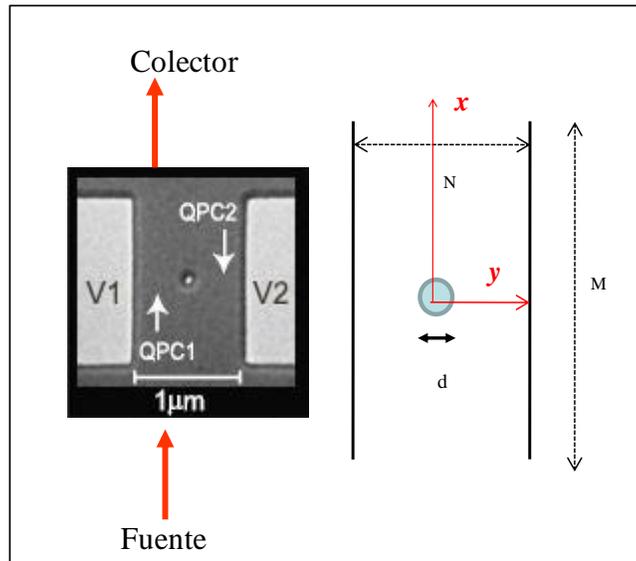


Figura 40. A la izquierda se muestra la micrografía de la parte superior del nanodispositivo en donde se marca esquemáticamente la dirección del transporte electrónico. A la derecha un esquema del nanodispositivo en donde se define la dirección x como la dirección de propagación, en tanto que la dirección transversal es y . La impureza central (hueco) tiene un diámetro $d = 2R_h$. En la descripción discretizada del sistema se tiene una longitud de N sitios y un ancho de M sitios.

La simulación se lleva a cabo mediante el formalismo de *amarre fuerte* descrito en el capítulo III y en el cual se discretiza el alambre en una malla de puntos equiespaciados por una distancia a , la cual constituye el parámetro de red. Cada sitio particular es descrito por una coordenada n y m que representa un punto longitudinal y transversal, respectivamente.

En los cálculos numéricos se tomó en cuenta un sistema de ancho $N = 32a$ (a parámetro de red efectivo), longitud $M = 120a$ y un diámetro del hueco central de $6a$. Fijando la longitud de onda de Fermi a $\lambda_F = 50nm$, el cual es un valor típico de 2DEGs creados en $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, y la razón $\lambda_F/a = 4$, nuestro disco de simulación tendrá un diámetro de $d = 75nm$, que satisface una condición similar a la experimental en donde se mantiene $d \geq \lambda_F$.²

En la figura 42 se muestra un mapa de colores de la conducancia calculada numéricamente como función de la energía del potencial V_1 y V_2 de cada QPC. Note la concordancia cualitativa con el mapa experimental de conductancia mostrado en la figura 38. En las condiciones tanto del experimento desarrollado por Chen como en la simulación numérica mostrada en la figura 42, no hay un campo magnético presente en el dispositivo. En la misma figura 42 la escala de colores representa un valor en la conductancia a través del nanodispositivo, entre más oscuro, representa un valor más bajo de conductancia. La región *negra* (convención como la del experimento) constituye la región para la cual la configuración de ambas QPCs es tal que no existe flujo de carga a través de las mismas, es decir, ambas QPCs están *cerradas* para un rango de V_1 y $V_2 \geq 0.7 E_F$. Conforme las constricciones se van abriendo, V_1 y $V_2 \leq 0.7 E_F$, el valor de la conductancia se va incrementado paulatinamente hasta alcanzar un valor máximo

²Para densidades $n_s = 1.8 \times 10^{11} cm^{-2}$ en el experimento, la longitud de onda de Fermi es igual a $\lambda_F = 86 nm$.

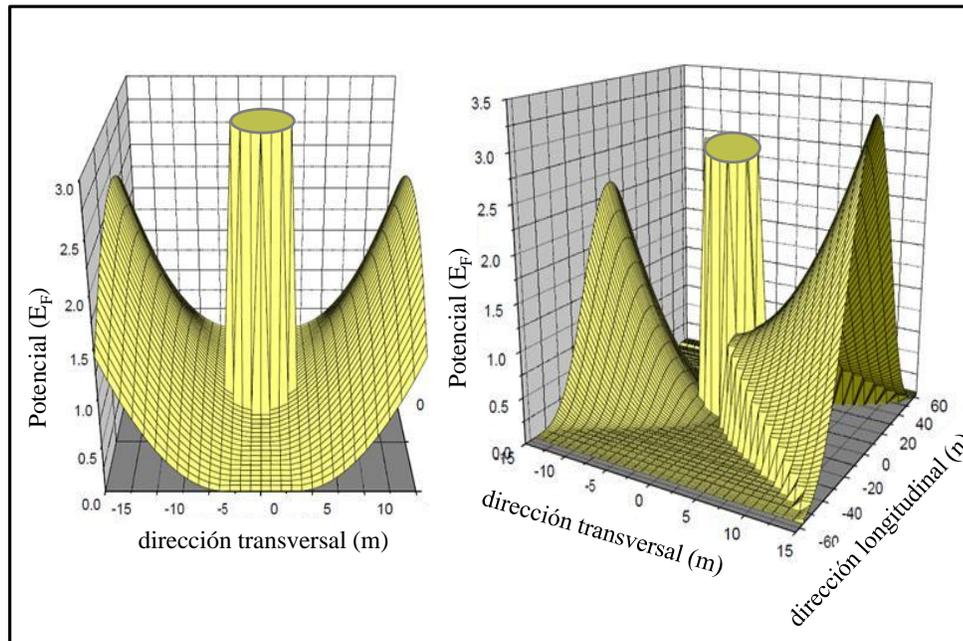


Figura 41. Representación tridimensional del potencial que simula el nanodispositivo estudiado experimentalmente. a) representa una configuración simétrica de las constricciones y b) una configuración asimétrica. Las letras n y m describen un sitio longitudinal y transversal respectivamente. La intensidad de la energía del potencial se mide en unidades de la energía de Fermi E_F .

de $7 G_0$, situación en la que ambas QPCs están totalmente abiertas. Esta condición se obtiene para un valor de V_1 y $V_2 = 0.0 E_F$.

Como guía visual sobre el mapa de color de la Figura 42 se pintan líneas horizontales. Cada una de ellas representa un valor constante de V_1 específico que define una configuración particular del número de modos que pasan por cada constricción. En la figura 43 se muestran las diferentes curvas de conductancia como función de V_2 para cada uno de los valores fijos de V_1 mostrados en la figura 42.

En la línea azul de la figura 43 se muestra el comportamiento de la conductancia como función de V_2 para un valor fijo de $V_1 = 1.0 E_F$. Estas condiciones del sistema

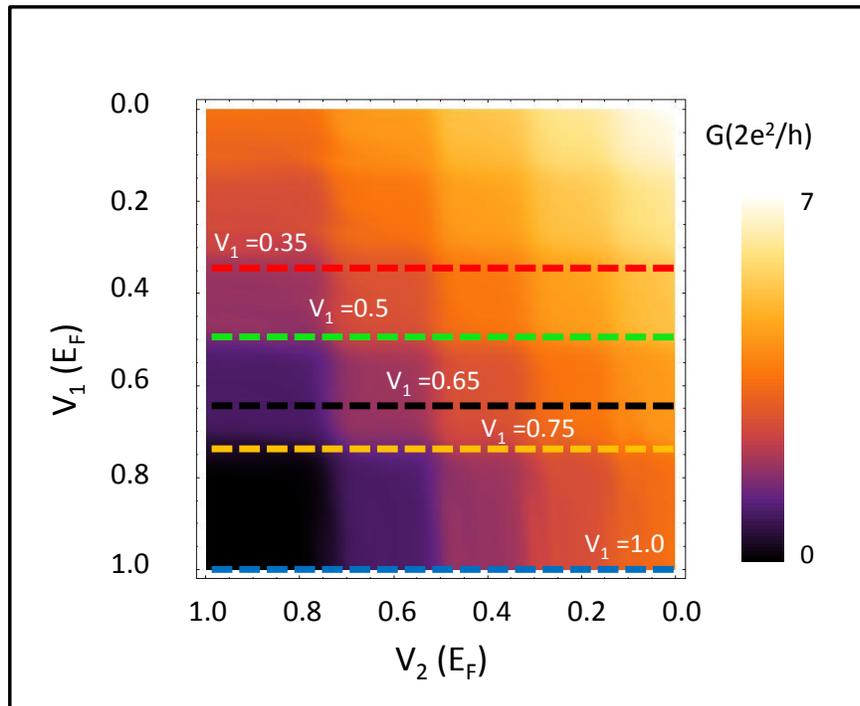


Figura 42. Mapa de color de la conductancia como función de los voltajes de compuerta V_1 y V_2 . En la figura se muestra la conductancia en donde colores oscuros se relacionan con valores bajos de conductancia, según la escala mostrada. Se observan líneas punteadas que representan valores constantes de V_1 (ver figura 43) (Villarreal *et al.* 2011).

constituyen una configuración en donde el QPC_1 se encuentra *cerrado*, y por ende, el transporte electrónico se lleva a cabo solo a través del QPC_2 . Conforme V_2 va disminuyendo, es decir, conforme el QPC_2 se va *abriendo*, se puede observar el comportamiento típico ascendente de la conductancia con *plateaus* en múltiplos de $\sim 2e^2/h$, lo cual constituye el signo distintivo de la *cuantización de la conductancia* a través de un QPC.

Sobre la misma línea azul en la figura 43 se encuentran dos flechas azules que denotan dos configuraciones específicas del sistema *a* y *b*. La configuración señalada en *a* está en un valor de la conductancia de $0 G_0$, indicando que ambas constricciones se encuentran cerradas. Esta condición es mostrada esquemáticamente en el diagrama de la izquierda

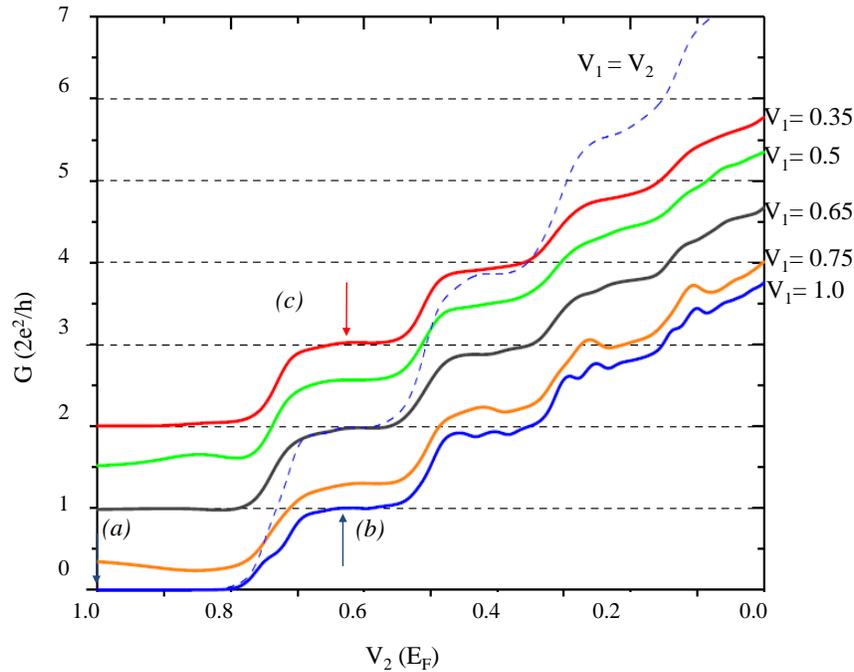


Figura 43. Cálculo de la conductancia en unidades de G_0 ($2e^2/h$) en función de la *apertura* de la constricción QPC_1 . Se observan curvas para diferentes valores fijos de la apertura del QPC_1 . Las flechas indican una configuración del sistema que permite que cierto número de modos pasen por una QPC específica, discutidas en el texto (Villarreal *et al.* 2011).

en la figura 44. La configuración *b* está colocada en un valor de la conductancia de $1G_0$, y constituye una configuración del nanodispositivo en donde la QPC_1 está cerrada ($V_1 = 1.0E_F$), y la apertura del QPC_2 es tal que solamente deja pasar un solo modo a través del sistema. Esta configuración se presenta esquemáticamente en el diagrama central de la figura 44. Es importante mencionar acerca de esta misma curva que, la inflexión que se observa en la conductancia alrededor de $0.5G_0$ no debe confundirse con un fenómeno de polarización de espín, dado que no existe tal polarización en las terminales y no se ha modelado aquí ninguna interacción que involucre fenómenos de espín. Es posible observar también un aumento ligeramente superior a G_0 en el primer *plateau*, en forma similar al observado en el experimento. Este hecho, atribuido

experimentalmente a resonancias tipo Ramsauer puede ser explicado en vez, en términos del nivel de adiabaticidad del potencial de confinamiento, según lo indican nuestras simulaciones.

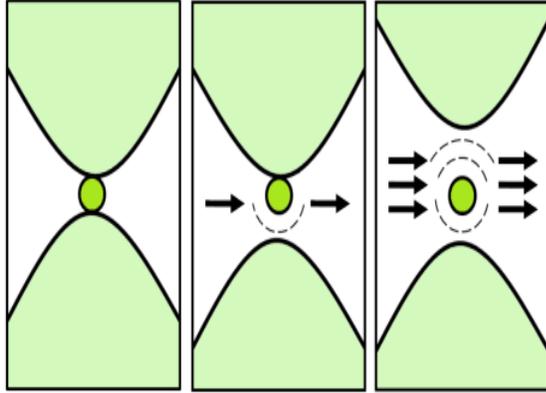


Figura 44. Esquema del potencial efectivo de la parte central del nanodispositivo en donde se muestran diferentes configuraciones particulares de apertura de las QPCs y el número específico de modos de transporte permisibles. En la figura de la izquierda ambas QPCs están cerradas, mientras que en la figura central se permite que un modo pase por una de las QPC y la otra permanece cerrada. Finalmente en la figura de la derecha se muestra una configuración en donde ambas QPCs están abiertas, por una de ellas pasan dos modos mientras que por la otra sólo uno.

Conforme la apertura de la QPC_1 se va modificando (abriendo) a través de un valor fijo de $V_1 = 0.75, 0.65, 0.5$ y $0.35 E_F$ (curvas *naranja*, *negra*, *verde* y *roja* respectivamente en la figura 43), se observa la forma en que el valor inicial de la conductancia a $V_2 = 0.0$ (QPC_2 cerrada) se va incrementando monótonicamente, debido a que el sistema inicia con una apertura fija inicial de la QPC_1 . La curva *roja* representa un caso límite en donde la apertura de la QPC_1 es fija y permite el paso de sólo dos modos de transporte, razón por la cual esta curva inicia en un valor de $2G_0$. La flecha roja en c sobre esta misma curva, señala una configuración específica en donde pasan dos modos por el QPC_1 ($V_1 = 0.35 E_F$) y un sólo modo por el QPC_2 ($V_2 \sim 0.6 E_F$), produciendo en forma efectiva una conductancia de $3G_0$. Esta configuración es mostrada en el esquema

derecho de la figura 44.

La curva *punteada* azul (en la figura 43) simula la configuración del nanodispositivo en donde ambas aperturas de las *QPCs* se varían de forma simétrica, es decir, con $V_1 = V_2$. Es por ello que los *plateaus* son ahora de una altura $2 G_0$, debido a la superposición coherente de modos provenientes de ambas constricciones.

Si se observa cuidadosamente el mapa de color de la medición experimental de la conductancia (figura 38a) es posible notar a simple vista que las fronteras de la región en donde la conductancia tiene un valor de cero (región oscura) tiene forma trapezoidal, señalada por las líneas *punteadas* rojas. Tal región demarca la transición del transporte de $0 \rightarrow 1$ electrones a través del doble QPC. Las fronteras de tal región muestran una ligera pendiente. Esta inclinación es experimentalmente atribuida a un fenómeno de *capacitancia* electrostática entre los dos electrodos que forman las constricciones. Este fenómeno no es reproducido fielmente en nuestra simulación numérica de la conductancia de la figura 42. En esta, claramente las fronteras de la región de conductancia cero describen líneas horizontales (para V_1 fijo) y verticales (para V_2 fijo) formando una región perfectamente cuadrada como la señalada por las líneas *punteadas* verdes en la figura 38a. Sin embargo, note que tanto en el experimento como en la simulación numérica existe una simetría en los mapas de color de la conductancia con respecto a la línea diagonal $V_1 = V_2$, indicando que ambas constricciones se comportan de forma semejante.

En la figura 45 se muestra el efecto sobre la conductancia de modelar un débil efecto capacitivo entre los electrodos que forman las QPCs. La forma que proponemos para modelar la capacitancia electrostática sigue el siguiente comportamiento acoplado de los voltajes aplicados,

$$V_1^* = V_1 + \Delta_C V_2. \quad (93)$$

$$V_2^* = V_2 + \Delta_C V_1. \quad (94)$$

en donde $V_{1,2}^*$ es la energía potencial efectiva (real) en el punto $x = y = 0$ experimentado por los electrones en las $QPC_{s_{1,2}}$ respectivamente, en tanto que $V_{1,2}$ es la energía del potencial, aplicada mediante un voltaje en los electrodos $V_{1,2}/|e|$, donde e es la carga eléctrica del electrón. El valor $|\Delta_C| < 1$ describe en nuestro modelo una constante de acoplamiento capacitivo. En la simulación mostrada en la figura 45 se utilizó un valor $\Delta_C = 0.1$. Se puede observar cómo la introducción de un efecto capacitivo reproduce bastante bien la inclinación en las líneas que describen la frontera de la región de conductancia cero en los mapas de color experimental (ver figura 38), por lo que es posible validar la aceveración experimental de Chen *et al.* de la existencia de un acoplamiento capacitivo entre los electrodos que definen las dos constricciones cuánticas.

Todo el estudio teórico-numérico anterior ha permitido validar en forma general la fenomenología observada en el experimento de transporte a través del nanodispositivo. Sin embargo, con la introducción de un campo magnético perpendicular al sistema se podrán hacer algunas predicciones teóricas del transporte en el nanodispositivo, y que esperamos estimule el desarrollo experimental de este tipo de sistemas con campo magnético.

Al introducir un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo en la simulación, es posible observar la aparición de resonancias tipo *Fano* en la conductancia como función del flujo magnético Φ , el cual se define como la relación del flujo magnético $\phi = Ba^2$ al cuanto de flujo magnético $\phi_0 = h/e$. Las resonancias tipo Fano es un

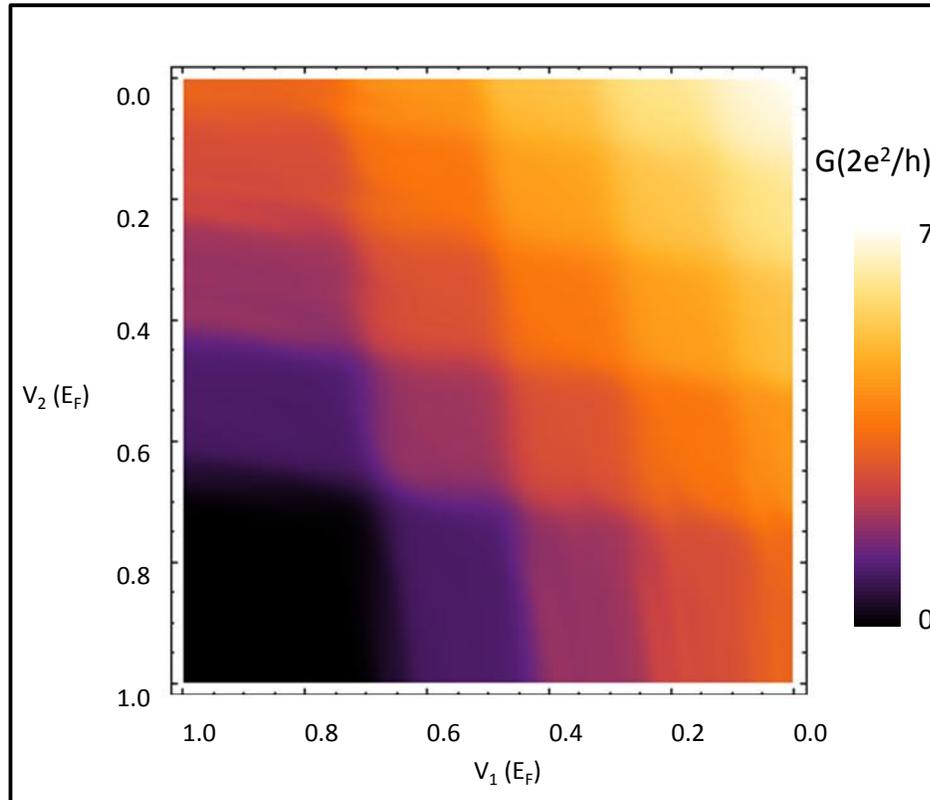


Figura 45. Cálculo numérico de la conductancia como función de V_1 y V_2 teniendo en cuenta una capacitancia electrostática entre los electrodos que definen las dos QPCs. Se usó una constante capacitiva igual a 0.1. Note la similitud con la gráfica experimental de la figura 38.

indicativo de la interacción de estados discretos con estados continuos en el sistema.

En la figura 46 se muestran curvas de la conductancia G como función de Φ para cuatro diferentes configuraciones del sistema. Es posible observar como para cada una de estas curvas, se manifiesta la influencia ya discutida en el capítulo IV, sobre la disminución del número de modos que participan en el transporte conforme el flujo magnético aumenta. Ésto debido al confinamiento adicional que introduce el campo.

La *línea verde* en la figura 46 representa una configuración de apertura de las QPCs de forma simétrica, es decir, ambas constricciones tienen la misma apertura ($V_1 = V_2 =$

$0.62 E_F$). Sobre ésta misma línea se señalan tres puntos particulares a, b y c . El punto indicado por a indica un flujo magnético ($\Phi = 0.06$) tal que el valor de la conductancia es $1 G_0$, donde G_0 es el cuanto de conductancia ($2e^2/h$). El punto b señala la presencia de una *antiresonancia* para un valor de flujo magnético de $\Phi = 0.066$ en donde el transporte electrónico es inhibido completamente. El punto c señala la presencia de una resonancia para un valor de $\Phi = 0.042$ y en donde la conductancia alcanza un valor $\sim 2 G_0$. Con el fin de que el lector tenga una idea de la magnitud del campo magnético involucrado, un flujo magnético $\Phi = 0.042$ equivale a una magnitud de campo magnético $B \sim 1 T$.

La línea *roja, azul y negra* en la figura 46 representan configuraciones en donde la apertura de las QPCs es diferente entre sí, es decir una configuración asimétrica. La curva roja representa la configuración en donde la QPC_2 se encuentra ligeramente más cerrada en relación a la QPC_1 , con un valor de $V_2 = 0.62 E_F$ y $V_1 = 0.60 E_F$ respectivamente. La situación descrita por la curva azul es también una configuración asimétrica en donde $V_1 = 0.58 E_F$ y $V_2 = 0.62 E_F$. Finalmente, la curva negra representa la mayor asimetría entre las constricciones en donde $V_1 = 0.56 E_F$ y $V_2 = 0.62 E_F$. Como se describe, la apertura de la QPC_2 se mantiene constante en un mismo valor de V_2 .

Es posible extraer de la figura 46 el período de las oscilaciones $\Delta\phi$ observadas en la conductancia como función del flujo magnético ϕ . La teoría del fenómeno Aharonov-Bohm, descrita en el capítulo II, muestra que el período de oscilación debe satisfacer la relación

$$S\Delta\phi = a^2\phi_0. \quad (95)$$

donde S representa el área de la impureza central y $\Delta\phi$ está relacionado con la adición de un cuanto de flujo magnético ϕ_0 al flujo total $\phi = BS$ conforme el campo magnético

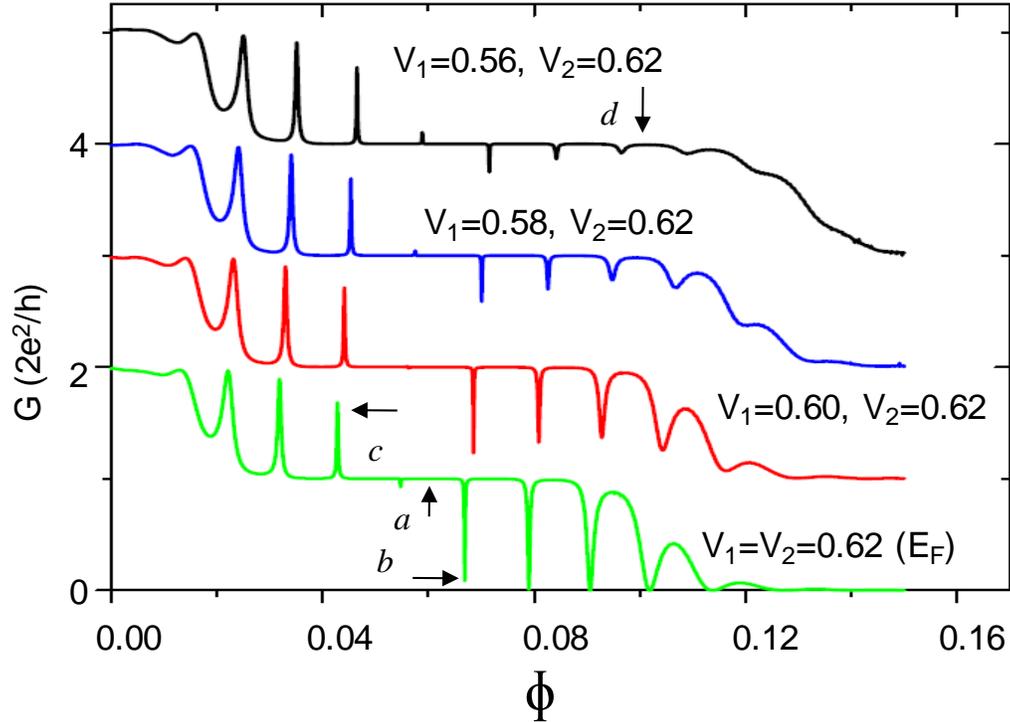


Figura 46. Gráfica de la conductancia G como función del flujo magnético Φ . Se muestran cuatro configuraciones de apertura de las constricciones (QPCs) en donde se observa la aparición de resonancias a flujos magnéticos ≤ 0.05 y de antiresonancias en la conductancia para flujos altos. La figura muestra claramente la modulación de las antiresonancias mediante la asimetría de apertura de los QPCs. Las flechas señalan condiciones específicas de flujo y campo para las cuales se ha calculado la *densidad local de estados LDOS* (ver figura 47).

B se incrementa.

El período de oscilación que puede extraerse de nuestros cálculos numéricos de la figura 46 arroja un valor de $\Delta\phi = 0.118972$, con lo cual puede obtenerse un área efectiva S^* circular con diámetro es $D^* \sim 129 \text{ nm}$. Este diámetro puede compararse con el diámetro extraído de la construcción de una región circular de una alta densidad local de estados (LDOS) alrededor de la impureza central (ver figura 47). Dicho diámetro es $D \sim 134 \text{ nm}$, el cual además coincide bastante bien con el obtenido de las oscilaciones

Aharonov-Bohm con dos veces el radio de ciclotrón $2r_c = 4\pi\hbar/eB\lambda_F = 145.8 \text{ nm}$ a $\Phi = 0.042$.

La transición mostrada en la figura 46 de un régimen de resonancias para flujos magnéticos bajos ($\Phi \leq 0.05$), a otro de antiresonancias para flujos magnéticos altos ($\Phi \geq 0.05$) puede explicarse en términos de la formación de *estados de borde* presentes en el nanodispositivo cuando el campo magnético está presente.

En la figura 47 se muestra un mapa de color de la *densidad local de estados* (LDOS) en donde es posible observar de manera gráfica la aparición de estados de borde. En las figuras *a, b, c* y *d* se muestran la densidad local de estados para un valor de flujo magnético específico y una configuración de apertura de las constricciones fija. Las figuras *a, b, c* y *d* corresponden a los mismos puntos señalados en la figura 46. Las figuras *a, b* y *c* representan una configuración simétrica de apertura de las QPCs en donde $V_1 = V_2 = 0.62 E_F$, en tanto que la figura *d* representa una configuración asimétrica con $V_1 = 0.56 E_F$ y $V_2 = 0.62 E_F$.

La presencia de un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo genera la aparición no sólo de estados de borde sino también la aparición de estados localizados en el centro del sistema con una velocidad de propagación de cero. Esto puede observarse a través de un alto valor de la densidad local de estados en la periferia de la impureza central. Este estado está representado por una línea punteada circular alrededor de la impureza. Los estados de borde pueden observarse a través de una alta densidad local de estados en los bordes de las constricciones, y que son representados por líneas punteadas sobre el mismo borde del nanodispositivo.

En la figura 47*a* se muestra la densidad local de estados para un flujo magnético $\Phi = 0.06$. Este punto corresponde al punto señalado como *a* en la figura 46, en donde la conductancia tiene un valor de $1 G_0$ debido a la contribución de un sólo estado de

borde al transporte electrónico en una configuración simétrica de apertura de las QPCs en el nanodispositivo ($V_1 = V_2 = 0.062 E_F$).

La figura 47b muestra la densidad local de estados para un flujo magnético $\Phi = 0.066$. Este punto corresponde al punto señalado como *b* en la figura 46 y revela una fenomenología interesante. Para este valor de flujo magnético la conductancia se anula completamente (ver figura 46). Este fenómeno puede ser explicado mediante un mecanismo de acoplamiento resonante entre el estado de borde superior y el estado de borde inferior via el estado localizado alrededor de la impureza central. De esta forma, el estado de borde superior que es un estado propagante hacia la derecha, cambia de dirección de propagación hacia la izquierda, debido al acoplamiento con el estado localizado central. Este acoplamiento induce una *reflexión resonante* y es el origen de la caída en la conductancia (antiresonancia) observada en la figura 46 en esta configuración simétrica del sistema. Un comportamiento similar en dispositivos con antiDOTS han sido reportados en la literatura (Takagaki y Ferry, 1993a; Kirczenow *et al.*, 1994)

En la figura 47c se muestra la densidad local de estados para un flujo magnético $\Phi = 0.042$, este punto corresponde al punto señalado como *c* en la figura 46. Justo en este punto se observa una resonancia en la conductancia, y ésta alcanza un valor de $\sim 2G_0$. La aparición de esta resonancia puede ser explicada análogamente en términos del acoplamiento de un estado que para este flujo magnético sería reflejado en la parte izquierda del sistema (ver línea punteada en 47c), con otro estado en la parte derecha del sistema que se dirige en sentido contrario. Una vez más, el responsable de dicho acoplamiento es el estado localizado alrededor de la impureza central. Esto origina que vía este acoplamiento, sean dos los modos que participan en el transporte, y se genere un *tunelamiento resonante* para la misma configuración simétrica del sistema.

En la figura 46 se puede observar que el efecto de la asimetría en la apertura de las

QPCs permite la posibilidad de modulación de las antiresonancias, en contraste con las resonancias, que son robustas a la asimetría del sistema. En la figura 47d se muestra la densidad local de estados para las condiciones de flujo magnético descritas con el punto d de la figura 46. Estas condiciones son un flujo $\Phi = 0.109$ y una configuración asimétrica de apertura de las constricciones tal que $V_1 = 0.56E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Si se compara éste mismo valor de flujo para las cuatro configuraciones de apertura de las constricciones descritas en la figura 46, se puede observar cómo una antiresonancia (caso simétrico) en donde la conductancia $G \sim 0$, va evolucionando hasta alcanzar un valor de $G \sim 1G_0$ (caso asimétrico). Esto puede explicarse si se observa la densidad local de estados en este punto (ver figura 47d), en donde se muestra que la asimetría de la apertura de las QPCs destruye el acoplamiento entre estados de borde via el estado localizado central. Es así como una antiresonancia en donde existía un acoplamiento entre estados de borde a través del estado localizado central, se transforma sólo en un estado propagante debido a la destrucción del estado localizado central. La predicción de este fenómeno de modulación de las antiresonancias a través de un voltaje de compuerta, hace posible la propuesta de utilización práctica como un nanodispositivo de control de carga eléctrica tipo interruptor o *switch*.

Finalmente con el fin de investigar el efecto de la temperatura sobre las resonancias Fano en la conductancia observadas en la Figura 46, se muestra en la Figura 48 un cálculo de la conductancia como función del flujo magnético para diferentes temperaturas. La configuración de las constricciones se mantiene simétrica a un valor $V_1 = V_2 = 0.62(E_F)$. La línea negra representa el cálculo para temperatura cero, la línea roja para una energía térmica $kT = 0.01$ y la línea verde para una energía térmica $kT = 0.1$, en unidades de la energía de Fermi (E_F). Las gráficas muestran que las resonancias y antiresonancias observadas en la conductancia a temperatura cero,

desaparecen rápidamente con el incremento de la temperatura. Esto podría ser una limitante en cualquier uso tecnológico del dispositivo a altas temperaturas.

De esta forma, el estudio teórico numérico del transporte electrónico a través de este nanodispositivo de doble QPC acoplado, ha permitido no sólo validar las observaciones experimentales realizadas por Chen (Chen *et al.*, 2009) a campo magnético cero, sino también hacer algunas predicciones teóricas sobre el transporte en este tipo de nanodispositivos con un campo magnético presente. Este tipo de predicciones teóricas esperamos estimule la concepción de nuevos experimentos en el campo de nanodispositivos semiconductores, que incluso puedan generar corrientes polarizadas de espín mediante la asimetría de un QPC de una forma totalmente eléctrica (Debray *et al.*, 2009).

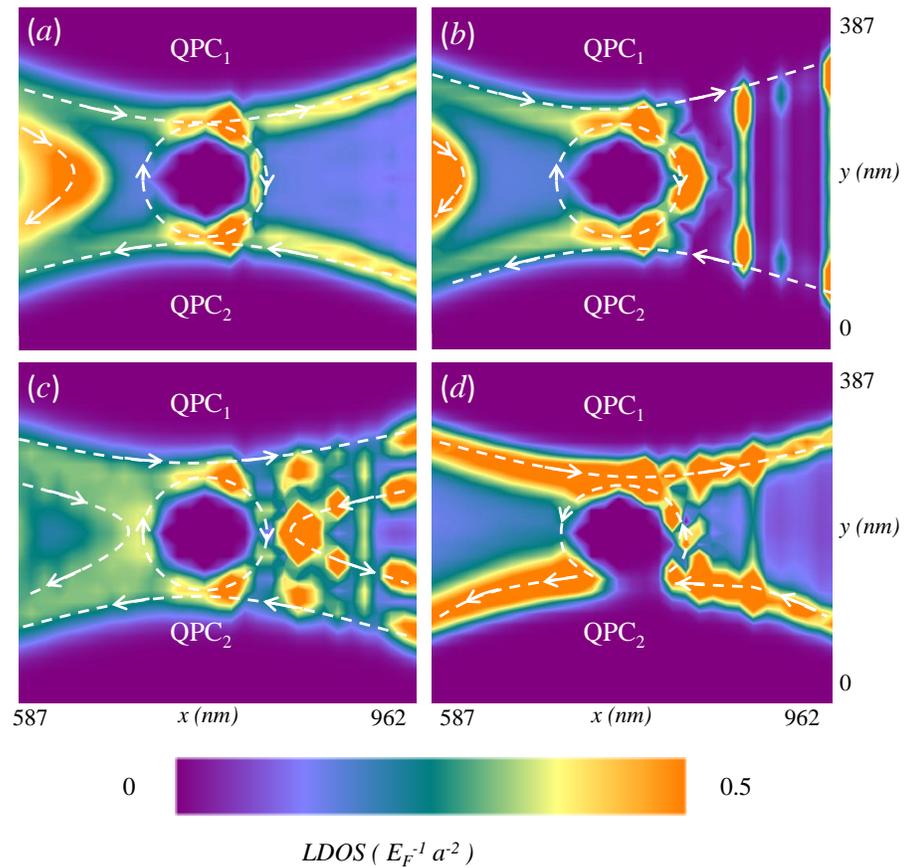


Figura 47. Mapa de color de la densidad local de estados $LDOS$ para diferentes valores de flujo magnético aplicado sobre el nanodispositivo. Las figuras a, b, c y d corresponden a puntos específicos señalados en la figura 46. La escala de color muestra un alto valor de la densidad local de estados $LDOS$ para colores claros y un valor bajo para colores oscuros. Las figuras a, b, c representan una configuración simétrica de apertura de las QPCs en el nanodispositivo, en tanto que d representa una configuración asimétrica. Los flujos magnéticos simulados son $\Phi = 0.06, 0.066, 0.042, 0.109$ para las figuras a, b, c y d respectivamente (Villarreal *et al.* 2011).

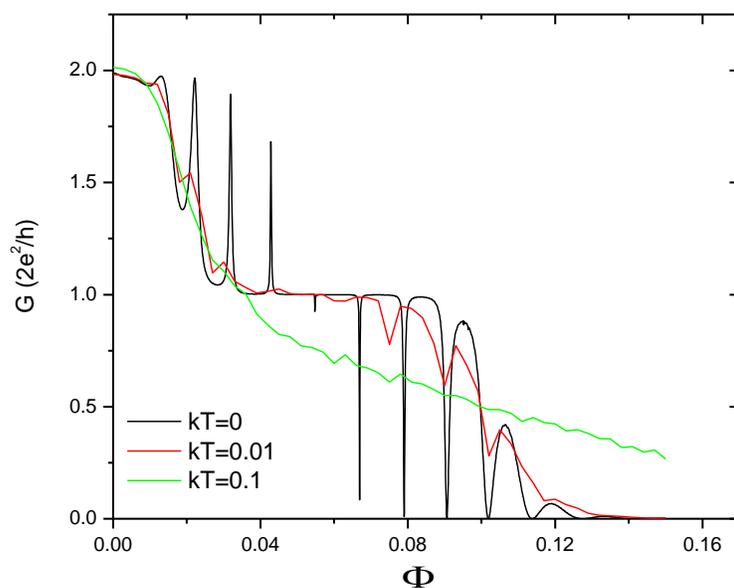


Figura 48. Gráfica de la conductancia como función del flujo magnético para diferentes valores de la energía térmica (kT) en unidades de E_F . La configuración de la apertura de las constricciones del nanodispositivo es simétrica $V_1 = V_2 = 0.62(E_F)$. Se observa una rápida desaparición de las resonancias con la temperatura.

Capítulo VII

NANODISPOSITIVO DE DOS CONSTRICCIONES EN PARALELO CON INTERACCIÓN ZEEMAN

La posibilidad de incluir el grado de libertad de espín en la concepción de nuevos dispositivos ha permitido que el área de la *espintrónica* sea actualmente un campo de estudio prometedor para la creación de una nueva electrónica basada en el espín.

Con el fin de estudiar la fenomenología de interferencia generada en el sistema de dos constricciones cuánticas en paralelo cuando el transporte electrónico depende del espín, en este capítulo se presentan cálculos del sistema experimental estudiado por Chen *et al.* (2009) en presencia de interacción Zeeman. Como veremos en detalle más adelante es posible observar condiciones del nanodispositivo para las cuales es posible obtener una corriente polarizada de espín.

VII.1 Efecto Zeeman en un doble QPC acoplado

El sistema experimental descrito por Chen *et al.* (2009) no toma en cuenta la influencia de un campo magnético perpendicular ni la posibilidad de que el transporte electrónico sea dependiente del espín. Para estudiar la influencia sobre los fenómenos de interferencia estudiados en el capítulo VI del grado de libertad de espín, se introduce en el sistema una interacción del tipo Zeeman.

La interacción Zeeman está definida por el Hamiltoniano:

$$H_{Zeeman} = \frac{1}{2}g^*\mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (96)$$

De esta forma, los electrones con espín hacia arriba (*up*) aumentan su energía en un valor de $g^*\mu_B/2$ con respecto al valor del nivel de energía en ausencia de campo magnético, mientras que los electrones con espín hacia abajo (*down*) disminuyen su energía en la misma magnitud.

La energía de Zeeman está definida como

$$\gamma = g^*\mu_B\frac{B}{2} \quad (97)$$

en donde se ha empleado en las simulaciones un factor g^* de Landé de 6 y un parámetro de red efectivo $a = 12.5 \text{ nm}$, lo que equivale a una energía de Zeeman $\gamma \sim 1.7 \times 10^{-4} \text{ eV}$ para un campo magnético de 1 T

En la figura 49 se observa el efecto sobre la conductancia de la magnitud del campo magnético aplicado en una configuración simétrica de apertura en las dos constricciones. La apertura en ambas constricciones se mantiene a un valor constante $V_1 = V_2 = 0.62 E_F$, donde E_F es la energía de Fermi. Esta conductancia depende ahora de la dirección de espín. La conductancia G^{++} representa la conductancia en el sistema cuando se hace incidir un electrón cuya dirección de espín es hacia *arriba* y el cual se transmite con la misma dirección de espín. De la misma forma G^{--} representa la conductancia en el sistema cuando se hace incidir un electrón con una dirección de espín hacia *abajo* y se transmite con esta misma dirección. Dado que no se considera un mecanismo que cambie la dirección de espín en el sistema, la conductancia G^{+-} y G^{-+} son ambas igual a cero.

La interacción Zeeman en el sistema permite observar la diferencia en el comportamiento de la conductancia dependiente del espín G^{++} y G^{--} . La influencia del campo

magnético $\phi = Ba^2$ en unidades del cuanto de flujo magnético $\phi_0 = h/e$, permite observar como se anula la conductancia G^{--} (línea roja) para campos magnéticos $\phi \sim 0.1$, al contrario de la conductancia G^{++} (línea negra). En ambas conductancias es posible observar la presencia de resonancias a campos magnéticos $\phi < 0.4$ y de antiresonancias para $\phi > 0.4$. El conjunto de resonancias y antiresonancias tiene una periodicidad que es posible atribuir a la influencia del fenómeno Aharonov-Bohm para cada uno de los canales de transporte de espín. Esto se debe a la presencia de un estado localizado alrededor de la impureza central que ahora depende de la dirección de espín.

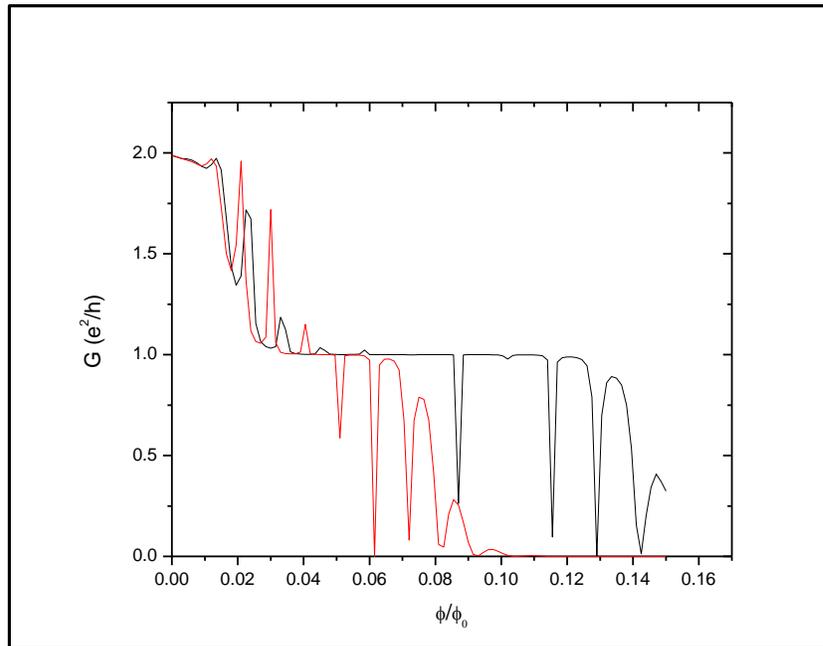


Figura 49. Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es simétrica. Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm.

En las figuras 50, 51 y 52 se muestra la influencia sobre las resonancias y antire-

sonancias observadas en la figura 49 de la *asimetría* de apertura de las constricciones cuánticas. En la figura 50 se muestra la conductancia para cada canal de espín G^{++} y G^{--} como función de la magnitud del campo magnético.

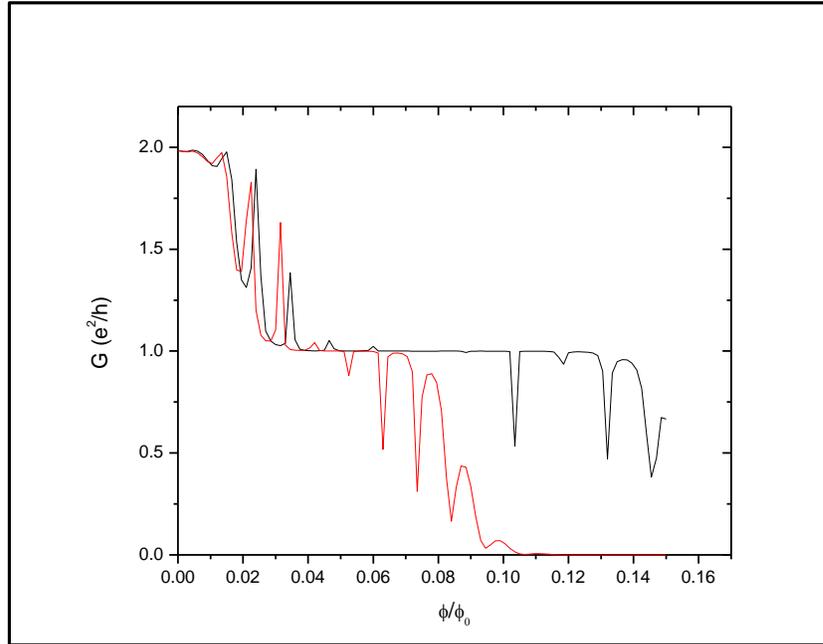


Figura 50. Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es *asimétrica*. Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = 0.60E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm que son moduladas por la asimetría de apertura de las constricciones.

La configuración de apertura de las constricciones es tal que la constricción 1 se mantiene a una apertura caracterizada por $V_1 = 0.60E_F$ y la constricción 2 a $V_2 = 0.62E_F$. El comportamiento de la conductancia es similar a la configuración simétrica, sin embargo, se empieza a observar una disminución en el acoplamiento entre el modo localizado central alrededor de la impureza y los estados de borde en las constricciones. Esto puede ser observado por el aumento en el valor de la conductancia en los puntos en

donde previamente (configuración simétrica) existe una antiresonancia. Sin embargo, se sigue observando la periodicidad en las resonancias y antiresonancias en la conductancia.

En la figura 51 se muestra el comportamiento de la conductancia para cada canal de espín como función de la magnitud del campo magnético. En éste caso la asimetría de la configuración de apertura de las constricciones se hace más importante. Una de las constricciones se mantiene a una mayor apertura con relación al caso simétrico igual a $V_1 = 0.58E_F$, mientras que la otra constricción se mantiene a $V_2 = 0.60E_F$.

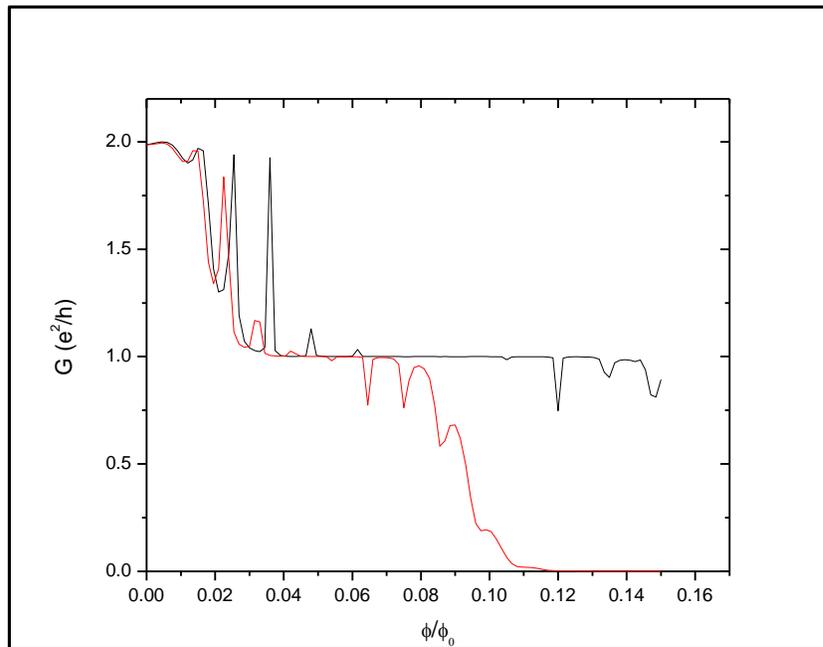


Figura 51. Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es *asimétrica*. Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = 0.58E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm que son moduladas por la asimetría de apertura de las constricciones.

Note cómo el efecto de la asimetría de apertura disminuye aún más el acoplamiento entre el modo localizado central y los estados de borde en el sistema. La caída pronun-

ciada en la conductancia observada en el caso de apertura simétrica de las constricciones, sufre un aumento en la misma, que es un indicativo de la menor interacción entre el estado central y el de borde. Puede observarse cómo persiste la periodicidad de las anti-resonancias en la conductancia $G^{-,-}$; sin embargo, la conductancia $G^{+,+}$ prácticamente ha perdido la dinámica de antiresonancias y deja de presentar interferencia cuántica inducida por el efecto Aharonov-Bohm.

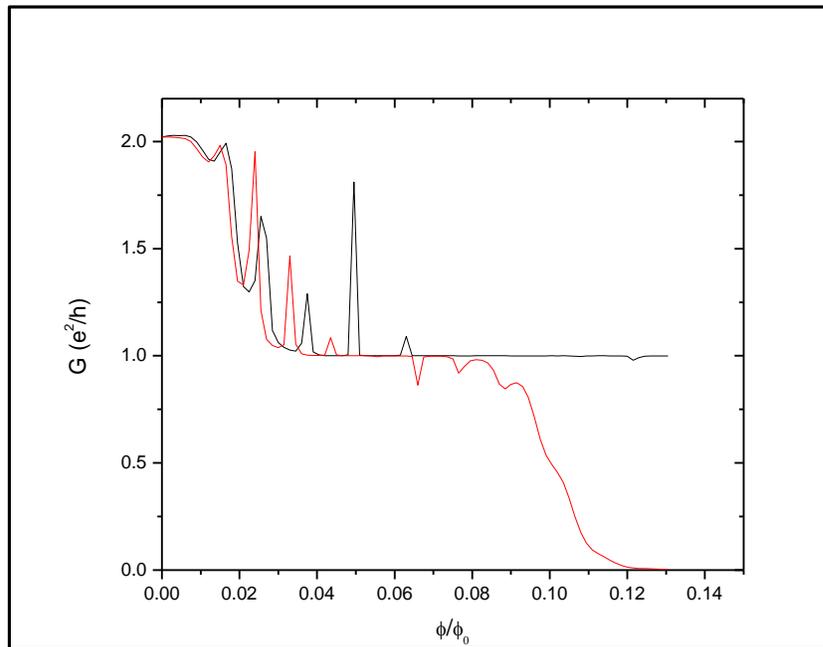


Figura 52. Conductancia G^{++} (línea negra) y G^{--} (línea roja) como función de la magnitud del campo magnético. La configuración de apertura de las dos constricciones cuánticas es *asimétrica*. Se mantiene a una apertura constante caracterizada por $V_1 = 0.56E_F$ y $V_2 = 0.62E_F$. Se observa una conductancia diferente para ambos canales de espín y la aparición de resonancias y antiresonancias periódicas relacionadas con el fenómeno Aharonov-Bohm que son moduladas por la asimetría de apertura de las constricciones.

En la figura 52 se muestra la conductancia por espín para la configuración más asimétrica estudiada. En este caso la constricción 1 se mantiene a $V_1 = 0.56E_F$ y la constricción 2 a $V_2 = 0.60E_F$. En esta configuración se observa cómo el acoplamiento

entre el modo central y el estado de borde para el transporte de espín hacia arriba (up) ha desaparecido, pudiendo observarse cómo la conductancia G^{++} deja de presentar antiresonancias. Sin embargo, la conductancia G^{--} parece ser más robusta en cuanto a preservar la periodicidad de las antiresonancias, pero con un valor de la conductancia mayor con relación al caso simétrico de apertura de las constricciones.

En conclusión, es posible generar corrientes polarizadas de espín mediante la interacción tipo Zeeman en un sistema en donde se tienen dos constricciones cuánticas en paralelo construidas alrededor de una impureza central. La influencia de un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo genera estados localizados y estados de borde que dependen de la dirección de espín de los electrones. El acoplamiento entre este estado central localizado y los estados de borde puede ser manipulado por la asimetría de apertura de las constricciones cuánticas y depende de la dirección de espín.

Capítulo VIII

CONCLUSIONES

Se ha analizado teóricamente el transporte electrónico en diferentes nanodispositivos cuasi-unidimensionales mediante el formalismo de respuesta lineal de Landauer. Este formalismo permite estudiar el transporte mediante la amplitud de transmisión de un electrón, es decir, en términos de la probabilidad de transmisión de un electrón a través de un sistema. Para el cálculo de la amplitud de transmisión a través del nanodispositivo se ha utilizado un formalismo de construcción en forma recursiva de la función de Green del sistema, el cual permite calcular la conductancia a través del mismo. Se ha utilizado un Hamiltoniano tipo amarre fuerte (*tight binding*) en dos dimensiones para describir el sistema.

Se han estudiado nanodispositivos que constituyen *elementos básicos* mediante los cuales, por sí solos, o mediante la combinación de algunos de ellos, es posible construir nanodispositivos que permiten tener un mayor grado de libertad en el control del transporte electrónico. Estos elementos básicos están constituidos por nanoalambres y diferentes tipos de dispersores inmersos en el mismo, como por ejemplo, impurezas en cierta región del nanoalambre, barreras cuánticas o constricciones cuánticas (QPCs).

Cada uno de los sistemas anteriores presenta una fenomenología de transporte muy diferente que permite estudiar variedad aspectos físicos de interés, tales como localización de carga mediante la presencia de impurezas atractivas, aspectos de interferencia cuántica debido a la creación de trayectorias cerradas (*loops*) inducidas por la presencia de discos o impurezas repulsivas, y aspectos de cuantización de la conductan-

cia tanto en nanoalambres como en constricciones cuánticas QPCs. Esta rica variedad de fenómenos hace posible imaginar cualquier combinación de elementos para crear un nanodispositivo con características que permitan explotar en su operación cierto fenómeno o conjunto de fenómenos en particular con el fin de modular el transporte de carga eléctrica.

La inclusión de un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo, con la posibilidad de que ahora se manifiesten en el sistema la presencia de estados de borde y estados localizados de velocidad cero, hace que la ya de por sí rica variedad de fenómenos explotados en un nanodispositivo únicamente por efecto de un dispersor, se incremente considerablemente, con la posibilidad de estudiar fenómenos tan variados como el efecto Hall cuántico o el fenómeno Aharonov-Bohm.

La implementación numérica del modelo teórico descrito en el presente trabajo ha permitido modelar experimentos de transporte electrónico en nanodispositivos, en particular, un nanodispositivo que contiene dos constricciones cuánticas en paralelo creadas con la ayuda de una impureza central, debido a la versatilidad de la plataforma numérica desarrollada. Las simulaciones del transporte electrónico a través de este sistema han permitido reproducir las mediciones experimentales de conductancia, y en algunos casos hasta en los detalles más finos mostrados en las curvas experimentales.

Con la introducción numérica de un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo, se han podido hacer algunas predicciones teóricas del transporte en el sistema. Nuestros cálculos predicen la aparición de estados de borde y estados localizados alrededor de la impureza. La interacción de los estados localizados y los estados propagantes genera la aparición de resonancias y antiresonancias tipo Fano que modifican el transporte electrónico como función de la asimetría del potencial de confinamiento de los QPCs. Otra de las predicciones incluye la observación de un novedoso

efecto de interruptor que permite modular el transporte de carga eléctrica mediante la asimetría de voltajes de compuerta aplicados. Este y otros resultados importantes fueron publicados recientemente en la revista *Applied Physics Letters* (Villarreal *et al.*, 2011).

El formalismo teórico implementado es sumamente versátil ya que permite explorar el transporte electrónico balístico en un gran número de sistemas cuánticos cuasi-unidimensionales con cualquier tipo de dispersores elásticos en general. Posibles líneas futuras de investigación se encuentran en estudiar la influencia de desorden sobre el transporte, fenómenos de localización de carga y la influencia de la interacción espín-órbita en éste tipo de sistemas.

Referencias

- Aharonov, Y. y Bohm, D. (1959). Significance of electromagnetics potentials in the quantum theory. *Physical Review*, **115**(3): 485–491.
- Ando, T. (1991). Quantum point contacts in magnetic fields. *Phys. Rev. B*, **44**(15): 8017–8027.
- Bagwell, P. F. (1990). Solution of dyson’s equation in a quasi-1d wire. *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**: 6179–6188.
- Baibich, M. N., Broto, J. M., Fert, A., Nguyen Van Dau, F., y Petroff, F. (1988). Giant magnetoresistance of (001) fe / (001) cr magnetic superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, **61**(21): 2472–2475.
- Batelaan, H. y Tonomura, A. (2009). The aharonov-bohm effects: Variations on a subtle theme. *Physics Today*, **62**(9): 38–43.
- Beenakker, C. y van Houten, H. (1991). Quantum transport in semiconductor nanostructures. *Solid State Phys.*, **44**: 1–228.
- Beenakker, C. W. J. y van Houten, H. (1989). Magnetotransport and nonadditivity of point-contact resistances in series. *Phys. Rev. B*, **39**(14): 10445–10448.
- Bellucci, S. y Onorato, P. (2006). Integer spin hall effect in ballistic quantum wires. *Phys. Rev. B*, **73**: 045329–6.
- Bird, J. y Ochiai, Y. (2004). Electron spin polarization in nanoscale constrictions. *Science*, **303**: 1621–1622.
- Büttiker, M. (1990). Quantized transmission of a saddle-point constriction. *Phys. Rev. B*, **41**(11): 7906–7909.
- Castaño, E. y Kirczenow, G. (1990). Theory of nonlinear transport in narrow ballistic constrictions. *Phys. Rev. B*, **41**(6): 3874–3877.
- Chappert, C., Fert, A., y Nguyen Van Dau, F. (2007). The emergence of spin electronics in data storage. *Nature materials*, **6**: 813–823.
- Chen, J. C., Lin, Y., Lin, K. T., Ueda, T., y Komiyama, S. (2009). Effects of impurity scattering on the quantized conductance of a quasi-one-dimensional quantum wire. *Appl. Phys. Lett.*, **94**(1): 012105(1)–012105(3).
- Chu, C. y Sorbello, R. (1989). Effect of impurities on the quantized conductance of narrow channels. *Phys. Rev. B*, **40**(9): 5941–5949.

- Datta, S. (1995). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, primera edición.
- Datta, S. y Das, B. (1990). Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.*, **56**: 665.
- Debray, P., Rahman, S., Wan, J., Newrock, R., Cahay, M., Ngo, A., Ulloa, S., Herbert, S., Muhammad, M., y Johnson, M. (2009). All-electric quantum point contact spin-polarizer. *Nat. Nanotechnol.*, **4**: 759.
- Ferry, G. (2009). *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, Cambridge, segunda edición. 653 pp.
- Fertig, H. y Halperin, B. (1987). Transmission coefficient of an electron through a saddle-point potential in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, **36**(15): 7969–7976.
- Fisher, D. S. y Lee, P. A. (1981). Relation between conductivity and transmission matrix. *Phys. Rev. B*, **23**(12): 6851–6854.
- Goldman, V., Su, B., y Jain, J. (1994). Detection of composite fermions by magnetic focusing. *Phys. Rev. Lett.*, **72**(13): 2065–2068.
- Ihnatsenka, S. y Zozoulenko, I. (2007). Conductance of a quantum point contact based on spin-density-functional theory. *Phys. Rev. B*, **76**: 045338(1–9).
- Imry, Y. y Landauer, R. (1999). Conductance viewed as transmission. *Rev. Mod. Phys.*, **71**(2): S306–S312.
- Kirczenow, G., Sachrajda, A., Feng, Y., Taylor, R., Henning, L., Wang, J., Zawadzki, P., y Coleridge, P. (1994). Artificial impurities in quantum wires: From classical to quantum behavior. *Phys. Rev. Lett.*, **72**(13): 2069–2072.
- Meir, Y., Hirose, K., y Wingreen, N. S. (2002). Kondo model for the "0.7 anomaly" in transport through a quantum point contact. *Phys. Rev. Lett.*, **89**: 196802.
- Mireles, F. y Kirczenow, G. (2001). Ballistic spin-polarized transport and rashba spin precession in semiconductor nanowires. *Phys. Rev. B*, **64**.
- Molenkamp, L., Staring, A., Beenakker, C. W. J., Eppenga, R., Timmering, C., Williamson, J., Harmans, C., y Foxon, C. (1990). Electron-beam collimation with a quantum point contact. *Phys. Rev. B*, **41**(2): 1274–1277.
- Nakamura, A. y Nonoyama, S. (1997). Quantum interference effects on the electron conduction through negative-potential regions. *Phys. Rev. B*, **56**(15): 9649–9656.
- Nitta, J. y Koga, T. (2003). Rashba spin-orbit interaction and its applications to spin-interference effect and spin-filter device. *Journal of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism*, **16**(4): 689–696.

- Palacios, J. J. y Tejedor, C. (1993). Mode-matching technique for transmission calculations in electron waveguides at high magnetic fields. *Phys. Rev. B*, **48**(8): 5386–5394.
- Prinz, G. (1998). Magnetoelectronics. *Science*, **282**: 1660.
- Rejec, T. y Meir, Y. (2006). Magnetic impurity formation in quantum point contacts. *Nature*, **442**: 900.
- Roach, G. F. (1982). *Green's functions*. Cambridge University Press, New York, segunda edición.
- Takagaki, Y. y Ferry, D. K. (1993a). Quantum-interference effects of edge channels in the presence of an antidot potential. *Phys. Rev. B*, **48**(11): 8152–8155.
- Takagaki, Y. y Ferry, D. K. (1993b). Aharonov-bohm effect in a single quantum barrier. *Phys. Rev. B*, **47**(15): 9913–9916.
- Takagaki, Y. y Ploog, K. (1995). Tunneling transmission in quantum wires in the presence of magnetic fields. *Phys. Rev. B*, **51**(11): 7017–7023.
- Thomas, K., Nicholls, J. T., Simmons, M. Y., Pepper, M., Mace, D. P., y Ritchie, D. A. (1996). Possible spin polarization in a one-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett*, **77**: 135.
- van Houten, H., van Wees, B. J., y Beenakker, C. W. J. (1988). *Quantum and Classical Ballistic Transport in Constricted Two-Dimensional Electron Gas*, Vol. 83. Springer-Verlag, Berlin. 198-207.
- van Wees, B. J., Kouwenhoven, L. P., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., Mooij, J., Foxon, C., y Harris, J. (1988a). Quantized conductance of magnetoelectric subbands in ballistic point contacts. *Phys. Rev. B*, **38**(5): 3625–3627.
- van Wees, B. J., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P., van der Marel, D., y Foxon, C. T. (1988b). Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas. *Phys. Rev. Lett.*, **60**(9): 848–850.
- van Wees, B. J., Kouwenhoven, L. P., Willems, E., Harmans, C., Mooij, J., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., J.G., W., y Foxon, C. (1991). Quantum ballistic and adiabatic electron transport studied with quantum point contacts. *Phys. Rev. B*, **43**(15): 12431–12453.
- Villarreal, R., Mireles, F., Marinero, E., y Gurney, B. (2011). Tuning fano-type resonances in coupled quantum point contacts by applying asymmetric voltages. *Appl. Phys. Lett.*, **98**: 172102(1–3).
- Webb, R. A. y Washburn, S. (1988). Quantum interference fluctuations in disordered metals. *Physics Today*, **41**(12): 46.

- Weiss, D., Roukes, M., Mensching, A., Grambow, P., von Klitzing, K., y Weimann, G. (1991). Electron pinball and commensurate orbits in a periodic array of scatterers. *Phys. Rev. Lett.*, **66**(21): 2790–2793.
- Weiss, D., Richter, K., Mensching, A., Berrgmann, R., Schweizer, H., von Klitzing, K., y Weimann, G. (1993). Quantized periodic orbit in large antidot arrays. *Phys. Rev. Lett.*, **70**(26): 4118–4121.
- Wharam, D. A., Thornton, T. J., Newbury, R., Pepper, M., Ahmed, H., Frost, J. E. F., Hasko, D. G., Peacock, D. C., Ritchie, D. A., y Jones, G. A. C. (1988). One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21**(8): L209–L214.
- Wolf, S. (2001). Spintronics: A spin-based electronics vision for the future. *Science*, **294**: 1488.
- Yacoby, A., Heiblum, M., Mahalu, D., y Shtrikman, H. (1995). Coherence and phase sensitive measurements in a quantum dot. *Journal of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism*, **74**(20): 4047–4050.
- Yacoby, A. e Imry, Y. (1990). Quantization of the conductance of ballistic point contacts beyond the adiabatic approximation. *Phys. Rev. B*, **41**(8): 5341–5350.
- Yoon, Y., Kang, M.-G., Morimoto, T., Mourokh, L., Aoki, N., Reno, J., Bird, J., y Ochiai, Y. (2009). Detector backaction on the self-consistent bound state in quantum point contacts. *Phys. Rev. B*, **79**: 121304(1–4).
- Ziese, M. y Thornton, M. J. (2001). *Spin electronics*. Springer, Leipzig, Germany, primera edición.
- Zozoulenko, I. V. y Evaldsson, M. (2004). Quantum antidot as a controllable spin injector and spin filter. *Appl. Phys. Lett.*, **85**(15): 3136–3138.
- Zutic, I., Fabian, J., y Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.*, **76**: 323.

Apéndice A

CAMPO MAGNÉTICO EN EL FORMALISMO DE AMARRE FUERTE

En éste apéndice se describe la forma en que se toma en cuenta la interacción de un campo magnético en el formalismo de amarre fuerte, empezando con la descripción de algunos conceptos en el límite continuo.

El Hamiltoniano de una partícula con carga eléctrica q y masa m inmersa en un campo electromagnético en el continuo esta dado por:

$$H(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} [\hat{p} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 - q\phi(\mathbf{r}, t) \quad (98)$$

donde $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ es el potencial vectorial magnético, $\phi(\mathbf{r}, t)$ es el potencial electrostático, \hat{p} es el operador de momento, \mathbf{r} es el vector de posición y t es el tiempo.

Si se aplica una transformación unitaria a la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ asociada al Hamiltoniano (98), tenemos

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \hat{O}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (99)$$

donde \hat{O} es un operador unitario y ψ' la función de onda transformada. Con ésta transformación, la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (100)$$

se transforma en

$$i\hbar \frac{\partial \psi'(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}'\psi'(\mathbf{r}, t) \quad (101)$$

donde \hat{H}' esta dado explícitamente por

$$\hat{H}' = \hat{O}\hat{H}\hat{O}^\dagger - i\hbar\hat{O}\frac{\partial\hat{O}^\dagger}{\partial t}. \quad (102)$$

Si se define al operador unitario \hat{O} que genera la transformación como

$$\hat{O} = e^{-\frac{iq}{\hbar}f(\mathbf{r},t)} \quad (103)$$

con $f(\mathbf{r}, t)$ una función que depende de la posición y del tiempo, el Hamiltoniano \hat{H}' adquiere la forma explícita:

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} [\hat{p} + q(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f)]^2 - q \left(\phi - \frac{\partial f}{\partial t} \right) \quad (104)$$

que en el caso particular en que no exista un campo eléctrico ($\phi = 0$) y además $f = f(\mathbf{r})$, es decir, no depende explícitamente del tiempo, el Hamiltoniano anterior se reduce a

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} [\hat{p} + q(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) + \nabla f]^2 \quad (105)$$

Si se escoge $f(\mathbf{r}) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}$, entonces $\nabla f = -\mathbf{A}(\mathbf{r})$ y el Hamiltoniano (104) se reduce simplemente a

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \quad (106)$$

Esta transformación permite que la información del campo magnético se traslade a la función de onda en lugar de estar presente en el Hamiltoniano.

La forma de introducir un campo magnético en el Hamiltoniano de amarre fuerte, descrito en la sección anterior, es a través de la transformación unitaria anterior. El término de tunelamiento o *hopping* que se utiliza en el Hamiltoniano de amarre fuerte está dado por:

$$t_{i,j}^{B=0} = \langle \phi_i | \hat{H}_{TB} | \phi_j \rangle \quad (107)$$

donde ϕ_i y ϕ_j son las funciones de onda localizadas en los sitios i y j respectivamente de una red bidimensional descrita por el Hamiltoniano de amarre fuerte (TB). Debido a que el Hamiltoniano puede transformarse a través de $\hat{H} = \hat{O}^\dagger \hat{H}' \hat{O}$, se tiene

$$t_{i,j} = \langle \phi_i | e^{-\frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{r}} \hat{H}'_{TB} e^{-\frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{r}} | \phi_j \rangle \quad (108)$$

por lo que puede escribirse como

$$t_{i,j} = t_{i,j}^{B=0} e^{\frac{iq}{\hbar} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \quad (109)$$

De esta forma, es posible observar que el efecto de introducir un campo magnético en un sistema descrito por el Hamiltoniano de amarre fuerte conduce a la adición de una fase en el término de tunelamiento o traslape. Si el desplazamiento es infinitesimal, la fase puede escribirse como $iq/\hbar \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$, donde $d\mathbf{l}$ es precisamente dicho desplazamiento. Si se utiliza el teorema de Stokes es posible transformar la integral de línea anterior en una integral de superficie $\int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S}$, la cual involucra el rotacional del potencial vectorial magnético, lo cual es a su vez, la densidad de flujo magnético $B = \nabla \times A$.

En particular, si se trata de estudiar un nanodispositivo bidimensional mediante el Hamiltoniano de amarre fuerte en dos dimensiones y en el sistema se encuentra presente un campo magnético perpendicular al plano del nanodispositivo (z por ejemplo), es posible describir dicho campo mediante un potencial vectorial magnético $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$ (norma de Landau). Éste potencial vectorial genera un campo magnético $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ en la dirección z . De ésta forma, el término de tunelamiento presente en el Hamiltoniano de amarre fuerte puede ser escrito como:

$$t_x = t_x^{B=0} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}} \quad (110)$$

donde $\Phi = a^2 B$ es la densidad de flujo magnético, siendo a el parámetro de red y $\Phi_0 = h/e$ es el *cuanto de flujo magnético*. Como puede observarse, debido a la conveniente

elección de la norma de Landau, es posible incorporar la influencia del campo magnético mediante una fase en el término de tunelamiento t_x en la dirección x , mientras que en la dirección y se tiene sólo el término de tunelamiento t_y . A esta transformación se le conoce como transformación de Pierls.

Apéndice B

DENSIDAD LOCAL DE ESTADOS (LDOS)

El operador de función de Green está definido por

$$G(z) = \frac{1}{E - H} \quad (111)$$

donde E es la energía y H el Hamiltoniano del sistema. Si se hace uso de la expansión de la unidad en términos de las eigenfunciones del Hamiltoniano

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (112)$$

el operador G puede escribirse como:

$$G(z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{E - E_n} \quad (113)$$

Si el operador anterior se proyecta sobre la base de coordenadas es posible expresarlo como:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n} \quad (114)$$

Utilizando la propiedad

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta x \quad (115)$$

donde P es el valor principal, los elementos diagonales del operador ($\mathbf{r} = \mathbf{r}'$) anterior pueden escribirse como:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = P \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r})}{E - E_n} + i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^* \quad (116)$$

La cantidad:

$$\rho(\mathbf{r}; E) = \sum_n \delta(E - E_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^* \quad (117)$$

se le conoce como la densidad local del estados (LDOS) por unidad de área. En términos de la función de Green es posible escribir la densidad local de estados simplemente como

$$\rho(\mathbf{r}; E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)] \quad (118)$$

Identidad muy útil para el cálculo numérico de la LDOS que involucra sólo el conocimiento de la función de Green local del sistema.

Apéndice C

FÓRMULAS DE RECURRENCIA DE LA FUNCIÓN DE GREEN TOTAL

En éste apéndice se detalla la forma de generar la recursión para obtener la función de Green total del sistema descrito en el capítulo IV.

La iteración para el cálculo de la función de Green descrita en la ec. (76) del capítulo IV inicia con el término

$$g^0 = G_{0,0} = (E - \tilde{H}_0)^{-1} \quad (119)$$

donde

$$\tilde{H}_0 = H_0 - t \sum_{j=1}^M e^{ik_j} Q_j \quad (120)$$

siendo H_0 el Hamiltoniano de la terminal ideal izquierda y en donde el segundo término de (120) representa una autoenergía que contiene la información de la influencia de la terminal sobre la región central (ver apéndice D). Los elementos de la matriz Q_j contienen la función de onda transversal del nanoalambre y están dados por

$$(Q_j)_{p,p'} = \frac{2}{M+1} \text{sen} \frac{j\pi p}{M+1} \text{sen} \frac{j\pi p'}{M+1} \quad (121)$$

$$(p, p' = 1, \dots, M)$$

donde j es un modo de propagación, p, p' son sitios de la celda y M es el número total de sitios en la celda.

Después de unir la celda 0 de la terminal izquierda y la celda 1 de la región central, el procedimiento continúa para las demás celdas de la región central hasta la celda N , donde \tilde{H}_l en (76) es:

$$\tilde{H}_l = H_l \quad (1 \leq l \leq N) \quad (122)$$

El último paso de la iteración consiste en unir la celda de la terminal derecha denotada por $N + 1$ en donde

$$\tilde{H}_{N+1} = H_{N+1} - t \sum_{j=1}^M e^{ik_j} Q_j \quad (123)$$

que al igual que en la terminal izquierda, se adiciona también un término que representa una autoenergía debido a la influencia de la terminal. De esta forma las ecuaciones (76) y (77) son iteradas variando únicamente el Hamiltoniano de la celda involucrada.

En el caso en que se tome en cuenta algún mecanismo que conserve el espín como efecto Zeeman, las ecuaciones de iteración siguen siendo las mismas, sin embargo, ahora se tienen matrices de dimensión $2M \times 2M$. De ésta forma la iteración comienza con

$$\tilde{H}_0 = H_0 - tF(\sigma_{incidente}) \quad (124)$$

que representa la interacción de la terminal en la celda 0 sobre la región central del nanodispositivo (ver apéndice) y $\sigma_{incidente}$ es el estado de espín que incide al dispositivo $|+\rangle$, $|-\rangle$. Las demás iteraciones de las celdas de la región central estarán dadas por

$$\tilde{H}_l = H_l \quad (1 \leq l \leq N) \quad (125)$$

La última iteración en la celda $N + 1$ representa también una celda de la terminal,

por lo que se tomará en cuenta a través de una autoenergía (ver apéndice D)

$$\tilde{H}_{N+1} = H_{N+1} - tF(\sigma_{transmitido}) \quad (126)$$

donde $\sigma_{transmitido}$ es el estado de espín transmitido en el nanodispositivo y el término $F(\sigma)$ es

$$F(\sigma) = \sum_{j=1}^M e^{i k_j} [Q_j \otimes \xi(\sigma_z)] \quad (127)$$

donde \otimes representa el producto directo, k_j es el vector de onda del modo j y los elementos de la matriz Q_j están dados por

$$(Q_j)_{p,p'} = \frac{2}{M+1} \text{sen} \frac{j\pi p}{M+1} \text{sen} \frac{j\pi p'}{M+1} \\ (p, p' = 1, \dots, M) \quad (128)$$

con

$$\xi(+)= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (129)$$

$$\xi(-)= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (130)$$

La recursión descrita en la ec. (76) del capítulo IV permite calcular la función de Green total del sistema mediante los pasos descritos en éste apéndice.

Apéndice D

AUTOENERGÍA DEBIDA A TERMINALES

En este apéndice se calcula explícitamente la autoenergía debida a las terminales y que son utilizadas en el paso inicial y final, descrito en el apéndice C, para el cálculo recursivo de la función de Green (ecs. 120, 123).

Un nanodispositivo cuasi unidimensional puede ser modelado mediante la descripción de una región central a la cual se unen dos terminales ideales a cada uno de los extremos de la misma, como se muestra en la figura 53.

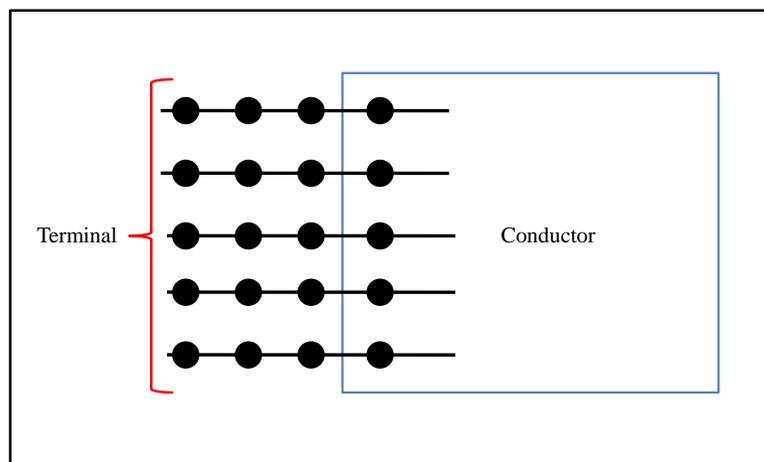


Figura 53. Se muestra un esquema de un conductor central al cual se le unen terminales en los extremos para generar un nanodispositivo cuasi unidimensional. Los puntos describen los puntos de la red que se utilizan para describir el sistema mediante el formalismo de amarre fuerte.

Si el Hamiltoniano de la parte central conductora se define por H_c , el Hamiltoniano

de las terminales aisladas por H_l y el Hamiltoniano de acoplamiento entre el conductor central y las terminales es H_{lc} , donde los únicos elementos diferentes de cero tienen la forma:

$$\langle \mu | H_{lc} | \nu \rangle = \langle \nu | H_{lc} | \mu \rangle = V \quad (131)$$

donde $|\mu\rangle$ representan estados en la terminal ideal en tanto que $|\nu\rangle$ representa estados de la sección central.

El hecho de tener una sección de conductor finita conectada a terminales infinitas, hace que se tenga un sistema abierto. Por el contrario de un sistema cerrado como la sección finita en donde se tienen fronteras reflexivas. La función de Green total del sistema puede ser dividida en submatrices como:

$$\begin{pmatrix} G_l & G_{lc} \\ G_{cd} & G_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - H_l & -H_{lc} \\ -H_{lc} & E - H_c \end{pmatrix}^{-1} \quad (132)$$

por lo tanto

$$\begin{pmatrix} E - H_l & -H_{lc} \\ -H_{lc} & E - H_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_l & G_{lc} \\ G_{cd} & G_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (133)$$

que conduce al sistema de ecs. matriciales acopladas

$$[E - H_l]G_{lc} - H_{lc}G_c = 0 \quad (134)$$

$$[E - H_c]G_c - H_{lc}G_{lc} = 1 \quad (135)$$

Si ahora despejando G_c de la ecuación (134) y sustituyendo G_{lc} de la ecuación (135) llegamos a

$$G_c = H_{cd}^{-1}[E - H_l] (H_{cd}^{-1}[E - H_c]G_c - H_{cd}^{-1}) \quad (136)$$

que al reagrupar términos conduce a

$$G_c - H_{cd}^{-1}[E - H_l]H_{cd}^{-1}[E - H_c]G_c = -H_{cd}^{-1}[E - H_l]H_{cd}^{-1} \quad (137)$$

que a su vez se puede reescribir como

$$G_c = ([E - H_c] - H_{cl}[E - H_l]^{-1}H_{cl})^{-1} \quad (138)$$

y equivalentemente se puede escribir como

$$G_c = [E - H_c - \Sigma]^{-1} \quad (139)$$

donde Σ representa el operador de una autoenergía que contiene la influencia de las terminales dado por

$$\Sigma = H_{cl}[E - H_l]^{-1}H_{cl} \quad (140)$$

Es posible evaluar los elementos de matriz de la autoenergía entre los estados del conductor

$$\langle \nu' | \Sigma | \nu \rangle = \langle \nu' | H_{cl}[E - H_l]^{-1}H_{cl} | \nu \rangle \quad (141)$$

Introduciendo la propiedad de cerradura de los estados $|\mu\rangle$ de las terminales tenemos:

$$\langle \nu' | \Sigma | \nu \rangle = \sum_{\mu\mu'} \langle \nu' | H_{cl} | \mu \rangle \langle \mu | [E - H_l]^{-1} | \mu' \rangle \langle \mu' | H_{cl} | \nu \rangle \quad (142)$$

el término central $\langle \mu | [E - H_l]^{-1} | \mu' \rangle$ es la función de Green de un segmento semi infinito, como es el caso de las terminales, dicha función esta dada por:

$$G(x, \mu; x, \mu') = - \sum_m \frac{2S \text{en } k_m x}{\hbar v_m} \chi_m(\mu) e^{ik_m x} \chi_m(\mu') \quad (143)$$

donde m es un modo de propagación particular, $\chi_m(\mu)$ es la función de onda en la dirección perpendicular a la propagación y k_m y la velocidad v_m están definidas como:

$$k_m = \frac{\sqrt{2m(E - \epsilon_{m,0})}}{\hbar} \quad (144)$$

$$v_m = \frac{\hbar k_m}{m} \quad (145)$$

De ésta manera, los elementos de matriz del operador de autoenergía están son

$$\langle \nu' | \Sigma | \nu \rangle = -|V|^2 \sum_m \frac{2 \text{Sen } k_m x}{\hbar v_m} \chi_m(\mu) e^{ik_m x} \chi_m(\mu') \quad (146)$$

y utilizando el hecho de que el formalismo de amarre fuerte genera una relación de dispersión cosenoidal, es posible escribir:

$$\hbar v_m = \frac{\partial E}{\partial k} = 2at \text{Sen}(ka) \quad (147)$$

De forma que los elementos de matriz del operador de autoenergía están dados por

$$\langle \nu' | \Sigma | \nu \rangle = -|V|^2 \sum_m \chi_m(\mu) e^{ik_m x} \chi_m(\mu') \quad (148)$$

este expresión corresponde al segundo término (autoenergías) en las ecs. 120 y 123 del apéndice C.