



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN  
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.**

**POSGRADO EN NANOCIENCIAS Y MATERIALES**

**Título de la Tesis** Transporte Electrónico en Puntos Cuánticos

Tesis que presenta

**Roberto Israel Nava Rodríguez**

Para obtener el grado de

**Maestro en Nanoencias y Materiales**

**Director (Codirectores) de la Tesis:**

Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco

Dr. Gabriel Gonzalez Contreras

San Luis Potosí, S.L.P., Mes de 2021



## Constancia de aprobación de la tesis

La tesis **Transporte electrónico en puntos cuánticos** presentada para obtener el Grado de de Maestro(a) en Nanociencias y Materiales fue elaborada por **Roberto Israel Nava Rodríguez** y aprobada el **dd de mm de aaaa** por los suscritos, designados por el Colegio de Profesores de la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

---

Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco  
(Director/Codirector de la tesis)

---

Dr. Gabriel Gonzalez Contreras  
(Director/Codirector de la tesis)

---

Dr. Florentino Lopez Uria  
(Asesor de la tesis)

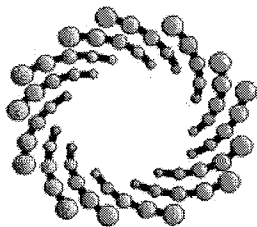


## Créditos Institucionales

Esta tesis fue elaborada en la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la codirección de los doctores Daniel Ignacio Salgado Blanco y Gabriel González Contreras.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología No. de registro 842765 y del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C.

Agradezco al Centro Nacional de Súpercomputo del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica los recursos computacionales para realizar esta investigación, bajo el número TKII-2018-DSB1.”



**IPICYT**

# Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

## Acta de Examen de Grado

El Secretario Académico del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., certifica que en el Acta 073 del Libro Primero de Actas de Exámenes de Grado del Programa de Maestría en Nanociencias y Materiales está asentado lo siguiente:

En la ciudad de San Luis Potosí a los 28 días del mes de octubre del año 2021, se reunió a las 16:00 horas en las instalaciones del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., el Jurado integrado por:

<b>Dr. Florentino López Urías</b>	<b>Presidente</b>	<b>IPICYT</b>
<b>Dr. Gabriel González Contreras</b>	<b>Secretario</b>	<b>UASLP</b>
<b>Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco</b>	<b>Sinodal</b>	<b>IPICYT</b>

a fin de efectuar el examen, que para obtener el Grado de:

**MAESTRO EN NANOCIENCIAS Y MATERIALES**

sustentó el C.

**Roberto Israel Nava Rodríguez**

sobre la Tesis intitulada:

*Transporte electrónico en puntos cuánticos*

que se desarrolló bajo la dirección de

**Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco**  
**Dr. Gabriel González Contreras (UASLP)**

El Jurado, después de deliberar, determinó

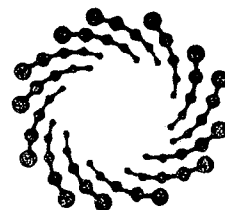
**APROBARLO**

Dándose por terminado el acto a las 17:35 horas, procediendo a la firma del Acta los integrantes del Jurado. Dando fe el Secretario Académico del Instituto.

A petición del interesado y para los fines que al mismo convengan, se extiende el presente documento en la ciudad de San Luis Potosí, S.L.P., México, a los 28 días del mes de octubre de 2021.

**Mtra. Ivonne Lizette Cuevas Vélez**  
Jefa del Departamento del Posgrado

**Dr. Marcial Bonilla Marín**  
Secretario Académico



**IPICYT**

SECRETARÍA ACADÉMICA  
INSTITUTO POTOSINO DE  
INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA  
Y TECNOLÓGICA. A.C.

# Contenido

<b>1. Bases Teóricas</b>	<b>1</b>
1.1. Puntos cuánticos	1
1.2. Transistor de un solo electrón (Single electron transistor)	5
1.3. Diagramas de estabilidad	9
<b>2. Efectos cuánticos en los transistores de un solo electrón</b>	<b>13</b>
2.1. Dark States	13
2.2. Efecto Aharonov – Bohm	14
<b>3. Modelo matemático</b>	<b>17</b>
3.1. Modelo teórico	17
3.2. Matriz Coulombiana	19
3.2.1. Interacción intradot	19
3.2.2. Interacciones interdot	19
3.3. Aproximaciones	20
3.4. Métodos de solución	21
3.4.1. Ecuaciones Maestras	22
Ecuación de Lindblad	26
Ecuación de Redfield de primer orden	27
Ecuación de von Neumann	28
Ecuación de Pauli	29
Ecuación de von Neumann de segundo orden	29
3.4.2. Cálculo de corriente y energía	31
3.4.3. Unidades	32
<b>4. Solución numérica de las ecuaciones maestras</b>	<b>33</b>
4.1. Python	33
4.1.1. Tipos básicos de datos	34
4.2. Qmeq	35
4.2.1. Definiciones	36
<b>5. Resultados</b>	<b>39</b>
5.1. Ejemplos modificados del Qmeq	39
5.1.1. Primer ejemplo: Un punto cuántico con consideración de espín	40
5.1.2. Segundo ejemplo: Doble punto cuántico	42

5.1.3.	Tercer ejemplo: Triple punto cuántico seriado con espín	46
5.2.	Sistemas de puntos cuánticos triangulares	47
5.2.1.	Artículo Physical Review B - Dark states in the magnetotransport through triple quantum dot	47
5.2.2.	Artículo Physical Review B - Dark states in spin-polarized transport through triple quantum dot molecules	49
5.3.	Elaboración de un sistema propio: sistema bow tie	51
<b>6.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>59</b>

# Capítulo 1

## Bases Teóricas

### 1.1. Puntos cuánticos

Para entender que es un punto cuántico, primero debemos realizar una clasificación de los materiales en términos de la conducción eléctrica, y esta clasificación está basada en la teoría de bandas. Cada material está compuesto por átomos, y cada átomo tiene una distribución particular de electrones regida por los números cuánticos orbitales determinados por la ecuación de Schrodinger. Al formarse un sólido, los estados cuánticos individuales dan lugar a la formación de bandas de energía, que son zonas con cierto valor energético que los electrones pueden ocupar como se muestra en la Figura 1.1, estas bandas resultan al modelar el cristal como un potencial periódico [1]. Según sea la distribución y ocupación de las bandas, podemos diferenciar entre tres tipos distintos de materiales [2].

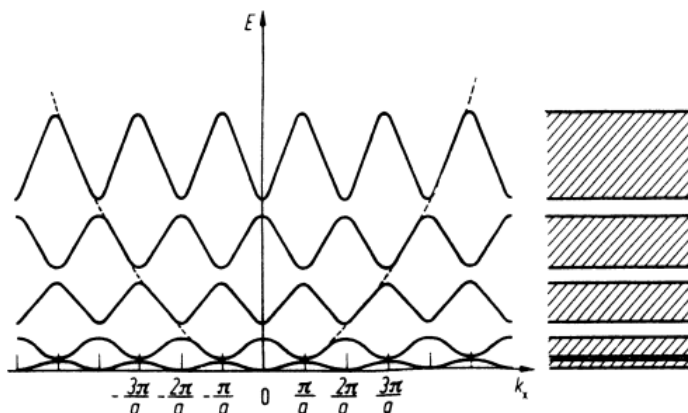


Figura 1.1: Ejemplo de la formación de bandas energéticas en un cristal al ser modelado como un potencial periódico [1].

El primer tipo de material son los conductores, aquí la banda de valencia, que es la última banda ocupada por electrones a 0 Kelvin está muy cerca o superpuesta con la banda de conducción, que es la siguiente banda con valor energético mayor a la banda de valencia; esto hace que al aplicarse un campo eléctrico los electrones puedan moverse

libremente a través del material.

El segundo tipo de material es el aislante, donde la separación entre la banda de valencia y la banda de conducción es muy grande; a esta separación entre las bandas se le conoce como banda prohibida ( $E_g$ ). Al ser tan grande esta separación ( $E_g > 4eV$ ) los electrones no pueden pasar a estados cuánticos más energéticos al aplicarse un voltaje, por lo que no hay flujo de corriente en ningún momento.

Un tipo de material intermedio entre los dos casos anteriores son los denominados semiconductores, aquí la separación entre la banda de valencia y de conducción ( $E_g 1eV$ ) puede ser superada por los electrones a cierto valor de voltaje para el cual el material comienza a conducir. Una representación esquemática de estos tres materiales se muestra en la Figura 1.2.

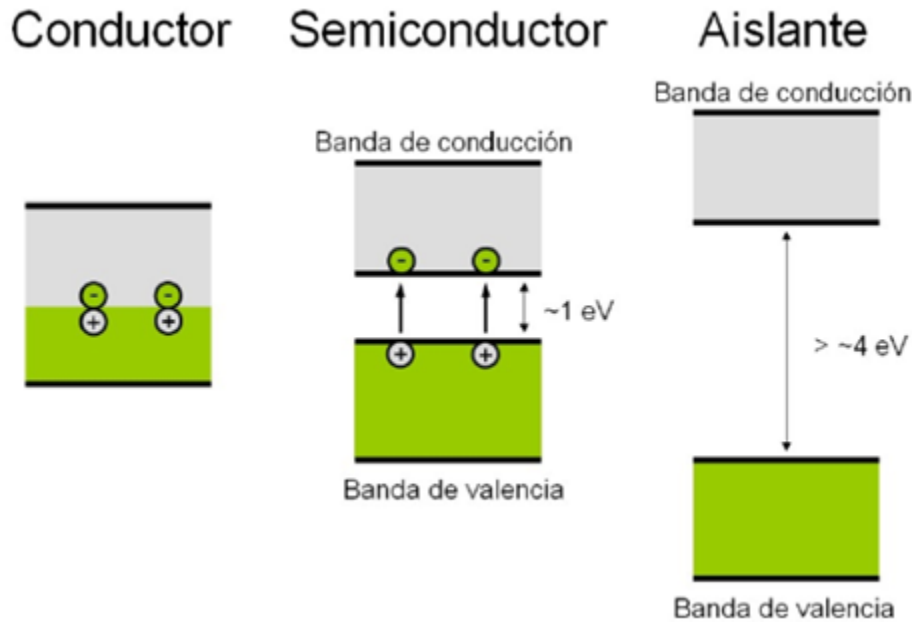


Figura 1.2: Diagrama de bandas para (de izquierda a derecha) conductores, semiconductores y aislantes

El proceso de conducción en los semiconductores comienza con los electrones en la banda de valencia, estos, al recibir la suficiente energía, que puede ser por temperatura, por un campo eléctrico o por un fotón incidente, superan la  $E_g$  y pasan a la banda de conducción dejando en su lugar su equivalente de carga positiva en la banda de valencia al que se denomina hueco. Estas dos partículas al tener carga eléctrica contraria quedan ligadas por fuerzas coulombianas, y a este par electrón-hueco se le llama excitón.

Para semiconductores en bulto se puede calcular la longitud del excitón al calcular su radio de Bohr con la ecuación:



$$a_B = \frac{\hbar^2 \kappa}{\alpha e^2} \quad (1.1)$$

Donde  $a_B$  es el radio de Bohr,  $\hbar$  es la constante de Planck  $h$  dividida entre  $2\pi$ ,  $\kappa$  es la constante dieléctrica,  $e$  es la carga del electrón,  $\alpha$  se define como  $\alpha = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ , de la cual  $m_e^*$  y  $m_h^*$  son las masas efectivas del electrón y del hueco [1].

Después de un corto tiempo de permanecer el electrón en la banda de conducción se produce la recombinación, que es el proceso en el que el electrón regresa a la banda de valencia liberando la energía adquirida inicialmente creando un fotón con energía igual al  $E_g$  [3].

Con lo anterior explicado, podemos continuar con la descripción de los puntos cuánticos, los cuales son, más comúnmente, cristales semiconductores, aunque también se han desarrollado puntos cuánticos metálicos de tamaño muy próximo o menor a la longitud del radio de Bohr del excitón ( $\sim 1$  a  $10nm$ ), provocando que los electrones que se encuentran dentro del punto cuántico queden confinados fuertemente en las tres dimensiones espaciales sin que se pueda formar el excitón; a causa de esto, los niveles de energía para el electrón confinado pasan de ser continuos a ser discretos, de manera similar a como ocurre en el clásico problema de la partícula en una caja. También se puede pensar en los puntos cuánticos como una estructura intermedia entre las bandas y los enlaces (Figura 1.3) debido a que, los estados energéticos en las bandas se encuentran tan próximos que pueden ser considerados como un continuo de energía y la separación de los estados en los enlaces es muy grande entre ellos, sin embargo, la distancia entre los estados formados dentro de un punto cuántico, tienen una distancia intermedia entre las ellos [4].

Es importante mencionar que el tamaño del cristal influye en la separación de los niveles energéticos dentro del punto cuántico, aun entre puntos de un mismo material, entre más pequeño sea el punto cuántico el  $E_g$  aumentara; esta característica es muy útil en algunas aplicaciones siendo una de las principales la óptica, permitiendo que puntos cuánticos de un mismo material semiconductor puedan emitir fotones de distinta longitud de onda con tan solo variar el tamaño del punto cuántico, lo que permite una amplia gama de aplicaciones y facilidades en la fabricación de dispositivos, pues ya no se requerirían emplear una mayor variedad de materiales como ocurre con los diodos emisores de luz.

De forma práctica, el tamaño de los puntos cuánticos es controlado al momento de la síntesis, la cual puede ser principalmente de dos formas, bottom-up y top down, la primera consiste en usar un precursor iónico o molecular para reaccionar juntos en una solución creando puntos cuánticos coloidales. En la segunda técnica trozos de cristales de 1 a 11 nanómetros son extraídos de un sustrato semiconductor con técnicas litográficas o electroquímicamente. Existen también métodos combinados como puede ser usar precursores moleculares que reaccionan en fase gaseosa para luego ser depositados como películas delgadas sobre un sustrato [5].

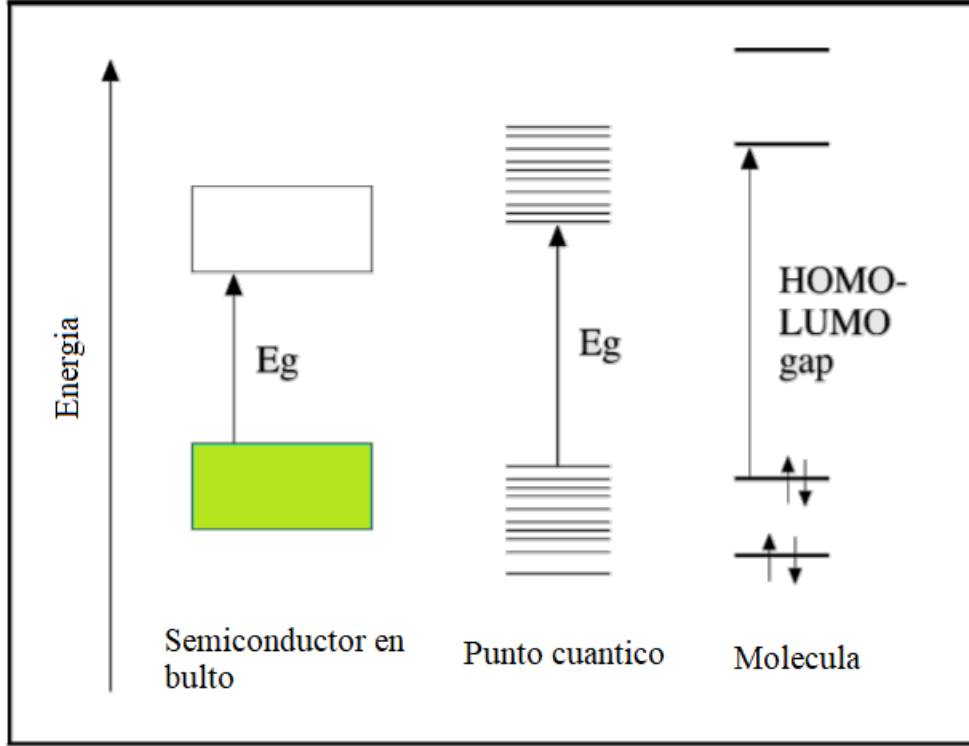


Figura 1.3: Ejemplificación de como la estructura de bandas de los puntos cuánticos puede ser vista como un punto intermedio entre las bandas y los enlaces moleculares HOMO-LUMO [6]

De forma analítica existen distintos modelos para calcular el  $E_g$  de los puntos cuánticos, siendo el más simple el modelo de Brus (ecuación (1.2)), el cual considera implícitamente una geometría esférica y que la masa efectiva de los portadores de carga y la constante dieléctrica del sólido son constantes como función del tamaño.

$$E_g^{QD} = E_g^{bulto} + \frac{\hbar^2}{8m_0r^2} \left( \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) - \frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \quad (1.2)$$

Donde  $E_g^{QD}$  y  $E_g^{bulto}$  son la brecha de energía del punto cuántico y del material en bulto,  $m_0$  es la masa del electrón,  $r$  es el radio del punto cuántico,  $m_e^*$  y  $m_h^*$  son las masas efectivas del electrón y del hueco,  $e$  es la carga del electrón, y  $\epsilon_0$  y  $\epsilon$  son la permitividad del vacío y la permitividad del material [3].

En la ecuación 1.2 el primer término representa la banda de energía del semiconductor en bulto, el segundo término es el similar al confinamiento en una caja para el excitón y el tercer término es la interacción coulombiana del electrón y el hueco.

Este modelo funciona bien para puntos cuánticos grandes, pero no es muy preciso para puntos cuánticos muy pequeños, por lo que existen otros modelos más complejos pero que logran describir mejor la banda de energía.

## 1.2. Transistor de un solo electrón (Single electron transistor)

La implementación de puntos cuánticos en la electrónica ha permitido el desarrollo de nuevos dispositivos que aprovechan los efectos cuánticos para mejorar su funcionamiento. Una de estas áreas de la electrónica son los dispositivos de un solo electrón, los cuales están basados en el efecto túnel para el transporte electrónico.

Dentro de esta área, uno de los dispositivos más prometedores es el transistor de un solo electrón (SET), el cual consiste, en su forma más básica, en un punto cuántico acoplado a tres terminales: la fuente, el drenado y el gate. En la Figura 1.4 se muestran dos ejemplos de cómo se vería este transistor en una configuración lateral y vertical de un punto cuántico en forma de disco [7].

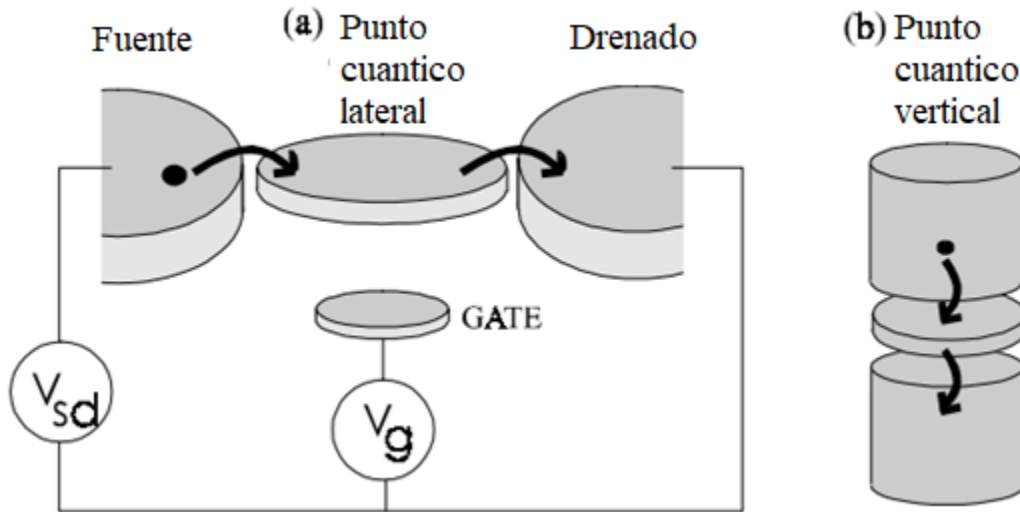


Figura 1.4: Esquema de funcionamiento de un SET para (a) un punto cuántico lateral y (b) un punto cuántico vertical. Las flechas indican la dirección de movimiento de los electrones [7].

El funcionamiento de los transistores de un solo electrón consiste en acoplar muy débilmente el punto cuántico a las terminales fuente y drenado por medio del efecto túnel, por lo que, al no haber contacto físico entre ellos, el punto cuántico funciona como una isla para los electrones con una auto capacitancia  $C_{\Sigma} = C_S + C_D + C_G$ , la cual es la cantidad de carga que debe ser agregada a un conductor aislado para aumentar su potencial eléctrico una unidad y representa la suma de las capacitancias de la fuente ( $C_S$ ), drenado ( $C_D$ ) y gate ( $C_G$ ).

Al hacer un acoplamiento débil, el electrón queda solo en la fuente, en el drenado o en la isla, disminuyendo lo más posible las fluctuaciones en el número de electrones ( $N$ ) debido al tunelaje. Si partimos del principio de incertidumbre de Heisenberg para la energía y el tiempo [8]

$$\Delta E \Delta t > h \quad (1.3)$$

Y se tiene el tiempo de descarga de la isla como:

$$\Delta t \simeq R_t C_\Sigma \quad (1.4)$$

La energía de incertidumbre es el nivel de energía que el sistema tendrá al agregar un electrón al sistema, la cual corresponde a la energía de carga de la isla

$$\Delta E = \frac{e^2}{C_\Sigma} \quad (1.5)$$

Sustituyendo los valores de energía y de tiempo se obtiene

$$\Delta E \Delta t = \frac{e^2}{C_\Sigma} (R_t C_\Sigma) > h \quad (1.6)$$

$$e^2 R_t > h \quad (1.7)$$

Donde  $\frac{h}{e^2}$  es la resistencia cuántica con un valor de  $25,813k\Omega$ . Esto nos da como resultado la condición para que se puedan observar efectos de carga con un solo electrón.

$$R_t > \frac{h}{e^2} \quad (1.8)$$

Además, mientras el voltaje entre las terminales fuente y drenado sea cero  $V_{sd} = 0$  (denominado voltaje bias) el sistema está en equilibrio energético por lo que no hay flujo de electrones, pero al ir aumentando el voltaje bias los electrones del electrodo fuente comienzan a ganar cada vez más energía hasta que alcanzan el valor de energía de Coulomb ( $E_c$ ), lo que provoca que un electron pueda pasar a la isla, generando flujo de corriente. Mientras este nivel de energía no sea alcanzado y la temperatura sea muy

baja, ya que se busca que la energía térmica no influya en el movimiento de los electrones, el flujo de corriente queda bloqueado. De aquí obtenemos una segunda condición para el funcionamiento del SET [7].

$$k_B T \ll \frac{e^2}{C_\Sigma} \quad (1.9)$$

Donde  $k_B$  es la constante de Boltzman y T es la temperatura en escala absoluta.

A este fenómeno del bloqueo de corriente se le conoce como bloqueo de Coulomb (Coulomb blockade) y siempre debe cumplir las ecuaciones (1.8) y (1.9) para poder ocurrir.

Adicionalmente, en el SET la terminal gate se acopla capacitivamente al punto cuántico, con la cual, al aplicar un voltaje, llamado voltaje gate ( $V_G$ ), se puede modular el nivel de energía de Coulomb del punto cuántico y así permitir o bloquear el flujo de electrones.

Esta descripción es la versión clásica del bloqueo de Coulomb y explica bien el fenómeno para islas metálicas donde la densidad de estados es continua. En el caso en el que el punto cuántico esté conformado por un cristal semiconductor, el modelo más simple que combina el bloqueo de Coulomb y el espectro de energía es el de interacción constante.

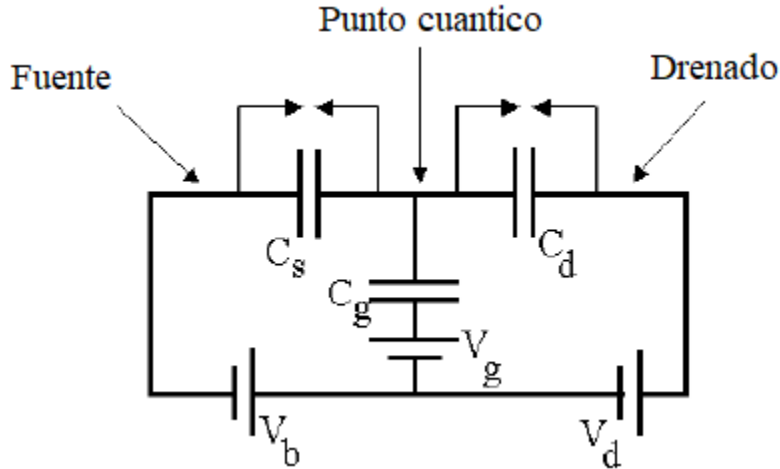


Figura 1.5: Circuito equivalente para el transistor de un solo electrón donde  $C_s$ ,  $C_d$  y  $C_g$  son las capacitancias fuente, drenado y gate respectivamente.  $V_s$ ,  $V_d$  y  $V_g$  corresponden igualmente a los voltajes en la fuente, drenado y gate.

En este modelo se asume que la cantidad total de energía en la isla  $E(N)$  está dada por la suma de las energías individuales de cada electrón  $\epsilon_i$  más la energía electrostática  $U(N)$ .

$$E(N) = \sum_{i=1}^N \epsilon_i + U(N) \quad (1.10)$$

La energía electrostática se define como:

$$U(N) = \int_{Q_i}^{Q_f} V dq \quad (1.11)$$

Donde  $Q_i$  y  $Q_f$  son la carga inicial y final a considerar respectivamente y  $V$  es el voltaje en la isla. De la figura 1.5 podemos encontrar el valor del voltaje de la isla por medio de las leyes de Kirchoff, de las cuales tenemos que la carga total  $Q$  es:

$$Q = C_\Sigma V_i - C_S V_S - C_D V_D - C_G V_G \quad (1.12)$$

Despejando  $V_i$

$$V_i = \frac{Q}{C_\Sigma} + \frac{C_S V_S + C_D V_D + C_G V_G}{C_\Sigma} \quad (1.13)$$

Sustituyendo en la ecuación 1.11 para un valor de carga inicial de 0 y final de  $-eN$

$$U(N) = \int_0^{-eN} \left( \frac{Q}{C_\Sigma} + \frac{C_S V_S + C_D V_D + C_G V_G}{C_\Sigma} \right) dq = \frac{(eN)^2}{2C_\Sigma} - \frac{eN(C_S V_S + C_D V_D + C_G V_G)}{C_\Sigma} \quad (1.14)$$

Finalmente, el potencial químico  $\mu$  se define como la cantidad de energía necesaria para agregar el  $N$ -ésimo electrón a la isla, por lo que  $\mu_N$  está dado por:

$$\mu_N = E(N) - E(N-1) = \Delta_N + \frac{e^2}{C_\Sigma} \left( N - \frac{1}{2} \right) - \frac{e(C_S V_S + C_D V_D + C_G V_G)}{C_\Sigma} \quad (1.15)$$

Con  $\epsilon_N - \epsilon_{(N-1)} = \Delta_N$ . Ahora se puede ver el circuito como se muestra en la figura 1.6, donde en el inciso a) el potencial químico del punto cuántico al aumentar el número de electrones dentro de la isla a  $N+1$ , supera el valor del potencial de la terminal fuente  $\mu_s$  impidiendo el salto del electrón dentro, posteriormente en b) el voltaje gate se ha

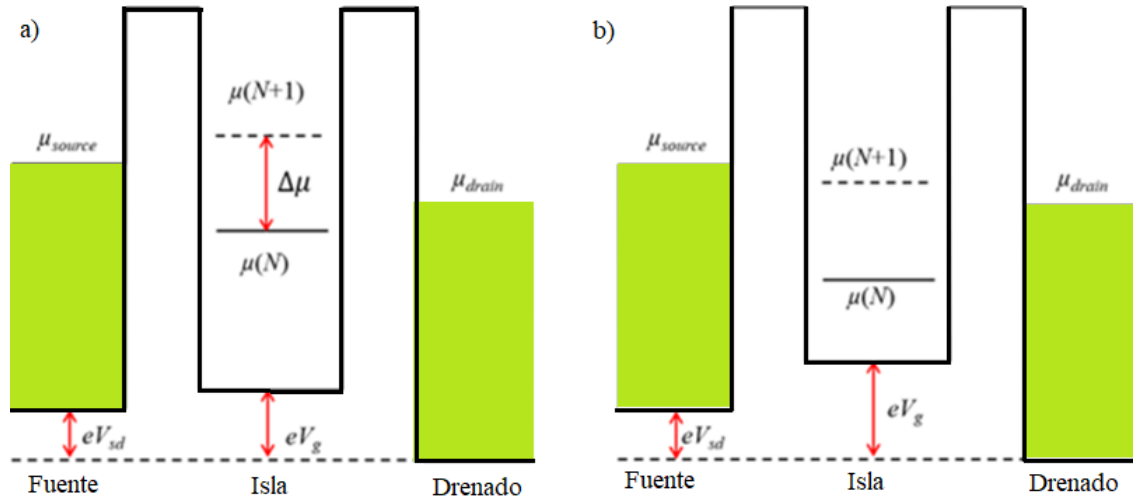


Figura 1.6: Diagrama de energía para el punto cuántico semiconductor donde se muestran las dos barreras túnel de la fuente hacia el punto y del punto hacia el drenado. En a) se muestra el caso donde el aumento energético al agregar  $\mu_{N+1}$  supera el potencial de la fuente, por lo que no es posible que el electrón salte dentro de la isla. En b) el voltaje gate se modula para adecuar el potencial de  $\mu_{N-1}$  para que en  $\mu_N$  el potencial de la fuente sea un poco mayor y el del drenado un poco menor, permitiendo el paso de corriente.

cambiado para modular el potencial de la isla dejándolo con un valor  $\mu_s \simeq \mu_N \simeq \mu_D$  haciendo posible el flujo de electrones.

Uno de los aspectos a tener en cuenta es que la capacitancia del punto cuántico depende de su geometría, por lo que es importante dejarlo claro al realizar cálculos en un sistema SET.

### 1.3. Diagramas de estabilidad

Los diagramas de estabilidad son la representación gráfica de las mediciones de la corriente al variar los valores de el voltaje bias y el voltaje gate. Por la forma rómbica característica de estas gráficas son también conocidas como diamantes de Coulomb (figura 1.7), donde el número de electrones dentro de cada rombo es fijo, por lo tanto, no hay corriente debido al bloqueo de Coulomb.

La forma de diamantes se obtiene al asumir que el voltaje bias se aplica simétricamente en las terminales fuente y drenado, con lo que se pueden obtener dos nuevas ecuaciones para los potenciales químicos de la fuente y del drenado [9].

$$\mu_S = \mu_0 + \frac{eV_{bias}}{2} \quad \mu_D = \mu_0 - \frac{eV_{bias}}{2} \quad (1.16)$$

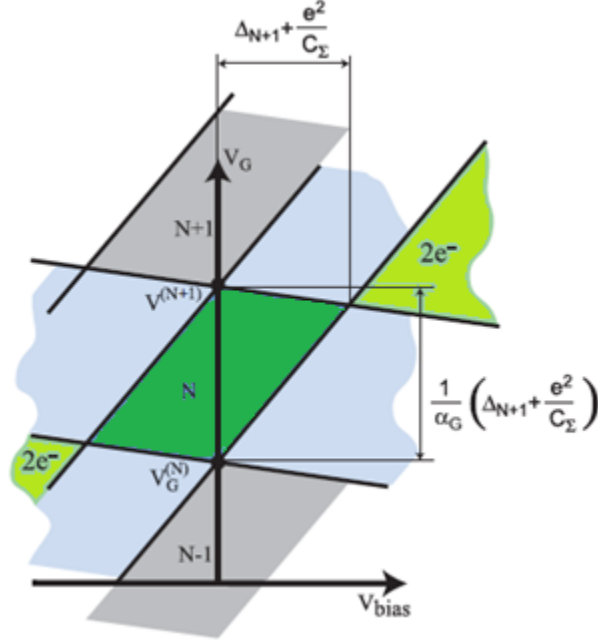


Figura 1.7: Gráfica de los diamantes de Coulomb en donde en las zonas de color verde oscuro y gris existe bloqueo de Coulomb y en el color azul claro la corriente fluye a través del SET [9].

Donde  $\mu_0$  es el potencial en la fuente y el drenado con un voltaje bias de cero. De aquí se pueden obtener cuatro desigualdades, dos para la condición de  $V_{bias} > 0$  siendo

$$\mu_N < \mu_0 - \frac{eV_{bias}}{2} \quad \mu_{N+1} > \mu_0 + \frac{eV_{bias}}{2} \quad (1.17)$$

$$(1.18)$$

Y para  $V_{bias} < 0$

$$\mu_N < \mu_0 + \frac{eV_{bias}}{2} \quad \mu_{N+1} > \mu_0 - \frac{eV_{bias}}{2} \quad (1.19)$$

$$(1.20)$$

Estas desigualdades combinadas con la ecuación 1.15 resolviendo para el voltaje gate en función del voltaje bias quedan:

$$V_G^N = \frac{1}{\alpha_G e} \left( \Delta_N + \frac{e^2}{C_\Sigma} \left( N - \frac{1}{2} \right) - e \left( \frac{C_S V_S + C_D V_D}{C_\Sigma} \right) - \left( \mu_0 - \frac{eV_{bias}}{2} \right) \right) \quad (1.21)$$

$$V_G^N = \frac{1}{\alpha_G e} \left( \Delta_N + \frac{e^2}{C_\Sigma} \left( N - \frac{1}{2} \right) - e \left( \frac{C_S V_S + C_D V_D}{C_\Sigma} \right) - \left( \mu_0 + \frac{eV_{bias}}{2} \right) \right) \quad (1.22)$$



$$V_G^{N+1} = \frac{1}{\alpha_G e} \left( \Delta_{N+1} + \frac{e^2}{C_\Sigma} \left( N - \frac{1}{2} \right) - e \left( \frac{C_S V_S + C_D V_D}{C_\Sigma} \right) - \left( \mu_0 + \frac{e V_{bias}}{2} \right) \right) \quad (1.23)$$

$$V_G^{N+1} = \frac{1}{\alpha_G e} \left( \Delta_{N+1} + \frac{e^2}{C_\Sigma} \left( N - \frac{1}{2} \right) - e \left( \frac{C_S V_S + C_D V_D}{C_\Sigma} \right) - \left( \mu_0 - \frac{e V_{bias}}{2} \right) \right) \quad (1.24)$$

Donde

$$\alpha_G = \frac{-C_G}{C_\Sigma} \quad (1.25)$$

Estas cuatro ecuaciones son las denominadas ecuaciones de borde y describen la forma característica de diamante que se puede observar en la figura 1.7 donde se representa en color verde oscuro y gris las zonas de bloqueo de corriente y en azul claro dónde los electrones pueden pasar a través del circuito.



# Capítulo 2

## Efectos cuánticos en los transistores de un solo electrón

Hasta ahora se ha considerado el transistor de un solo electrón compuesto por un solo punto cuántico, sin embargo, se puede diseñar el SET con distintos arreglos de puntos cuánticos, en los que se puede variar el número de puntos y la geometría de los arreglos con el fin de aprovechar los distintos efectos que estos sistemas presentan. Dentro de todos los tipos de fenómenos cuánticos que pueden presentarse en los diferentes arreglos de puntos en los SET, estamos especialmente interesados en dos de ellos, los denominados dark states y el efecto de Aharonov-Bohm.

### 2.1. Dark States

Este fenómeno se presenta en algunas configuraciones particulares de puntos cuánticos, siendo uno de los más estudiados el conformado por tres puntos con una geometría triangular conectados de forma simétrica o asimétrica (figura 2.1) obteniendo en ambos casos el fenómeno buscado [10].

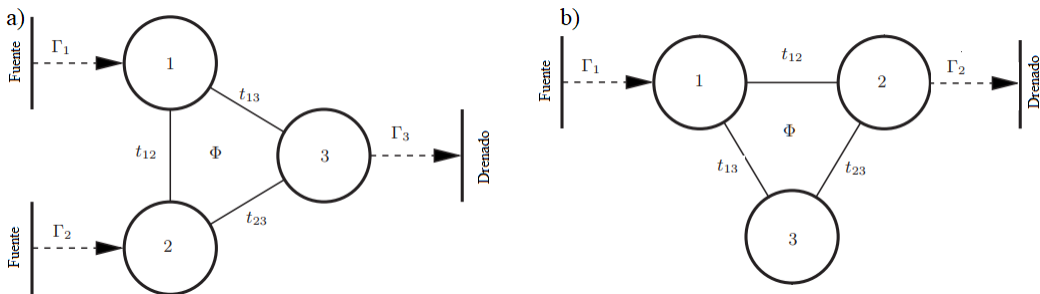


Figura 2.1: Diagramas de arreglos de tres puntos cuánticos conectados en forma triangular de forma a) simétrica y b) asimétrica con respecto a la fuente y el drenado [11]

Los dark states se forman cuando la función de onda de un electrón en superposición coherente interfiere destructivamente en uno de los puntos del arreglo desacoplandolo

del sistema, lo que causa la interrupción del flujo de corriente [12].

Otros fenómenos coherentes en física han podido ser más fácilmente estudiados y entendidos gracias a la investigación de los dark states, como la transparencia electromagnética inducida (EIT), el láser sin inversión, la propagación lenta de la luz en un medio, el almacenamiento óptico de información, coherent population trapping (CPT), resistencia diferencial negativa, rectificación de la corriente, mejoramiento del ruido de disparo y otros más [13], por lo que continuar con su estudio es importante para el desarrollo de nuevas aplicaciones en distintas áreas científicas y tecnológicas.

## 2.2. Efecto Aharonov – Bohm

Otro efecto en el que estamos interesados es el denominado efecto Aharonov-Bohm, el cual es un efecto puramente cuántico, ya que depende de los potenciales electromagnéticos  $V_e$  y el potencial vectorial  $A_e$  en el hamiltoniano y consecuentemente en la ecuación de Schrödinger [14].

El efecto Aharonov-Bohm describe el desfazamiento en la trayectoria de dos haces de electrones que encierran un campo magnético  $\Phi$ , incluso si la trayectoria no tiene contacto con el flujo magnético [16], como se muestra en la figura 2.2.

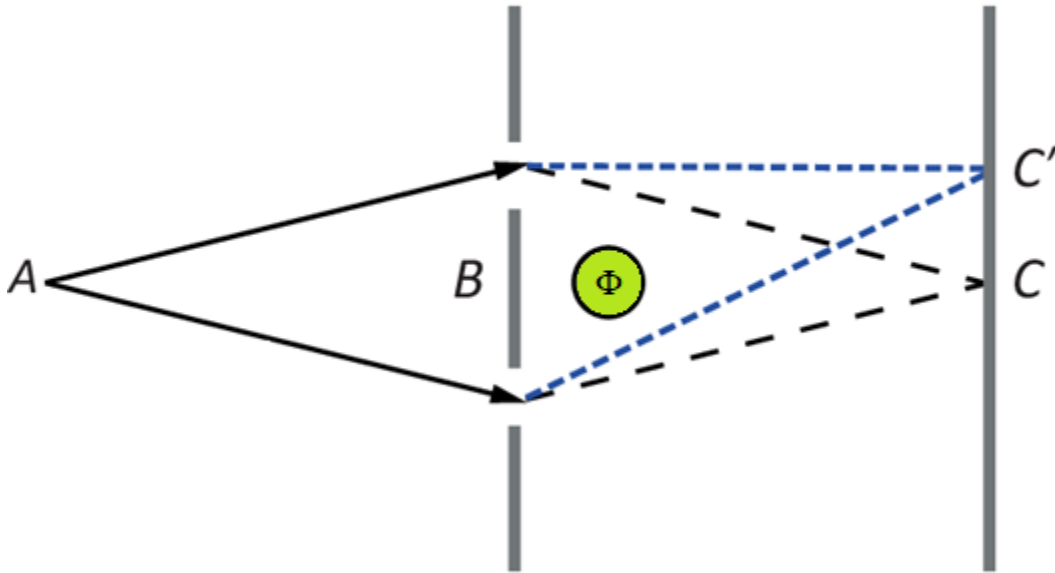


Figura 2.2: Ejemplo de efecto Aharonov-Bohm en el experimento de doble rendija. La línea punteada negra muestra el camino que seguirían dos haces de electrones sin interacción de un campo magnético, y la línea punteada azul muestra el desfase en el camino a causa del campo magnético  $\Phi$  confinado en la región verde, afectando el trayecto sin tener contacto con la trayectoria de los haces [15]

Si el campo magnético está confinado en una región fuera de las trayectorias de los haces de electrones, partiendo del caso general, el hamiltoniano se define como [17]

$$H = T + V \quad (2.1)$$

Que representa la suma de las energías cinética T y potencial V. De la ecuación 2.1 la energía cinética está dada por:

$$T = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (2.2)$$

Donde

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad (2.3)$$

Y sustituyendo el momento por la energía cinética correspondiente a los problemas electromagnéticos, lo que sería:

$$mv = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad (2.4)$$

Donde  $\vec{p}$  es el momento canónico y  $\vec{A}$  es el vector potencial. Así mismo de la ecuación 2.1 sustituimos V por  $e\phi(\vec{x})$  que representa la energía potencial causada por un potencial electrostático. Sustituyendo todo lo anterior tenemos [18]

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + \phi(\vec{x}) \quad (2.5)$$

Al introducir la ecuación 2.5 en la ecuación de Schrödinger y resolverla, se obtiene la función de onda independiente del tiempo

$$\phi(x) = \phi_0(x) e^{\frac{-iS(x)}{\hbar}} \quad (2.6)$$

Donde  $\phi_0$  representa la función de onda sin el campo magnético confinado y S se refiere a

$$S(x) = \frac{-e}{c} \int A(x') dx' \quad (2.7)$$

La trayectoria de integración sigue al haz de electrones. Así, para determinar el desfase de la trayectoria del haz se toma en consideración que si el flujo magnético  $\Phi$  en el área delimitada no se desvanece, el potencial vectorial tampoco se desvanece en las zonas libres del campo magnético, ya que  $\int A(x') dx'$  siguiendo los dos caminos de los haces de electrones, los dos comienzan y terminan en el mismo punto, esto hace una trayectoria cerrada, lo que da como resultado de esta integral igual a  $\Phi$ , por lo tanto, el desfase del haz puede ser calculado como

$$\Delta\phi = \frac{|S_2 - S_1|}{\hbar} = \frac{e}{\hbar c} \Phi \quad (2.8)$$

Con  $S_2$  y  $S_1$  como las integrales de cada uno de los caminos. Este desfase entre los haces es invariante gauge, dependiendo solamente del flujo magnético en la región confinada. Esto hace que el patrón de interferencia sea periódico con un periodo igual a la unidad de London

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} \quad (2.9)$$

# Capítulo 3

## Modelo matemático

### 3.1. Modelo teórico

Para observar los efectos cuánticos detallados en el capítulo anterior, es necesario plantear las ecuaciones del arreglo de puntos cuánticos de interés, esto consiste en plantear el Hamiltoniano [19], el cual es un operador cuántico asociado a la energía del sistema, en este caso el sistema está conformado por un número de puntos cuánticos acoplados a guías metálicas y uniones túnel, por lo tanto, tenemos:

$$H = H_{Guías} + H_{Tunelaje} + H_{Puntos} \quad (3.1)$$

Donde  $H_{Guías}$  describe a los electrones en las guías,  $H_{Puntos}$  a los electrones en los puntos cuánticos, y  $H_{Tunelaje}$  es del tunelaje entre las guías y los puntos. Del hamiltoniano general podemos describir cada uno de sus componentes, de ellos, el primero es el correspondiente a las guías, en las cuales no hay interacción electrónica, de este modo se tiene:

$$H_{Guías} = \sum_{\alpha\kappa} \varepsilon_{\alpha\kappa} c_{\alpha\kappa}^\dagger c_{\alpha\kappa} \quad (3.2)$$

Donde  $\varepsilon_{\alpha\kappa}$  es la energía de una sola partícula  $c_{\alpha\kappa}^\dagger$  ( $c_{\alpha\kappa}$ ) crea (destruye) un electrón en la guía  $\alpha$  y  $\kappa$  representa un numero cuántico referente a la continuidad de la energía.

Si consideramos que dentro de los puntos cuánticos puede haber mas de un electrón, entonces debemos tomar en cuenta la interacción coulombiana entre ellos, por lo que el hamiltoniano de los puntos se escribe como:

$$H_{Puntos} = H_{Single} + H_{Coulomb} \quad (3.3)$$

Explicitamente, el primer término se define como:

$$H_{Single} = \sum_i \varepsilon_i d_i^\dagger d_i + \sum_{i \neq j} \Omega_{ij} d_i^\dagger d_j \quad (3.4)$$

Donde  $\varepsilon_i$  es la energía del orbital  $i$ ,  $d_i^\dagger(d_i)$  crea (destruye) un electrón en el orbital  $i$  y  $\Omega_{ij}$  es la hibridación entre los orbitales.

El segundo término del hamiltoniano que describe los puntos se describe como:

$$H_{Coulomb} = \sum_{mnl} U_{mnl} d_m^\dagger d_n^\dagger d_l d_m \quad (3.5)$$

con  $m < n$ .

Donde  $U_{mnl}$  es la interacción coulombiana, de la cual se ahondara un poco más en la siguiente sección, y  $d_m^\dagger d_n^\dagger d_l d_m$  describen, como en los casos anteriores, la creación o aniquilación de un electrón en los posibles estados  $mnl$ .

Finalmente, el componente de la energía del tunelaje es:

$$H_{Tunelaje} = \sum_{\alpha\kappa i} t_{\alpha\kappa,i} d_i^\dagger c_{\alpha\kappa} + H.c \quad (3.6)$$

Donde  $t_{\alpha\kappa,i}$  es la amplitud de tunelaje entre las guías y los puntos y H.c es el hermitiano conjugado del primer término.

Una escala de energía importante en los cálculos es la tasa de tunelamiento definida como:

$$\Gamma_{\alpha\kappa,i}(E) = 2\pi \sum_{\kappa} |t_{\alpha\kappa,i}|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha\kappa}) \quad (3.7)$$

Que refiere a el ritmo con el que los electrones pueden entrar y salir de la fuente hacia el arreglo de puntos cuánticos y del arreglo hacia el drenado. Donde  $\delta$  representa la función delta de Dirac



## 3.2. Matriz Coulombiana

La matriz coulombiana está compuesta por todos los valores de interacción electrostática entre los estados del sistema, los cuales, para sistemas con mas de un electrón confinado toma mucha importancia, en general los elementos de la matriz coulombiana se definen como:

$$U_{mnlk} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \frac{\varphi_m^*(r)\varphi_n^*(r')\varphi_k(r')\varphi_l(r)}{|r-r'|} \quad (3.8)$$

Donde  $\varphi_m^*(r)$  es la parte espacial de los estado de una sola partícula m,  $\epsilon_r$  y  $\epsilon_0$  es la permitividad relativa y absoluta del vacío. Dentro de las posibles combinaciones, no se tomarán en cuenta las que tengan los estados m y l ó k y n pertenecientes a diferentes puntos cuánticos ya que sus valores son muy pequeños, igualmente solo se considera la interacción entre primeros vecinos, por lo tanto, las combinaciones restantes pueden clasificarse en interacciones interdot e intradot.

### 3.2.1. Interacción intradot

Las interacciones intradot son las que tienen lugar entre los estados energéticos dentro de los puntos cuánticos, esto se da cuando el espín electrónico es considerado en el sistema, estas interacciones obedecen a las combinaciones de índices del tipo:

$$U_{mnmn} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0\sigma} = U \quad (3.9)$$

Donde  $\sigma = \sqrt{\langle(r-\langle r \rangle)^2\rangle}$  es la desviación estándar de la extensión espacial de las funciones de onda en el punto cuántico. De igual forma las combinaciones del tipo  $U_{mnmn}$  para  $m \neq n$ , las cuales son términos de intercambio si los estados tienen el mismo espín y de scattering si el espín es diferente. Según [20] este valor puede ser aproximado con distintas funciones de onda de prueba como:

$$U_{mnmn} \approx U_{ex} \quad U_{ex} = \frac{U}{5} \quad (3.10)$$

### 3.2.2. Interacciones interdot

Estas interacciones se dan entre los estados de primeros vecinos, los cuales pueden considerar o no el espín electrónico, los cuales se pueden obtener mediante:

$$U_{mnmn} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0d} = U_n \quad (3.11)$$

Donde  $d$  es la distancia entre los centros de los puntos cuánticos. Además de estos, también hay términos con combinación de índices diferentes, los cuales según [21] se encuentran mediante la expansión de Taylor de  $\frac{1}{|r - r'|}$  se obtienen:

$$U_{lnml} \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{S_{nm}d}{d^3} = U_{dc} \quad (3.12)$$

y

$$U_{mnlk} \approx \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{2S_{ml}S_{nk}}{d^3} = U_{sc} \quad (3.13)$$

Con

$$S_{nm} = \int d^3r \varphi_n^*(r) r \varphi_m(r) \quad (3.14)$$

Donde  $U_{dc}$  correspondería a los términos asociados a la interacción carga-dipolo, y  $U_{sc}$  a la interacción de scattering dipolo-dipolo

### 3.3. Aproximaciones

Con el fin de facilitar la solución numérica de las ecuaciones maestras que describen a un sistema de puntos cuánticos acoplados, el paquete Qmeq considera las siguientes dos aproximaciones principales:

1. Las guías del sistema están termalizadas según la función de ocupación de Fermi-Dirac  $f_\alpha(E) = [e^{(E-\mu_\alpha)/T_\alpha} + 1]^{-1}$ . Donde  $T_\alpha$  corresponde a la temperatura y  $\mu_\alpha$  al potencial químico.
2. Se usa el límite de ancho de banda prohibida para las guías, por lo que se considera que tienen una densidad de estados constante  $\nu(E) \approx \nu(E_F) = \nu_F$ . Donde el subíndice F corresponde al nivel de Fermi, por lo tanto la suma de los  $k$  estados sería  $\sum_k \rightarrow \nu_F \int_{-D}^{+D} dE$ , donde D es el ancho de banda de las guías. Adicionalmente se considera que las amplitudes de tunelaje son independientes de la energía (o independientes de  $k$ ), por lo que la tasa de tunelaje se expresa como  $\Gamma_{\alpha i} = 2\pi\nu_F |t_{\alpha i}|^2$ .

### 3.4. Métodos de solución

Existen distintos modos de solucionar los sistemas de puntos cuánticos para el transporte electrónico, los cuales son muy variados, siendo algunos de los más usados la aproximación diagramática en tiempo real de corriente inducida [22], funciones de Green en no equilibrio [23], método Monte Carlo [24], funciones de correlación de densidad y carga de Heisenberg [25], teoría de grupos de renormalización [26], ecuaciones maestras [27][28], entre otros.

Para resolver el sistema de interés, el Qmeq construye el hamiltoniano de los puntos cuánticos en base de Fock y lo diagonaliza exactamente para obtener los eigenestados  $|a\rangle$  para múltiples partículas.

$$H_{puntos} = \sum_a E_a |a\rangle \langle a| \quad (3.15)$$

El hamiltoniano correspondiente al tunelaje expresado en esta eigenbase queda como:

$$H_{tunelaje} = \sum_{ab,\alpha k} T_{ba,\alpha} |b\rangle \langle a| c_{\alpha k} + H.c. \quad (3.16)$$

Con:

$$T_{ba,\alpha} = \sum_i t_{\alpha i} \langle b| d_i^\dagger |a\rangle \quad (3.17)$$

Donde  $T_{ba,\alpha}$  son las amplitudes de tunelaje para múltiples partículas para los estados  $a$  y  $b$  de los puntos cuánticos y  $\alpha k$  para los estados de las guías.

Posteriormente, empleando ecuaciones maestras el Qmeq obtiene la matriz de densidad reducida, la cual se define como:

$$\Phi_{bb'}^{[0]} = \sum_g \langle bg| \rho |b'g\rangle \quad (3.18)$$

Siendo  $\rho$  el operador de la matriz de densidad completa,  $g$  son los eigenestados de las guías para múltiples partículas. Por lo tanto la base del sistema combinado de los puntos cuánticos y de las guías está dada por el producto de los estados  $|bg\rangle = |b\rangle \otimes |g\rangle$ , esta parte se profundizará un poco más en la sección siguiente.

Para las ecuaciones maestras de primer orden se resuelven las ecuaciones para el estado estacionario:

$$\mathcal{L}\Phi^{[0]} = 0 \tag{3.19}$$

$$Tr[\Phi^{[0]}] = 1 \tag{3.20}$$

De donde  $\mathcal{L}$  es el superoperador Liouvilliano y  $Tr$  es la traza de la matriz. Para la ecuación de segundo orden de von Neumann se describe su solución en la sección siguiente.

### 3.4.1. Ecuaciones Maestras

Las ecuaciones maestras sirven para describir sistemas muy pequeños que requieren mecánica cuántica y que estén acoplados al mundo exterior, el cual puede ser descrito clásicamente; hay distintas ecuaciones maestras que son derivadas al tratar el acople del sistema y el medio de manera perturbativa desde una perspectiva probabilista, pero dependerá de las consideraciones iniciales que se hagan para que alguna ecuación sea válida para cierto sistema particular o no. La teoría de perturbaciones trata de resolver de manera aproximada problemas matemáticos al incluir pequeños parámetros adimensionales que vuelvan mas sencillo el problema [29].

En este trabajo utilizaremos cinco ecuaciones maestras para tratar los sistemas deseados. Utilizaremos las derivaciones y notación de la referencia [19].

Para comenzar, partimos de la ecuación de von Neumann, que describe la evolución de la matriz de densidad  $\rho$ .

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho = [H, \rho] = \mathcal{L}[\rho] \tag{3.21}$$

La matriz de densidad es un operador delimitado que debe cumplir dos condiciones:

1. La matriz de densidad  $\rho$  debe tener una traza igual a uno  $Tr[\rho] = 1$ .
2. Debe ser una matriz positiva  $\rho > 0$ .

En esta matriz los elementos pertenecientes a la diagonal son llamados población y los elementos fuera de la diagonal son llamados coherencias [30].

Para la derivación de las ecuaciones maestras se emplea el método jerárquico, el cual consiste en organizar los datos en una estructura tipo árbol o alguna del tipo multinivel [31], en este caso se clasifican los elementos de la matriz de densidad con respecto a la cantidad de excitaciones electrón-hueco en las guías, por lo que los elementos de la matriz de densidad son definidos y clasificados de la forma:

$$\rho_{ag,bg'}^{[n]} = \langle ag | \rho | bg' \rangle \quad (3.22)$$

Donde  $|bg\rangle = |b\rangle \otimes |g\rangle$ , del cual  $|b\rangle$  representa los eigenestados del hamiltoniano de los puntos cuánticos  $H_{puntos}$ (3.3) y  $|g\rangle$  los eigenestados del hamiltoniano de las guías  $H_{Guías}$ (3.2). En la ecuación (3.22)  $n$  indica la cantidad de electrones o huecos necesarios para transformar el eigenestado  $|g\rangle$  en  $|g'\rangle$ . En la figura 3.1 se puede observar el modo en que se clasifican los elementos de la matriz de densidad.

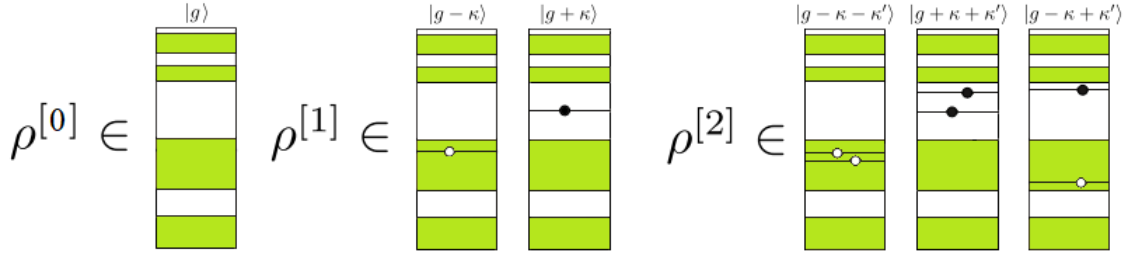


Figura 3.1: Representación gráfica de la clasificación de los elementos de la matriz con respecto a la cantidad de electrones/huecos que estén presentes.

De todos los elementos de la matriz de densidad, siguiendo la deducción de [19] tomamos:

$$\rho_{bg,b'g}^{[0]} = \langle bg | \rho | b'g \rangle \quad \rho_{dg-\kappa-\kappa',bg}^{[2]} = \langle dg - \kappa - \kappa' | \rho | bg \rangle \quad (3.23)$$

$$\rho_{bg-\kappa,ag}^{[1]} = \langle bg - \kappa | \rho | ag \rangle \quad \rho_{bg-\kappa+\kappa',b'g}^{[2]} = \langle bg - \kappa + \kappa' | \rho | b'g \rangle \quad (3.24)$$

Para facilitar la notación, se usará el índice compuesto  $\kappa \equiv k, \alpha$  de la ecuación 3.2, por lo tanto, de las ecuaciones anteriores, los estados quedan definidos por los productos tensoriales de la forma:

$$|bg + \kappa\rangle = |b\rangle \otimes c_{\kappa}^{\dagger} |g\rangle \quad |dg - \kappa - \kappa'\rangle = |d\rangle \otimes c_{\kappa'} c_{\kappa} |g\rangle \quad (3.25)$$

$$|bg - \kappa\rangle = |b\rangle \otimes c_{\kappa} |g\rangle \quad |bg - \kappa + \kappa'\rangle = |b\rangle \otimes c_{\kappa'}^{\dagger} c_{\kappa} |g\rangle \quad (3.26)$$

Para nuestro propósito, todos los elementos de la matriz de densidad donde  $n > 2$  no serán tomados en cuenta, por lo tanto, de la ecuación 3.21 tenemos para los estados mostrados:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho_{bg,b'g}^{[0]} = (E_b - E_{b'}) \rho_{bg,b'g}^{[0]} + T_{ba_1, \kappa_1} \rho_{a_1 g + \kappa_1, b'g}^{[1]} (-1)^{N_{a_1}} + T_{bc_1, \kappa_1} \rho_{c_1 g - \kappa_1, b'g}^{[1]} (-1)^{N_b} \\ - \rho_{bg, c_1 g - \kappa_1}^{[1]} (-1)^{N_{b'}} T_{c_1 b', \kappa_1} - \rho_{bg, a_1 g + \kappa_1}^{[1]} (-1)^{N_{a_1}} T_{a_1 b', \kappa_1} \quad (3.27)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho_{cg-\kappa,bg}^{[1]} = (E_c - \varepsilon_\kappa - E_b) \rho_{cg-\kappa,bg}^{[1]} + T_{cb_1,\kappa_1} \rho_{b_1g-\kappa+\kappa_1,bg}^{[2]} (-1)^{N_{b_1}} + T_{cd_1,\kappa_1} \rho_{d_1g-\kappa-\kappa_1,bg}^{[2]} (-1)^{N_c} - \rho_{cg-\kappa,c_1g-\kappa_1}^{[2]} (-1)^{N_b} T_{c_1b,\kappa_1} - \rho_{cg-\kappa,a_1g+\kappa_1}^{[2]} (-1)^{N_{a_1}} T_{a_1b,\kappa_1} \quad (3.28)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho_{bg-\kappa+\kappa',b'g}^{[2]} \approx (E_b - \varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa'} - E_{b'}) \rho_{bg-\kappa+\kappa',b'g}^{[2]} + T_{ba_1,\kappa} \rho_{a_1g-\kappa+\kappa'+\kappa,b'g}^{[1]} (-1)^{N_{a_1}} + T_{bc_1,\kappa'} \rho_{c_1g-\kappa+\kappa'-\kappa',b'g}^{[1]} (-1)^{N_b} - \rho_{bg-\kappa+\kappa',c_1g-\kappa}^{[1]} (-1)^{N_{b'}} T_{c_1b',\kappa} - \rho_{bg-\kappa+\kappa',a_1g+\kappa'}^{[1]} (-1)^{N_{a_1}} T_{a_1b',\kappa'} \quad (3.29)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho_{dg-\kappa-\kappa',bg}^{[2]} \approx (E_d - \varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa'} - E_b) \rho_{dg-\kappa-\kappa',bg}^{[2]} + T_{dc_1,\kappa} \rho_{c_1g-\kappa-\kappa'+\kappa,bg}^{[1]} (-1)^{N_{c_1}} + T_{dc_1,\kappa'} \rho_{c_1g-\kappa-\kappa'+\kappa',bg}^{[1]} (-1)^{N_{c_1}} - \rho_{dg-\kappa-\kappa',c_1g-\kappa}^{[1]} (-1)^{N_b} T_{c_1b,\kappa} - \rho_{dg-\kappa-\kappa',c_1g-\kappa'}^{[1]} (-1)^{N_b} T_{c_1b,\kappa'} \quad (3.30)$$

Y sumando sobre todos los los estados  $|g\rangle$  de las guías en las ecuaciones (3.27) y (3.28) bajo la notación de:

$$\Phi_{bb'}^{[0]} = \sum_g \rho_{bg,b'g}^{[0]} \quad \Phi_{cb,\kappa}^{[1]} = \sum_g \rho_{cg-\kappa,bg}^{[1]} (-1)^{N_b} \quad \Phi_{bc,\kappa}^{[1]} = [\Phi_{cb,\kappa}^{[1]}]^* \quad (3.31)$$

$$\Phi_{ca,-\kappa-\kappa'}^{[2]} = - \sum_g \rho_{cg-\kappa-\kappa',ag}^{[2]} \quad \Phi_{bb',-\kappa+\kappa'}^{[2]} = \sum_g (1 - \delta_{\kappa\kappa'}) \rho_{bg-\kappa+\kappa',b'g}^{[2]} \quad (3.32)$$

$$f_\kappa \equiv f_{\kappa\alpha} = (e^{\varepsilon_\kappa - \mu_\alpha / T_\alpha} + 1)^{-1} \quad f_{-\kappa} \equiv 1 - f_{\kappa\alpha} \quad (3.33)$$

Donde  $\Phi_{bb'}^{[0]}$  es la matriz de densidad reducida del punto cuántico,  $f$  representa la distribución de Fermi-Dirac, de la cual se asume que los electrones en las guías están térmicamente distribuidos, por lo que se tienen las siguientes relaciones para la ecuación (3.28):

$$\sum_g \rho_{b_1g-\kappa+\kappa_1,bg}^{[0]} \approx f_\kappa \Phi_{b_1b}^{[0]} \quad \sum_g \rho_{cg-\kappa,c_1g-\kappa}^{[0]} \approx f_{-\kappa} \Phi_{cc_1}^{[0]} \quad (3.34)$$

Además, igualmente para la ecuación (3.28) se usarán las relaciones:

$$\rho_{b_1g-\kappa+\kappa_1,bg}^{[2]} = \delta_{\kappa\kappa_1} \rho_{b_1g-\kappa+\kappa,bg}^{[0]} + (1 - \delta_{\kappa\kappa_1}) \rho_{b_1g-\kappa+\kappa_1,bg}^{[2]} \quad (3.35)$$

$$\rho_{cg-\kappa,c_1g-\kappa_1}^{[2]} = \delta_{\kappa\kappa_1} \rho_{cg-\kappa,c_1g-\kappa}^{[0]} + (1 - \delta_{\kappa\kappa_1}) \rho_{cg-\kappa,c_1g-\kappa_1}^{[2]} \quad (3.36)$$

Con todo esto podemos expresar las ecuaciones (3.27) y (3.28) como:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb'}^{[0]} = (E_b - E_{b'}) \Phi_{bb'}^{[0]} + T_{ba_1, \kappa_1} \Phi_{a_1 b', \kappa_1}^{[1]} + T_{bc_1, \kappa_1} \Phi_{c_1 b', \kappa_1}^{[1]} - \Phi_{bc_1, \kappa_1}^{[1]} T_{c_1 b', \kappa_1} - \Phi_{ba_1, \kappa_1}^{[1]} T_{a_1 b', \kappa_1} \quad (3.37)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{cb, \kappa}^{[1]} \approx (E_c - \varepsilon_\kappa - E_b) \Phi_{cb, \kappa}^{[1]} + T_{cb_1, \kappa} \Phi_{b_1 b, \kappa}^{[0]} f_\kappa - \Phi_{cc_1}^{[0]} T_{c_1 b, \kappa} f_{-\kappa} + T_{cb_1, \kappa_1} \Phi_{b_1 b, -\kappa + \kappa_1}^{[2]} \\ + T_{cd_1, \kappa_1} \Phi_{d_1 b, -\kappa - \kappa_1}^{[2]} + \Phi_{cc_1, -\kappa + \kappa_1}^{[2]} T_{c_1 b, \kappa_1} + \Phi_{ca_1, -\kappa - \kappa_1}^{[2]} T_{a_1 b, \kappa_1} \quad (3.38)$$

Para la ecuación (3.29) se usan las relaciones:

$$\sum_g \rho_{a_1 g - \kappa + \kappa' + \kappa, b' g}^{[1]} (-1)^{N_{a_1}} \approx -f_\kappa \Phi_{a_1 b', \kappa'}^{[1]} \quad \sum_g \rho_{c_1 g - \kappa + \kappa' - \kappa', b' g}^{[1]} (-1)^{N_b} \approx f_{-\kappa'} \Phi_{c_1 b', \kappa}^{[1]} \quad (3.39)$$

$$\sum_g \rho_{bg - \kappa + \kappa', c_1 g - \kappa}^{[1]} (-1)^{N_{b'}} \approx f_{-\kappa} \Phi_{bc_1, \kappa'}^{[1]} \quad \sum_g \rho_{bg - \kappa + \kappa', a_1 g + \kappa'}^{[1]} (-1)^{N_b} \approx -f_{\kappa'} \Phi_{ba_1, \kappa}^{[1]} \quad (3.40)$$

Con lo que la ecuación (3.29) queda:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb', -\kappa + \kappa'}^{[2]} \approx (E_b - \varepsilon_\kappa + \varepsilon_{\kappa'} - E_{b'}) \Phi_{bb', -\kappa + \kappa'}^{[2]} - T_{ba_1, \kappa} \Phi_{a_1 b', \kappa'}^{[1]} f_\kappa + T_{bc_1, \kappa'} \Phi_{c_1 b', \kappa}^{[1]} f_{-\kappa'} \\ - \Phi_{bc_1, \kappa'}^{[1]} T_{c_1 b', \kappa} f_{-\kappa} + \Phi_{ba_1, \kappa}^{[1]} T_{a_1 b', \kappa'} f_{\kappa'} \quad (3.41)$$

Por ultimo, las relaciones usadas para la ecuación (3.30) son:

$$\sum_g \rho_{c_1 g - \kappa - \kappa' + \kappa, bg}^{[1]} (-1)^{N_{c_1}} \approx -\Phi_{c_1 b, \kappa'}^{[1]} f_\kappa \quad \sum_g \rho_{c_1 g - \kappa - \kappa' + \kappa', bg}^{[1]} (-1)^{N_{c_1}} \approx \Phi_{c_1 b, \kappa}^{[1]} f_{\kappa'} \quad (3.42)$$

$$\sum_g \rho_{dg - \kappa - \kappa', c_1 g - \kappa}^{[1]} (-1)^{N_b} \approx \Phi_{dc_1, \kappa'}^{[1]} f_{-\kappa} \quad \sum_g \rho_{dg - \kappa - \kappa', c_1 g - \kappa'}^{[1]} (-1)^{N_b} \approx -\Phi_{dc_1, \kappa}^{[1]} f_{-\kappa'} \quad (3.43)$$

Con lo que queda la ecuación (3.30)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{db, -\kappa - \kappa'}^{[2]} \approx (E_d - \varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa'} - E_b) \Phi_{db, -\kappa - \kappa'}^{[2]} - T_{dc_1, \kappa} \Phi_{c_1 b, \kappa'}^{[1]} f_\kappa + T_{dc_1, \kappa'} \Phi_{c_1 b, \kappa}^{[1]} f_{\kappa'} \\ - \Phi_{dc_1, \kappa'}^{[1]} T_{c_1 b, \kappa} f_{-\kappa} + \Phi_{dc_1, \kappa}^{[1]} T_{c_1 b, \kappa'} f_{-\kappa'} \quad (3.44)$$

Las ecuaciones (3.37), (3.67), (3.41) y (3.44) serán las bases para las ecuaciones maestras que se usaran. A continuación se muestra una deducción de estas ecuaciones maestras, los casos en los que puede usarse y sus características.

## Ecuación de Lindblad

El programa Qmeq usa un tipo particular de la ecuación maestra de Lindblad, la cual es tomada de la referencia [32]. Esta ecuación esta resuelta para el estado estacionario, esto es:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb'}^{[0]} = 0 \quad (3.45)$$

Con la condición de normalización  $\sum_g \Phi_{bb}^{[0]} = 1$ . Esta ecuación es de primer orden, por lo tanto puede describir el tunelaje secuenciado para valores de  $\Gamma$  mucho mas pequeños que la temperatura de las guías. También se puede mencionar que siempre se mantiene positiva la matriz de densidad reducida, sin embargo la ecuación puede no satisfacer las relaciones de Onsager, las cuales establecen que la matriz es simétrica si se toman las fuerzas y flujos apropiados, esto a consecuencia de la reversibilidad en el movimiento de las partículas con respecto a un tiempo  $t$  [33], esto en caso de que el valor del acoplamiento sea elevado.

La ecuación maestra de Lindblad usada es:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb'}^{[0]} &= (E_b - E_{b'}) \Phi_{bb'}^{[0]} - \frac{1}{2} \sum_{b''\alpha} \Phi_{bb''}^{[0]} \left[ \sum_a L_{ab''}^{\alpha*} L_{ab'}^\alpha + \sum_c L_{cb''}^{\alpha*} L_{cb'}^\alpha \right] \\ &- \frac{1}{2} \sum_{b''\alpha} \Phi_{b''b'}^{[0]} \left[ \sum_c L_{cb}^{\alpha*} L_{cb''}^\alpha + \sum_a L_{ab}^{\alpha*} L_{ab''}^\alpha \right] + \sum_{aa'\alpha} \Phi_{aa'}^{[0]} L_{ba}^\alpha L_{b'a'}^{\alpha*} + \sum_{cc'\alpha} \Phi_{cc'}^{[0]} L_{bc}^\alpha L_{b'c'}^{\alpha*} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Donde  $L$  corresponde a los operadores de salto [34] definidos como:

$$L_{cb,\alpha} = \sqrt{2\pi\nu_F f(+x_{cb}^\alpha)} T_{bc,\alpha} \quad L_{bc,\alpha} = \sqrt{2\pi\nu_F f(-x_{cb}^\alpha)} T_{bc,\alpha} \quad (3.47)$$

Siendo:

$$x_{cb}^\alpha = \frac{E_{cb} - \mu_\alpha}{T_\alpha} \quad (3.48)$$

En la cual  $\mu_\alpha$  es el potencial quimico y  $T_\alpha$  la temperatura en  $\alpha$ . El valor de  $E_{cb}$  esta dado por:

$$E_{cb} = E_c - E_b \quad (3.49)$$



## Ecuación de Redfield de primer orden

Esta ecuación tiene la característica de que los procesos disipativos son tomados directamente del ambiente, lo cual puede explicar mejor, por ejemplo, sistemas con variación de voltaje bias [35]. Además, comparte las características antes descritas para la ecuación de Lindblad.

Para obtener la ecuación de Redfield, por ser de primer orden, no se toman los valores de  $\Phi^{[2]}$  o de  $n$  mas altos de la ecuación (3.67), y se realiza una aproximación de Markov a  $\Phi^{[1]}$ , la cual consiste, de forma resumida [36], en:

1. La interacción entre el ambiente y el sistema es lo suficientemente débil como para poder asegurar que no hay alguna interacción inversa del sistema hacia el ambiente.
2. El tiempo de correlación para los observables relevantes del ambiente ( $\tau_a$ ) es mucho menor que el tiempo característico de la dinámica del sistema ( $\tau_r$ ), que es el tiempo de relajación del sistema por la interacción con el ambiente.

$$\tau_r \gg \tau_a \quad (3.50)$$

3. El sistema y el ambiente no están correlacionados, por lo que la matriz de densidad siempre puede ser factorizada como el producto tensorial de las matrices reducidas del ambiente ( $\Phi_a^{[0]}$ ) y del sistema ( $\Phi_s^{[0]}$ ).

$$\rho(t) = \Phi_a^{[0]} \otimes \Phi_s^{[0]} \quad (3.51)$$

Ahora integrando la ecuación (3.67) se tiene:

$$\Phi_{cb,\kappa}^{[1]}(t) = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\varepsilon_\kappa - E_c + E_b + i\eta)(t-t')} (T_{cb1,\kappa} \Phi_{b1b}^{[0]}(t') f_\kappa - \Phi_{cc1}^{[0]}(t') T_{c1b,\kappa} f_{-\kappa}) \quad (3.52)$$

Donde  $\eta = +0$  es un infinitesimal que asegura el correcto decaimiento de las condiciones iniciales. Finalmente con  $t \rightarrow \infty$  y una aproximación de Markov de:

$$\Phi_{bb'}^{[0]}(t') \approx e^{i(E_b - E_{b'})(t-t')} \Phi_{bb'}^{[0]}(t) \quad (3.53)$$

Con lo que la ecuación (3.52) queda:

$$\Phi_{cb,\kappa}^{[1]} = \frac{T_{cb_1,\kappa} \Phi_{b_1 b}^{[0]} f_\kappa}{\varepsilon_\kappa - E_c + E_{b_1} + i\eta} - \frac{\Phi_{cc_1}^{[0]} T_{c_1 b,\kappa} f_{-\kappa}}{\varepsilon_\kappa - E_c + E_{b_1} + E_b + i\eta} \quad (3.54)$$

Sustituyendo (3.54) en (3.37) se obtiene la ecuación de Redfield:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb'}^{[0]} &= (E_b - E_{b'}) \Phi_{bb'}^{[0]} + \sum_{b''\alpha} \Phi_{bb''}^{[0]} \left[ \sum_a \Gamma_{b''a,ab'}^\alpha I_{b''a}^{\alpha-} - \sum_c \Gamma_{b''c,cb'}^\alpha I_{cb''}^{\alpha+*} \right] \\ &+ \sum_{b''\alpha} \Phi_{b''b'}^{[0]} \left[ \sum_c \Gamma_{bc,cb''}^\alpha I_{cb''}^{\alpha+} - \sum_a \Gamma_{ba,ab''}^\alpha I_{b''a}^{\alpha-*} \right] + \sum_{aa'\alpha} \Phi_{aa'}^{[0]} \Gamma_{ba,a'b'}^\alpha [I_{b'a'}^{\alpha+*} - I_{ba}^{\alpha+}] \\ &+ \sum_{cc'\alpha} \Phi_{cc'}^{[0]} \Gamma_{bc,c'b'}^\alpha [I_{cb}^{\alpha-*} I_{c'b'}^{\alpha-}] \quad (3.55) \end{aligned}$$

Donde  $\Gamma$  e  $I$  se definen como:

$$\Gamma_{ba,a'b'}^\alpha = 2\pi\nu_F T_{ba,\alpha} T_{a'b',\alpha'} \quad (3.56)$$

$$2\pi I_{cb}^{\alpha\pm} = \int_{-D}^D \frac{dE f(\pm \frac{E - \mu_\alpha}{T_\alpha})}{E - E_{cb} + i\eta} = \mathcal{P} \int_{-D}^D \frac{dE f(\pm \frac{E - \mu_\alpha}{T_\alpha})}{E - E_{cb}} - i\pi f(\pm x_{cb}^\alpha) \theta(D - |E_{cb}|) \quad (3.57)$$

De donde  $E_{cb}$  y  $x_{cb}^\alpha$  se definen en (3.48) y (3.49). La integral anterior surge por la aproximación 2 en la sección 1.3. En el caso de que  $D \rightarrow \infty$  la parte principal de la integral puede ser aproximada con la función digamma  $\Psi$  de la forma:

$$\mathcal{P} \int_{-D}^D \frac{dE f(\frac{E - \mu_\alpha}{T_\alpha})}{E - E_{cb}} \stackrel{D \rightarrow \infty}{\approx} \text{Re} \Psi\left(\frac{1}{2} + i \frac{x_{cb}^\alpha}{2\pi}\right) - \text{In} \frac{D}{2\pi T_\alpha} \quad (3.58)$$

Para solucionar la ecuación (3.55) en estado estacionario se usa la ecuación (3.19).

### Ecuación de von Neumann

Al igual que para la ecuación de Redfield ésta ecuación de von Neumann es de primer orden, además de que comparte las mismas características detalladas y la integral de (3.67) es la misma que (3.52) sin embargo en este caso se hace una aproximación de

Markov de  $\Phi_{bb'}^{[0]}(t') \approx \Phi_{bb'}^{[0]}(t)$  y  $t \rightarrow +\infty$  se tiene:

$$\Phi_{cb,\kappa}^{[1]} = \frac{T_{cb_1,\kappa} \Phi_{b_1b}^{[0]} f_\kappa - \Phi_{cc_1}^{[0]} T_{c_1b,\kappa} f_{-\kappa}}{\varepsilon_\kappa - E_c + E_b + i\eta} \quad (3.59)$$

Sustituyendo (3.59) en (3.37) obtenemos la ecuación de von Neumann de primer orden:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb'}^{[0]} &= (E_b - E_{b'}) \Phi_{bb'}^{[0]} + \sum_{b''\alpha} \Phi_{bb''}^{[0]} \left[ \sum_a \Gamma_{b''a,ab'}^\alpha I_{ba}^{\alpha-} - \sum_c \Gamma_{b''c,cb'}^\alpha I_{cb}^{\alpha+*} \right] \\ &+ \sum_{b''\alpha} \Phi_{b''b'}^{[0]} \left[ \sum_c \Gamma_{bc,cb''}^\alpha I_{cb'}^{\alpha+} - \sum_a \Gamma_{ba,ab''}^\alpha I_{b'a}^{\alpha-*} \right] + \sum_{aa'\alpha} \Phi_{aa'}^{[0]} \Gamma_{ba,a'b'}^\alpha [I_{b'a}^{\alpha+*} - I_{ba'}^{\alpha+}] \\ &+ \sum_{cc'\alpha} \Phi_{cc'}^{[0]} \Gamma_{bc,c'b'}^\alpha [I_{c'b}^{\alpha-*} - I_{cb'}^{\alpha-}] \quad (3.60) \end{aligned}$$

Donde al igual que en la ecuación de Redfiel  $\Gamma$  e  $I$  se definen como (3.56) y (3.57) respectivamente

### Ecuación de Pauli

La ecuación maestra de Pauli es muy útil para describir el tunelaje secuencial de electrones, además, en todos los casos se mantiene el valor positivo de la matriz de densidad reducida y satisface las relaciones de Onsager. Sin embargo se debe considerar que los valores de la temperatura de las guías debe ser mucho mayor que la fuerza de acoplamiento  $\Gamma$ , y a su vez  $\Gamma$  deberá ser de un valor mucho mayor que el valor de energía de desdoblamiento entre estados con misma carga, por lo que tenemos:

$$T \gg \Gamma \gg \Delta E \quad (3.61)$$

Para deducir la ecuación de Pauli, se toman en cuenta los valores de excitación para  $n = 1$ , las coherencias de la matriz de densidad reducida se toman con valor de cero y la aproximación de Markov se hace a  $\Phi^{[1]}$ . Por lo anterior, la ecuación puede ser obtenida a partir de la ecuación de Redfield o de von Newman de primer orden solo eliminando las coherencias. La ecuación para únicamente la población queda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_{bb}^{[0]} = \sum_{aa} [\Phi_{aa} \Gamma_{a \rightarrow b}^\alpha f(+x_{ba}^\alpha) - \Phi_b \Gamma_{b \rightarrow a}^\alpha f(-x_{ba}^\alpha)] + \sum_{ca} [\Phi_{cc} \Gamma_{c \rightarrow b}^\alpha f(-x_{cb}^\alpha) - \Phi_b \Gamma_{b \rightarrow c}^\alpha f(+x_{cb}^\alpha)] \quad (3.62)$$

### Ecuación de von Neumann de segundo orden

La ecuación de segundo orden de von Neumann puede describir el tunelaje secuencial de electrones, cotunelaje, tunelaje en pares y efectos de ensanchamiento, además de que

puede dar valores exactos de corriente en sistemas sin interacción coulombiana, pero para los sistemas con interacción se debe tener en cuenta que el valor del acoplamiento tiene que ser menor que la temperatura.

Esta ecuación también puede no satisfacer las relaciones de Onsager ni que la matriz de densidad reducida sea siempre positiva, y para obtenerla hay que asumir que las guías están térmicamente distribuidas en concordancia con la distribución de Fermi.

Comenzamos con las ecuaciones (3.41) y (3.44), que al ser integradas obtenemos:

$$\begin{aligned} \Phi_{bb',-\kappa+\kappa'}^{[2]}(t) = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa'} - E_b + E_{b'} + i\eta)(t-t')} & (-T_{ba_1,\kappa} \Phi_{a_1b',\kappa'}^{[1]}(t') f_\kappa + T_{bc_1,\kappa'} \Phi_{c_1b',\kappa}^{[1]}(t') f_{-\kappa'} \\ & - \Phi_{bc_1,\kappa'}^{[1]}(t') T_{c_1b',\kappa} f_{-\kappa} + \Phi_{ba_1,\kappa}^{[1]}(t') T_{a_1b',\kappa'} f_{\kappa'}) \end{aligned} \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{db,-\kappa-\kappa'}^{[2]}(t) = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\varepsilon_\kappa + \varepsilon_{\kappa'} - E_d + E_b + i\eta)(t-t')} & (-T_{dc_1,\kappa} \Phi_{c_1b,\kappa'}^{[1]}(t') f_\kappa + T_{dc_1,\kappa'} \Phi_{c_1b,\kappa}^{[1]}(t') f_{\kappa'} \\ & - \Phi_{dc_1,\kappa'}^{[1]} T_{c_1b,\kappa}(t') f_{-\kappa} + \Phi_{dc_1,\kappa}^{[1]} T_{c_1b,\kappa'}(t') f_{-\kappa'}) \end{aligned} \quad (3.64)$$

Haciendo una aproximación de Markov en  $\Phi^{[1]}(t') \approx \Phi^{[1]}(t)$  resulta:

$$\Phi_{bb',-\kappa+\kappa'}^{[2]}(t) = \frac{-T_{ba_1,\kappa} \Phi_{a_1b',\kappa'}^{[1]} f_\kappa + T_{bc_1,\kappa'} \Phi_{c_1b',\kappa}^{[1]} f_{-\kappa'} - \Phi_{bc_1,\kappa'}^{[1]}(t) T_{c_1b',\kappa} f_{-\kappa} + \Phi_{ba_1,\kappa}^{[1]} T_{a_1b',\kappa'} f_{\kappa'}}{\varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa'} - E_b + E_{b'} + i\eta} \quad (3.65)$$

$$\Phi_{db,-\kappa-\kappa'}^{[2]}(t) = \frac{-T_{dc_1,\kappa} \Phi_{c_1b,\kappa'}^{[1]} f_\kappa + T_{dc_1,\kappa'} \Phi_{c_1b,\kappa}^{[1]} f_{\kappa'} - \Phi_{dc_1,\kappa'}^{[1]} T_{c_1b,\kappa} f_{-\kappa} + \Phi_{dc_1,\kappa}^{[1]} T_{c_1b,\kappa'} f_{-\kappa'}}{\varepsilon_\kappa + \varepsilon_{\kappa'} - E_d + E_b + i\eta} \quad (3.66)$$

Por ultimo, sustituimos (3.65) y (3.66) en la ecuación (3.67) y resolver la ecuación (3.37) en estado estacionario para tener la ecuación de von Neumann de segundo orden.

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{cb,\kappa}^{[1]} &= -(\varepsilon_\kappa - E_c + E_b + i\eta) \Phi_{cb,\kappa}^{[1]} + T_{cb_1,\kappa} f_\kappa \Phi_{b_1b}^{[0]} - \Phi_{cc_1}^{[0]} f_{-\kappa} T_{c_1b,\kappa} \\
&+ \frac{T_{cb_1,\kappa_1} [T_{b_1c_1,\kappa_1} f_{-\kappa_1} \Phi_{c_1b,\kappa}^{[1]} + \Phi_{b_1a_1,\kappa}^{[1]} f_{\kappa_1} T_{a_1b,\kappa_1} - T_{b_1a_1,\kappa} f_\kappa \Phi_{a_1b,\kappa_1}^{[1]} - \Phi_{b_1c_1,\kappa_1}^{[1]} f_{-\kappa} T_{c_1b,\kappa}]}{\varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa_1} - E_{b_1} + E_b + i\eta} \\
&+ \frac{T_{cd_1,\kappa_1} [T_{d_1c_1,\kappa} f_{\kappa_1} \Phi_{c_1b,\kappa}^{[1]} + \Phi_{d_1c_1,\kappa}^{[1]} f_{-\kappa_1} T_{c_1b,\kappa_1} - T_{d_1c_1,\kappa} f_\kappa \Phi_{c_1b,\kappa_1}^{[1]} - \Phi_{d_1c_1,\kappa}^{[1]} f_{-\kappa} T_{c_1b,\kappa}]}{\varepsilon_\kappa + \varepsilon_{\kappa_1} - E_{d_1} + E_b + i\eta} \\
&+ \frac{[T_{cd_1,\kappa_1} f_{-\kappa_1} \Phi_{d_1c_1,\kappa}^{[1]} + \Phi_{cb_1,\kappa}^{[1]} f_{\kappa_1} T_{b_1c_1,\kappa_1} - T_{cb_1,\kappa} f_\kappa \Phi_{b_1c_1,\kappa_1}^{[1]} - \Phi_{cd_1,\kappa_1}^{[1]} f_{-\kappa} T_{d_1c_1,\kappa}] T_{c_1b,\kappa_1}}{\varepsilon_\kappa - \varepsilon_{\kappa_1} - E_c + E_{c_1} + i\eta} \\
&+ \frac{[T_{cb_1,\kappa_1} f_{\kappa_1} \Phi_{b_1a_1,\kappa}^{[1]} + \Phi_{cb_1,\kappa}^{[1]} f_{-\kappa_1} T_{b_1a_1,\kappa_1} - T_{cb_1,\kappa} f_\kappa \Phi_{b_1a_1,\kappa_1}^{[1]} - \Phi_{cb_1,\kappa_1}^{[1]} f_{-\kappa} T_{b_1a_1,\kappa}] T_{a_1b,\kappa_1}}{\varepsilon_\kappa + \varepsilon_{\kappa_1} - E_c + E_{a_1} + i\eta}
\end{aligned} \tag{3.67}$$

### 3.4.2. Cálculo de corriente y energía

Para calcular la corriente y la energía de corriente del sistema en estado estacionario en la guía  $\alpha$  se usan las expresiones definidas por:

$$I_\alpha = -\frac{\partial}{\partial t} \langle N_\alpha \rangle = -\iota \langle [H, N_\alpha] \rangle \tag{3.68}$$

$$\dot{E}_\alpha = -\frac{\partial}{\partial t} \langle H_\alpha \rangle = -\iota \langle [H, H_\alpha] \rangle \tag{3.69}$$

Con

$$N_\alpha = \sum_k c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k} \quad H_\alpha = \sum_k \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k} \tag{3.70}$$

Introduciendo la expresión resuelta para amplitudes de energía de corriente de partícula

$$\Phi_{cb,\alpha k}^{[1]} = \sum_g \langle cg - ak | \rho | bg \rangle (-1)^{N_b} \tag{3.71}$$

Con

$$|bg - \alpha k\rangle = |b\rangle \otimes c_{\alpha k} |g\rangle \tag{3.72}$$

Donde  $N_b$  es el numero de partículas para el estado de múltiples partículas  $|b\rangle$ . Así, ahora se pueden expresar la corriente y energía de la forma

$$I_\alpha = -2 \sum_{k,cb} \text{Im}[T_{bc,\alpha} \Phi_{cb,\alpha k}^{[1]}] \quad \dot{E}_\alpha = -2 \sum_{k,cb} \varepsilon_{\alpha k} \text{Im}[T_{bc,\alpha} \Phi_{cb,\alpha k}^{[1]}] \quad (3.73)$$

Por último, la corriente que se obtiene a causa de la temperatura de la guía  $\alpha$  puede ser calculada por medio de la derivada de la entropía con respecto al tiempo

$$\dot{S}_\alpha = \frac{1}{T_\alpha} (\dot{E}_\alpha - \mu_\alpha \dot{N}_\alpha) \quad (3.74)$$

Con lo que resulta la corriente por temperatura

$$\dot{Q}_\alpha = \dot{E}_\alpha - \mu_\alpha \dot{N}_\alpha \quad (3.75)$$

### 3.4.3. Unidades

Los valores que usa el Qmeq para las cantidades físicas  $\hbar$ ,  $k_B$  y  $|e|$  es igual a 1, también son consideradas corrientes de partícula en lugar de corrientes eléctricas. Si se tiene interés en la corriente eléctrica y tomar el valor real de las cantidades físicas seria necesario hacer los cambios o considerar lo siguiente:

$$V \longrightarrow eV \quad (3.76)$$

$$V_g \longrightarrow eV_g \quad (3.77)$$

$$I[\Gamma] \longrightarrow I[e\Gamma/\hbar] \quad (3.78)$$

$$\frac{dI}{dV}[I] \longrightarrow \frac{dI}{dV}[e^2/\hbar] \quad (3.79)$$

Y para la conductancia en valores de  $e^2/h$  es necesario multiplicar  $dI/dV$  por  $2\pi$ .

# Capítulo 4

## Solución numérica de las ecuaciones maestras

Aunque en muchas ocasiones es posible resolver, total o parcialmente, de forma analítica las ecuaciones maestras para un sistema de puntos cuánticos [37], [38], la complejidad del problema al añadir muchos puntos cuánticos o aumentar grados de libertad, vuelve poco práctico el abordar su estudio desde un punto de vista puramente teórico. Cuando esto sucede, es posible recurrir a herramientas computacionales que permiten resolver numéricamente las ecuaciones maestras del sistema de interés. Con esto en mente, en este trabajo se eligió modelar numéricamente sistemas de puntos cuánticos y el transporte electrónico a través de ellos.

Un lenguaje de programación que ha sido ampliamente adoptado dentro de la comunidad científica, es el lenguaje Python. Para entender un poco sobre este lenguaje de programación y su modo de uso se describe en este capítulo a grandes rasgos en que consiste, el tipo de datos que pueden usarse y al final una descripción del paquete de código Qmeq que será usado en la resolución de los sistemas de puntos cuánticos.

### 4.1. Python

Python es un lenguaje de programación de alto nivel multiparadigma, esto quiere decir que combina distintas propiedades, entre las cuales se puede mencionar que es un lenguaje orientado a objetos, además incluye características de la programación imperativa, funcional, procedural y reflexiva. Por sus características se ha convertido en uno de los lenguajes de programación más usados en el ámbito científico. Cuenta con una amplia variedad de bibliotecas especializadas para distintos usos, por lo que se pueden realizar todo tipo de programas, tales como aplicaciones para sistemas operativos, servidores de red, páginas web, entre otros. Aunque se trata de un lenguaje interpretado, lo que significa que no requiere compilar el código fuente para ejecutarlo, Python cuenta con muchas bibliotecas de cálculo numérico que ya se encuentran compiladas en C, lo que permite realizar operaciones numéricas de forma eficiente, e incluso de forma paralela y vectorizada.

Una característica esencial de Python es que el código es simple y fácilmente legible, lo que propicia el rápido aprendizaje e implementación en distintas áreas. Actualmente, su principal crecimiento se ha debido al desarrollo de la inteligencia artificial, machine learning, Deep learning y la ciencia de datos. El desarrollo de paquetes de código para solucionar muchos de estos problemas facilita el crecimiento en la investigación en esos temas, pues no es necesario desarrollar todo un programa desde cero para poder simular un problema determinado, sino que al contar con un código ya desarrollado se puede partir de ahí para duplicar resultados o modificar dichos paquetes de código para resolver algún problema de interés, crear modelos predictivos o aplicaciones diversas para muchas áreas económicas, financieras, tecnológicas o científicas.

### 4.1.1. Tipos básicos de datos

En Python, como en todo tipo de lenguaje de programación, se usan distintos tipos de datos en un programa. A continuación se mostrarán algunos tipos básicos de datos [39] para poder comprender el tipo de información que se estará manejando en las secciones siguientes.

**Enteros:** Los datos de tipo entero son de tipo numérico, y como el nombre lo indica, se usa para valores que sean únicamente enteros.

**Flotantes:** Los datos de tipo flotante representan todo el conjunto de los números reales, con este tipo de datos se pueden utilizar números con punto decimal.

**Complejos:** Este tipo, por su nombre, engloba los valores numéricos de tipo complejo, permitiendo realizar las operaciones de manera directa sin mayores especificaciones.

**Booleanos:** Para los valores de tipo booleano, más comúnmente se usan las palabras en inglés 'True' y 'False', sin embargo también pueden tomarse otros valores, por ejemplo, el valor cero o secuencias vacías son tomadas como 'False'.

**Cadenas:** Las cadenas corresponden a todos los caracteres en formato Unicode, estos tipos de datos son necesarios para poder escribir texto en los programas.

**Listas:** Es un contenedor de datos los cuales son guardados y pueden ser accedidos y cambiados a voluntad.

**Tuplas:** De manera similar, las tuplas son un contenedor con una secuencia de números guardados, sin embargo este tipo de estructura no puede ser modificada después de ser definida.

**Conjuntos:** Los conjuntos, como en el álgebra, representan un grupo de valores únicos dentro del mismo conjunto.

**Diccionarios:** Los diccionarios son una estructura especial que nos permite acceder a un valor por medio de una clave única.

Estos tipos de datos requieren de cierta sintaxis para ser usados, en la figura 4.1 se muestra un ejemplo de cada tipo y su sintaxis.



```
Enteros = 1
Flotantes = 1.0001
Complejos = 1 + 1j
Booleanos = False
Cadenas = "Esto es una cadena"
Listas = [1, 2, 3, 4, 5]
Tuplas = (1, 2, 3, 4, 5)
Conjuntos = set([1, 2, 3, 4, 5])
Diccionarios = {'a':1, 'b':2, 'c':3, 'd':4, 'e':5}
```

Figura 4.1: Ejemplos de los tipos de datos descritos y la sintaxis necesaria para usarlos.

## 4.2. Qmeq

Como se mencionó al inicio de este capítulo, en este trabajo se realizaron simulaciones computacionales de sistemas de puntos cuánticos. Estos cálculos fueron realizados con el paquete Qmeq, por sus siglas en inglés *Quantum master equation for quantum dot transport*, Qmeq es un paquete de código abierto diseñado para la simulación de transporte electrónico a través de puntos cuánticos en estado estacionario para sistemas con una interacción electrón-electrón fuerte.

El Qmeq puede calcular la energía o la corriente en estado estacionario causadas por la diferencia de potencial o la temperatura entre las guías, las cuales están acopladas a los puntos cuánticos por efecto túnel. Para resolver algún sistema de interés de una sola partícula se puede elegir alguna de las ecuaciones maestras que tiene incluidas, las cuales pueden ser Pauli, Redfield de primer orden, y von Neumann de primer orden, además de una forma particular de la ecuación de Lindblad; para el caso de interés de interacciones de dos partículas, se puede emplear la ecuación de von Neumann de segundo orden.

El código de Qmeq está escrito en Python, compilando algunas partes del código mediante el uso de Cython, y haciendo un uso extensivo de los módulos numpy y scipy. Estos módulos están diseñados para realizar operaciones matemáticas de forma eficiente, por lo que, en general, su rendimiento es muy bueno aún cuando se trata de un código realizado en un lenguaje de alto nivel. Además, el módulo matplotlib es muy útil para la creación de distintos tipos de gráficos y la visualización de resultados. El uso de Cython es muy conveniente para poder usar librerías y funciones del lenguaje C y C++ empleando la misma sintaxis que en python. Todo esto con el fin de proveer un paquete eficiente para la simulación de los sistemas de transporte en puntos cuánticos.

### 4.2.1. Definiciones

El paquete Qmeq para poder simular el sistema de interés hace uso de la clase Builder, la cual es un patrón de construcción de objetos con muchas opciones posibles, pero requiere de la definición de algunas variables. En este caso requiere de ocho variables obligatorias para poder crear el hamiltoniano del sistema, sin embargo tiene disponibles otras variables no indispensables que pueden ser omitidas.

Las variables obligatorias y sus características son:

**nsingle**: Número de estados de partícula única. Debe ser un valor entero correspondiente al número de estados del sistema. Por notación posteriormente serán numerados a partir del 0 hasta  $nsingle-1$ .

**hsingle**: Se define como un diccionario correspondiente al hamiltoniano de partícula única, tal como se muestra en la figura 4.2.1

```
hsingle={(0,0):ε1,      (0,1):Ω01,      ... ,      (0,nsingle-1):Ω0nsingle-1,
...
... ,      (i,i):εi,      (i,i+1):Ωi,i+1, ... ,      (i,nsingle-1):Ωi,nsingle-1,
...
... ,      ... ,      ... ,      (nsingle-1,nsingle-1):ε nsingle-1}
```

Figura 4.2: Ejemplo de como introducir los valores del hamiltoniano para partícula única en el código.

**coulomb**: Diccionario que contiene los elementos de la matriz coulombiana, los cuales deben seguir las reglas presentadas en la sección 3.2. Estos elementos deben escribirse como en la figura 4.2.1

```
coulomb={(m,n,k,l):Umnkl,
...
(i,j,p,r):Uijpr}
```

Figura 4.3: Forma de introducir los valores para la interacción coulombiana.

Para Qmeq es importante solo especificar los elementos de la matriz donde los estados sean  $k > l$  y  $n > m$ .

**nleads**: Es un número entero e indica la cantidad de canales de guía.

**tleads**: Se define como un diccionario en el que se describen las amplitudes de tunelaje para múltiples partículas, figura 4.2.1

```
tleads={(a,i):tai,
...
(b,j):tbj}
```

Figura 4.4: Muestra de como se requiere introducir los valores de las amplitudes de tunelaje.

En donde el valor de la izquierda es la etiqueta de la guía y el valor de la derecha corresponde al estado del punto cuántico.

**mulst**: Describe los potenciales químicos de cada una de las guías en un diccionario.

**tlst**: Define un diccionario con las temperaturas de las guías.

**dband**: Es una variable que recibe un valor de tipo flotante que indica el ancho de banda de las guías.

Ya que se construyó el hamiltoniano del sistema se puede resolver, para ello se requiere la instrucción `system.solve()`, lo cual sigue el siguiente proceso:

1. La función `qdq` obtiene los eigenestados de múltiples partículas y los eigenestados del hamiltoniano de los puntos cuánticos (ecuación (3.3)).
2. La función `rotateq` expresa el hamiltoniano de tunelaje (ecuación (3.6)) en la eigenbase de múltiples partículas (ecuación (3.16)).
3. `masterq` resuelve de manera aproximada el sistema con la ecuación maestra elegida y obtiene los elementos de la matriz de densidad reducida.
4. Por último, la función `currentq` calcula la corriente y las amplitudes de corriente del sistema.

Las funciones anteriores pueden no ser requeridas para algún análisis particular, por lo que puede elegirse su uso con un valor booleano en la función `system.solve()` por ejemplo `system.solve(qdq=False)`.

Hay que tener en cuenta otro parámetro opcional para las ecuaciones de von Neumann de primer orden y Redfield, el cual es llamado `itype`, a este parámetro se le pueden dar los valores de 0, 1 o 2, los cuales determinan la forma en que se resolverá la ecuación (3.58), siendo:

**itype=2**: La parte principal  $\mathcal{P}$  es excluida y no se resuelve.

**itype=1**: La integral es aproximada empleando la función digamma.

**itype=0**: El cálculo es realizado usando la librería SciPy en donde se implementa QUADPACK con la rutina DQAWQ.

Después de los cálculos realizados algunos valores pueden ser consultados, los cuales son:

**system.current** Muestra la corriente de partícula.

**system.energy\_current** Es la energía de la corriente.

**system.heat\_current** Es la corriente inducida por la temperatura.

**system.phi0** Son los elementos de la matriz de densidad reducida.

**system.phi1** Son las amplitudes de la energía de corriente.

**system.Ea** Muestra los eigenestados de los puntos cuánticos.

**system.Tba** Son las amplitudes de tunelaje para múltiples partículas.

Otras importantes funciones y características pueden ser usadas y consultadas con la clase Builder de entre las cuales se pueden resaltar:

**system.kern** muestra el liouvilliano correspondiente a la matriz de densidad reducida.  
**system.add()** Agrega un nuevo valor a alguna o varias de las variables *hsingle*, *coulomb*, *tleads*, *mulst* o *tlst*.

**system.change** Puede cambiar alguna o varias de las variables *hsingle*, *coulomb*, *tleads*, *mulst* o *tlst*.

**system.remove\_states( $\Delta E$ )** Hace que no se tomen en cuenta los estados por encima del valor de energía  $\Delta E$ .

**system.use\_all\_states()** Vuelve a tomar en cuenta todos los estados definidos.

Finalmente, la clase Builder está ligada a otras clases, que en conjunto resuelven el sistema. Estas clases y sus características son:

**StateIndexingDM** Describe el indexado de los estados de múltiples partículas y los elementos de la matriz de densidad. Se puede acceder a sus características por medio de *system.si*

**QuantumDot** Esta clase se usa para construir el hamiltoniano de múltiples partículas y diagonalizarlo. Para acceder a esta clase se usa *system.qd*.

**LeadsTunneling** Se accede a esta clase con *system.leads* y se usa para representar las propiedades de las guías, las amplitudes de tunelaje de múltiples partículas y para expresarlas en la eigenbase del hamiltoniano.

**Approach** Es la clase que implementa las distintas aproximaciones de las ecuaciones maestras, se accede a ella con *system.appr* y para elegir la ecuación maestra a usar se define la variable *kerntype*. Los nombres de las ecuaciones maestras en Qmeq son Lindblad, Redfield, Pauli, 1vN y 2vN.

**FunctionProperties** Contiene diversas definiciones de variables que son usadas por la clase Approach y se puede acceder con *system.funcp*

# Capítulo 5

## Resultados

Como primer acercamiento al paquete Qmeq, tomamos los ejemplos que se incluyen los cuales son un solo punto cuántico con consideración de espín, dos puntos cuánticos sin espín y tres puntos cuánticos seriados; a los cuales se les realizaron ligeras modificaciones a algunos parámetros para observar los cambios y su funcionamiento. Posteriormente, se buscaron sistemas de puntos cuánticos resueltos en la literatura y se replicaron algunos de sus resultados, para asegurarnos que los datos arrojados por el programa son confiables. Por último, se trabajó en un sistema novedoso en el cual se pudieran estudiar los efectos cuánticos de interferencia destructiva que dan lugar a los llamados dark states. El sistema propuesto consiste en un arreglo de cinco puntos cuánticos, con una geometría que promueve observar el efecto de Aharonov-Bohm al aplicar dos campos magnéticos perpendiculares al plano que contiene a los cinco puntos cuánticos, siendo cada campo independiente uno de otro. Como se verá más adelante, este efecto nos permitió controlar los dark states mediante la variación del campo magnético del lado izquierdo o derecho y ambos simultáneamente aplicando todo el conocimiento obtenido anteriormente.

A continuación se describe cada uno de los modelos en los que se trabajó y los resultados obtenidos de cada uno.

### 5.1. Ejemplos modificados del Qmeq

El paquete Qmeq contiene tres ejemplos en los que se muestran sus capacidades y algunos tipos de modelos que se pueden simular, además de comparar los resultados que arrojan cada una de las ecuaciones maestras incluidas. Estos ejemplos nos ayudaron a comprender a mayor profundidad la forma en que se debe manejar cada sistema, como definir los parámetros y los tiempos que son necesarios en cada caso.

### 5.1.1. Primer ejemplo: Un punto cuántico con consideración de espín

Este primer modelo es también el más sencillo el cual consta de un solo punto cuántico con consideración del spin y de un campo magnético  $B$ , lo que causa un efecto Zeeman anómalo. La representación de este sistema se muestra en la figura 5.1.

Este sistema está descrito matemáticamente como se mostró en la sección 3.1, por lo que para este caso particular se tiene:

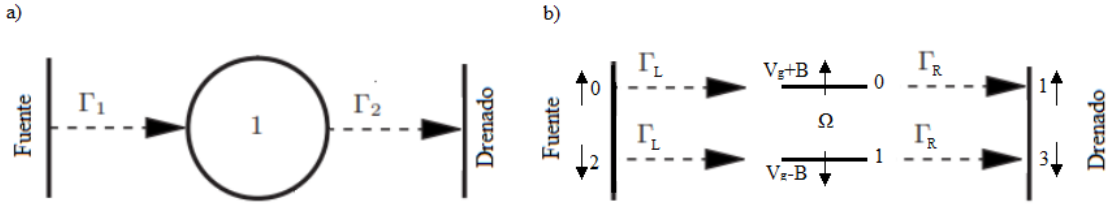


Figura 5.1: Representación del sistema desarrollado en el ejemplo 1 de Qmeq. En a) se observa el único punto cuántico del sistema y los acoplos hacia la fuente y el drenado; en b) se muestran los estados del punto cuántico debido a la consideración del espín y del campo magnético aplicado además de los cuatro canales o guías con las que se acopla al ambiente. Los números en las guías y en los estados se colocan como referencia para la mejor comprensión del código

$$H_{uno} = \sum_{k;l=L,R;\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_{lk} c_{l\sigma k}^\dagger c_{l\sigma k} + \sum_{l\sigma k} (t_l d_\sigma^\dagger c_{l\sigma k} + H.c.) + \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + (\Omega d_{\uparrow}^\dagger d_{\downarrow} + H.c.) + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} d_{\uparrow} \quad (5.1)$$

En donde el efecto de la aplicación del campo magnético se verá reflejado en el cambio de energía de los estados del punto cuántico que corresponde al tercer término de la ecuación 5.1, que es la parte correspondiente al  $H_{single}$ .

El ejemplo se resuelve bajo ciertos valores de parámetros establecidos, pero nosotros estamos interesados no solo en el resultado dado, sino también en las variaciones al cambiar los valores de los parámetros, por lo que los valores originales y los cambios realizados se muestran en la siguiente tabla:

Parámetro	Notación	Valor 1	Valor 2	Valor 3	Valor 4
Hibridación	omega	0	5	0	5
Interacción coulombiana	U	20	20	10	10
Temperatura	temp	1	1	1	1
Ancho de banda	dband	60	60	60	60

Tabla 5.1: Tabla de los valores asignados al sistema en cada una de las corridas del programa.

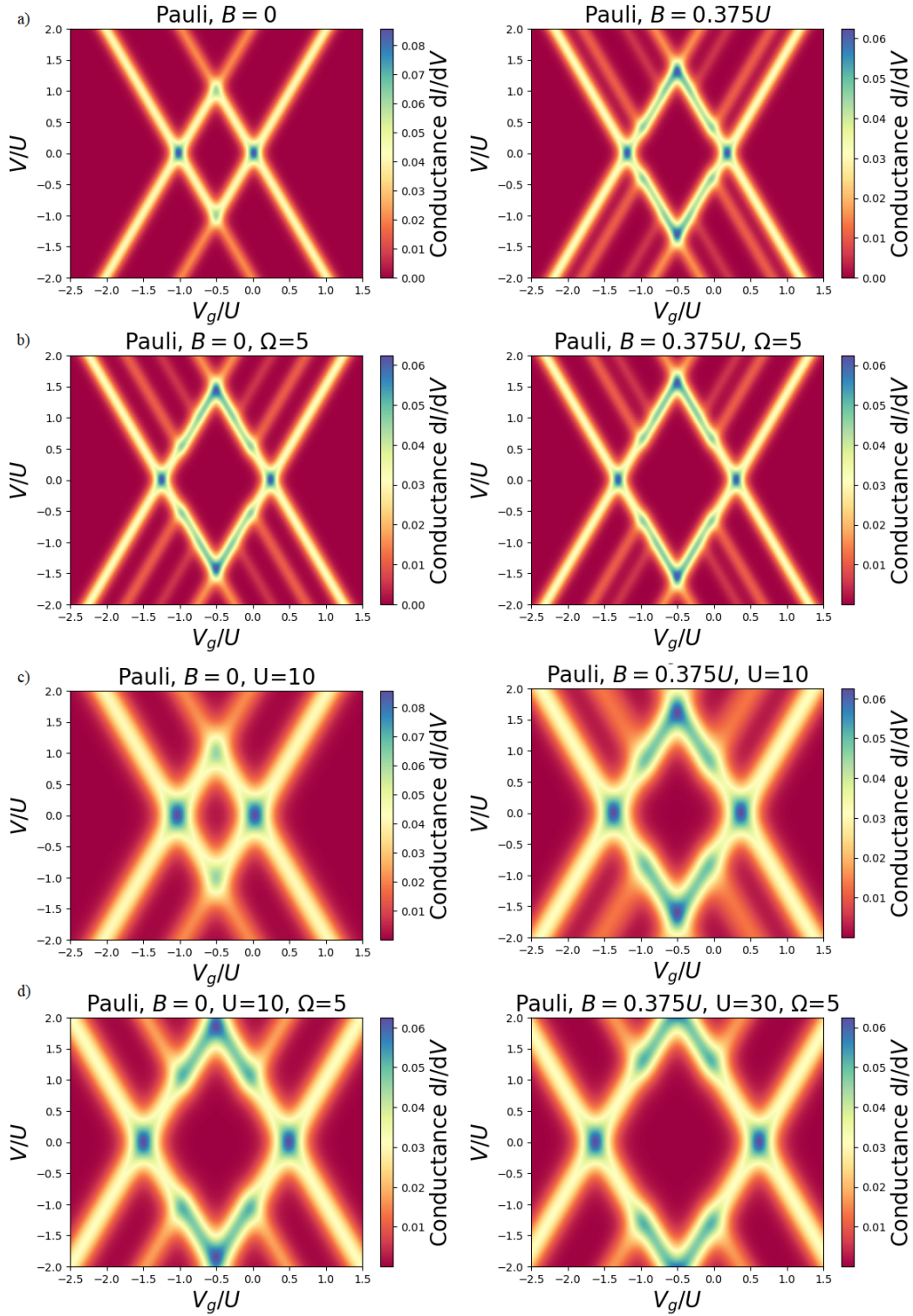


Figura 5.2: Diagramas de estabilidad en a) para los valores originales del ejemplo 1 del Qmeq, b) con aumento en la hibridación, c) con disminución de la interacción coulombiana y d) con ambos cambios de b) y c).

Con estos datos se calculan las corrientes con cada una de las ecuaciones maestras y la continuidad de la corriente. Además, para la ecuación de von Neumann de segundo

orden calcula la corriente de partícula y la energía de corriente; pero, con fines visuales, este primer ejemplo muestra dos diagramas de estabilidad, uno con campo magnético cero y otro a 0.375, en los cuales, al hacer el cambio de valores en los parámetros podemos observar los cambios en los diamantes como se muestra en la figura 5.2, de la cual podemos notar como la forma y limitación del diamante de Coulomb varían al modificar los valores de hibridación y de interacción coulombiana, esto porque los dos parámetros cambian la energía del punto cuántico, lo que provoca que los valores de voltaje gate para los cuales en el inciso a) eran los vértices del diagrama, en los incisos b), c) y d) cambien. También, se puede notar que el efecto de aumentar el valor de la hibridación es muy similar que el aplicar un campo magnético, ya que ambos modifican la diferencia energética de los estados dentro del punto cuántico.

Además de los diagramas de estabilidad, el primer ejemplo compara las aproximaciones de Pauli y von Neumann de segundo orden en una gráfica de voltaje bias contra conductancia y un último diagrama de estabilidad, estos resultados se muestran en la figura 5.3 con la variación únicamente de la interacción coulombiana de 20 a 10.

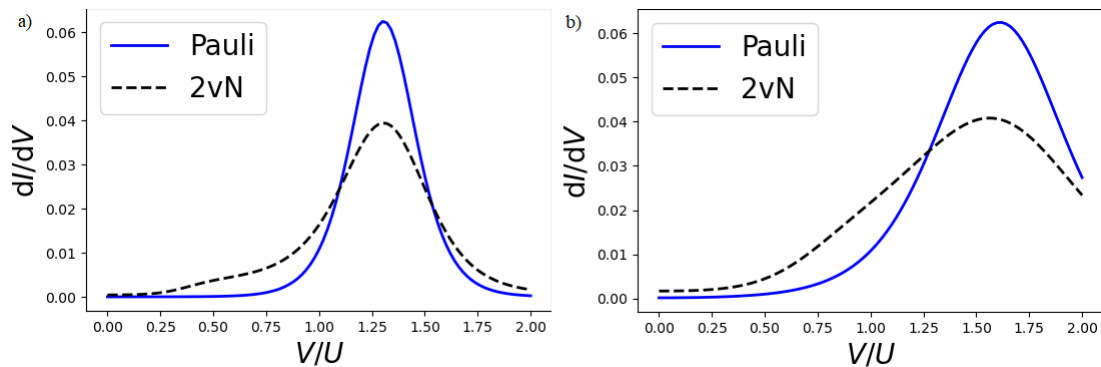


Figura 5.3: Gráficas comparativas del valor de conductancia contra voltaje bias con las ecuaciones de Pauli y de von Neumann de segundo orden, en a) con  $U=20$  y en b) con  $U=10$ .

De esta imagen podemos observar los resultados al resolver con la ecuación Pauli y von Neumann de segundo orden; de esta última notamos que en la línea punteada hay un pequeño pico debido al cotunelaje alrededor del valor del campo magnético  $B = 0,375$ , comportamiento que la ecuación de Pauli no puede mostrar, ya que corresponde a una interacción de segundo orden. Además, la diferencia entre a) y b) con el cambio en el valor de la interacción coulombiana muestra que el pico de corriente se desplaza un poco hacia la derecha y se ensancha debido a que el valor del voltaje bias está siendo dividido entre la interacción coulombiana además de influir en la energía del punto cuántico. El código puede ser consultado en los anexos al final del documento.

### 5.1.2. Segundo ejemplo: Doble punto cuántico

El sistema consiste en dos puntos cuánticos acoplados verticalmente con la fuente y el drenado sin consideración del espín, lo cual lo hace un sistema sencillo de simular. El esquema de este ejemplo se muestra en la figura 5.4.



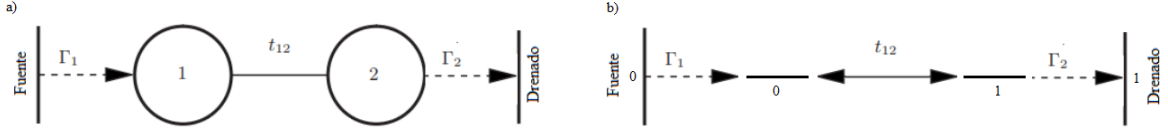


Figura 5.4: Representación del sistema tratado en el ejemplo 2, el cual consiste en dos puntos cuánticos acoplados en serie, en a) se muestra el arreglo de los puntos cuánticos y en b) el esquema de los estados energéticos considerados y el orden de numeración usado.

Aquí se busca observar como la corriente depende del voltaje gate, el cual, como se describió en el capítulo 1, puede modificar la energía necesaria para hacer pasar un electrón de la fuente a los puntos cuánticos; además, se quiere ver los efectos que puede tener la hibridación entre los estados 0 y 1. Utilizando la ecuación (3.1), podemos escribir el hamiltoniano para este sistema como:

$$H_{dos} = \sum_{k;l=L,R} \varepsilon_{lk} c_{lk}^\dagger c_{lk} + \sum_k (t d_l^\dagger c_{Lk} + t d_r^\dagger c_{Rk} + H.c) + V_g (d_l^\dagger d_l + d_r^\dagger d_r) + (\Omega d_l^\dagger d_r + H.c) + U d_l^\dagger d_r^\dagger d_r d_l \quad (5.2)$$

Para ver el comportamiento, se usaron los resultados obtenidos al resolver el sistema con la ecuación de Pauli y de von Neumann de primer orden con los tres valores para itype descritos en la sección 4.2.1. Nuevamente, para entender un poco mejor el comportamiento del sistema, se realizaron cambios a los parámetros como se muestra en la tabla 5.2

Parámetro	Notación	Valor 1	Valor 2	Valor 3	Valor 4
Interacción coulombiana	U	5	5	10	10
Voltaje bias	bias	0.5	0.4	0.5	0.4

Tabla 5.2: Valores de los parámetros del sistema en donde se realizaron cuatro corridas con variación en la interacción coulombiana y el voltaje bias.

Los demás parámetros necesarios no tuvieron cambio, siendo  $\Gamma = 1$ ,  $temp = 2$  y  $dband = 60$  que corresponden a la tasa de tunelaje, la temperatura de las guías y el ancho de banda de las guías. Con estas variaciones se pueden observar las diferencias obtenidas en las figuras 5.5 y 5.6.

Otro aspecto a resaltar es la diferencia que se obtiene en los resultados de la ecuación de von Neumann con los distintos métodos de resolverla, en donde al usar la librería SciPy muestra un valor de corriente ligeramente mayor que al usar la función digamma y una diferencia aun más marcada al negar por completo la parte principal de la integral. Este comportamiento es visible en todos los cambios de parámetros realizados.

En estas figuras se puede observar como en todos los casos la ecuación de Pauli no logra mostrar los datos correctos para valores de  $\Omega < \Gamma$ , ya que esta ecuación no toma

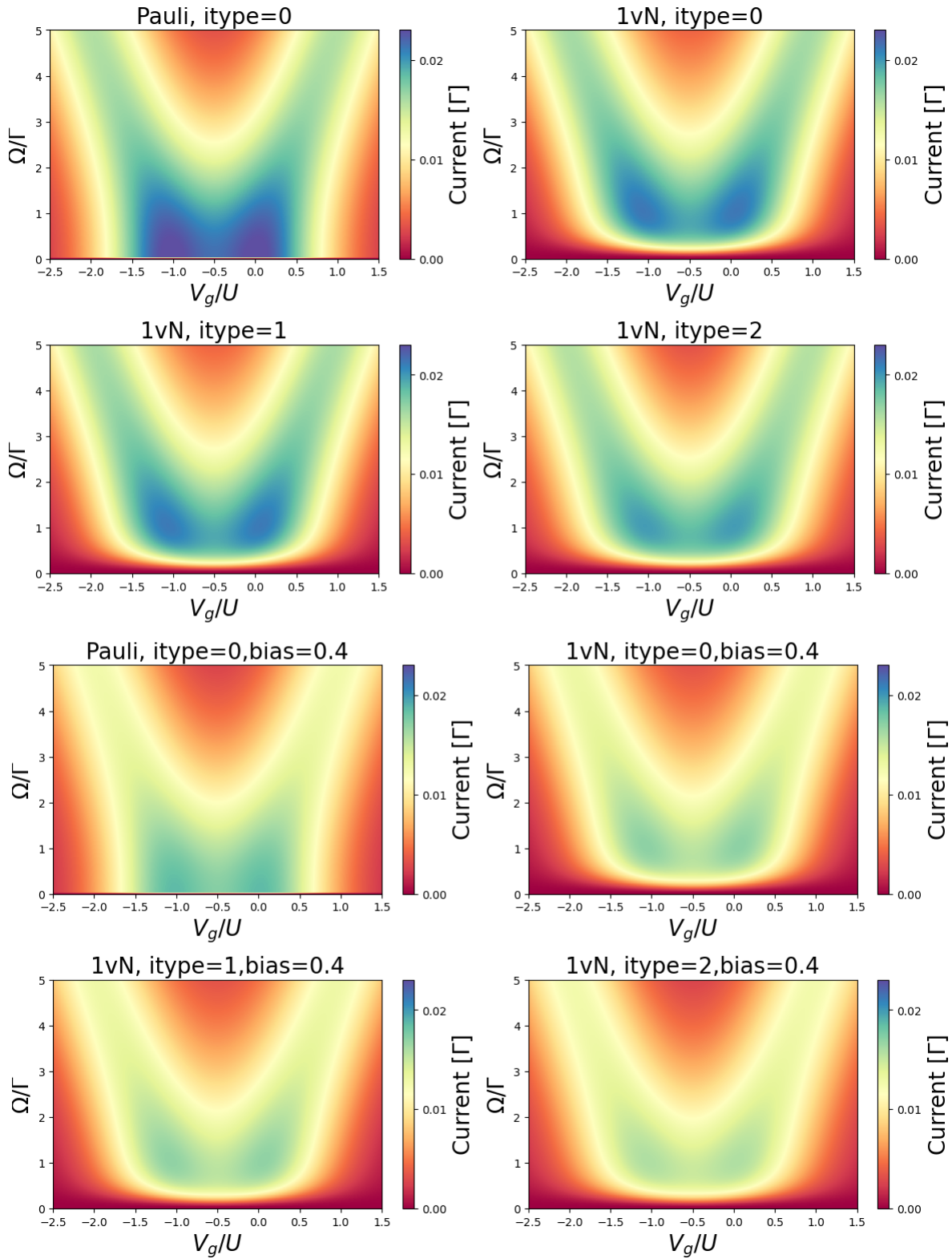


Figura 5.5: Gráficos de la dependencia de la corriente con respecto al voltaje gate y a la hibridación, en el inciso a) es el resultado original del ejemplo 2 de Qmeq y en b) se disminuyó el voltaje bias de 0.5 a 0.4, con lo que se puede notar una importante disminución en la corriente comparado con el resultado en a).

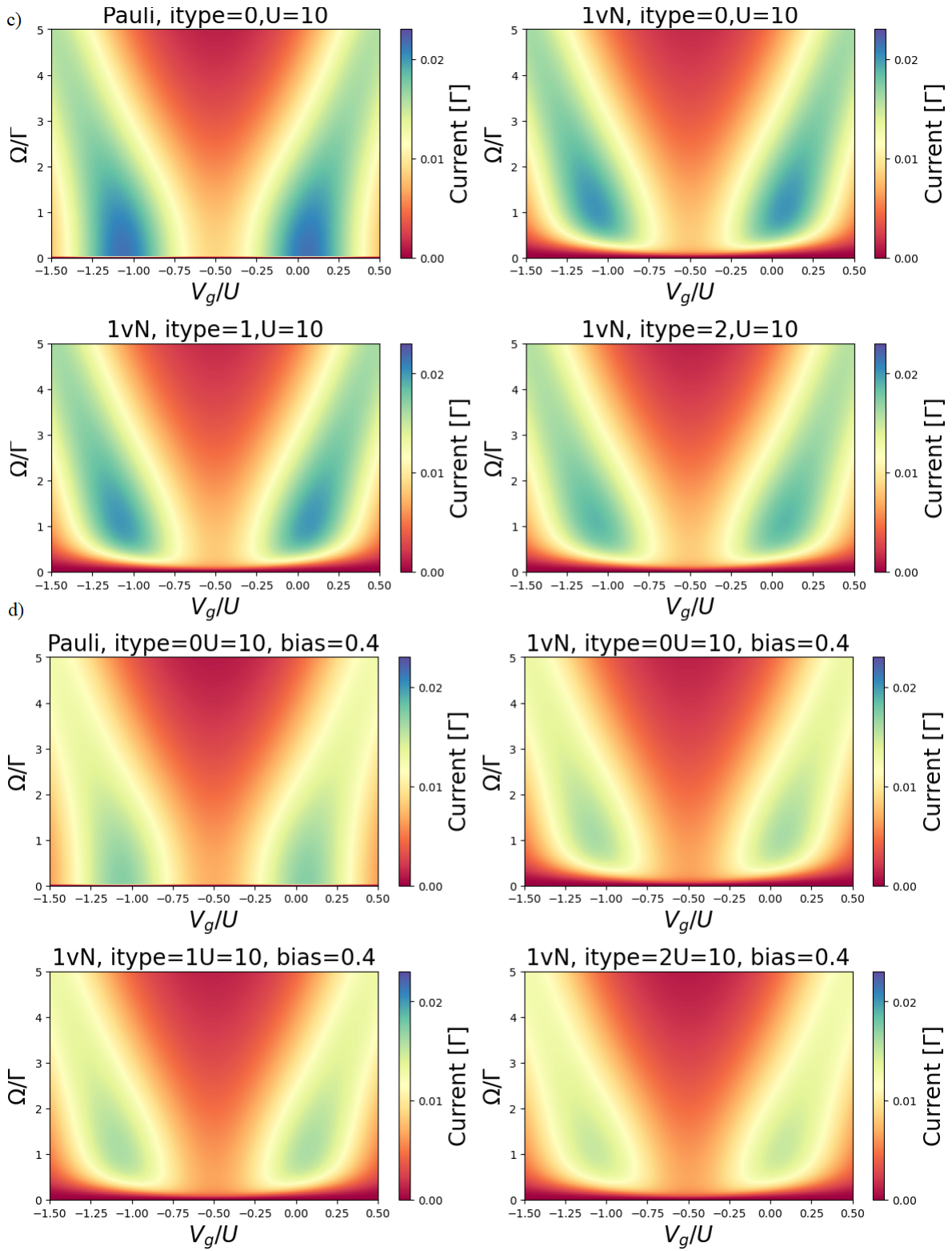


Figura 5.6: Resultados del cambio de c) la interacción coulombiana a  $U=10$  y d) la interacción coulombiana  $U=10$  y el voltaje bias a 0.4

en cuenta las coherencias. En cuanto a las diferencias en los cambios de parámetros se puede ver que al disminuir un poco el voltaje bias la corriente comienza a disminuir en algunas zonas, lo cual se ve acentuado al aumentar la interacción coulombiana, llegando hasta el punto en que para los valores alrededor de  $-0.5$ , incluso para valores bajos de hibridación no hay corriente alguna como se puede ver en los incisos c) y d).

Por último en el inciso d), en donde se tiene la variación de el voltaje bias y la interacción coulombiana al mismo tiempo, se puede ver como la disminución de la corriente es muy marcada puesto que a los electrones les resulta más complicado el movimiento a través del sistema.

El código de este ejemplo también puede ser consultado en los anexos.

### 5.1.3. Tercer ejemplo: Triple punto cuántico seriado con espín

Este sistema simulado corresponde al mostrado en la figura 5.7

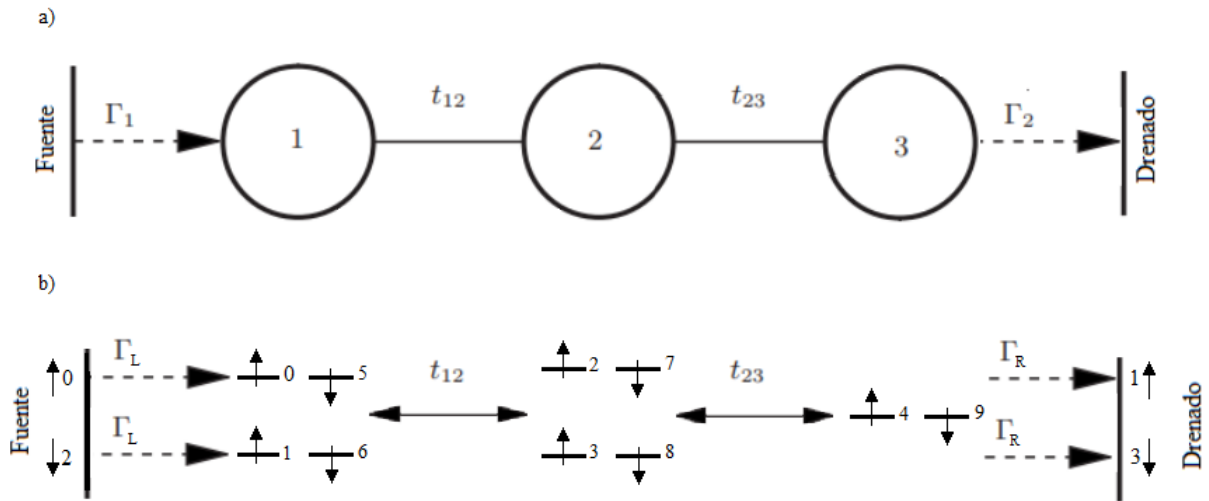


Figura 5.7: Sistema de tres puntos cuánticos acoplados en serie considerando el espín del electrón. Para el tercer punto cuántico solo se consideran dos niveles de energía ya que los dos restantes no contribuyen significativamente a la corriente pero si aumentan el tamaño de la matriz del hamiltoniano incrementando el tiempo de calculo.

Este sistema corresponde a un triple punto cuántico en serie con múltiples grados de libertad, en el cual se está interesado en como depende la corriente del nivel de energía del estado 3 (igual al estado 8) y compara resultados al resolver con la ecuación de Pauli y la ecuación de von Neumann de primer orden con la parte principal de la integral excluida (itype=2). Adicionalmente, para reducir el tamaño del Liouvilliano, se eliminarán los estados de múltiples partículas con energía mayor a 150 sobre el nivel base y se comparará con el cálculo sin quitar estos estados.

El hamiltoniano que describe éste sistema está dado por:

$$\begin{aligned}
H_{tres} = & \sum_{kl\sigma} \varepsilon_{kl} c_{kl\sigma}^\dagger c_{kl\sigma} + \sum_{n,kl\sigma} (t_{nl} d_{n\sigma}^\dagger c_{kl\sigma} + H.c.) + \sum_{n\sigma} E_n d_{n\sigma}^\dagger d_{n\sigma} + \sum_{nm\sigma} \Omega_{nm} d_{n\sigma}^\dagger d_{m\sigma} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{mnkl\sigma\sigma'} U_{mnkl} a_{m\sigma}^\dagger a_{n\sigma'}^\dagger a_{k\sigma'} a_{l\sigma} \quad (5.3)
\end{aligned}$$

En el sistema original es posible tener mas de un electr3n confinado en un solo punto cu3ntico, sin embargo la adaptaci3n tomada en el Qmeq solo contempla el tunelaje secuencial.

Para este ejemplo tambi3n se realiz3 un cambio al valor de  $\Gamma$ , el resto de los par3metros permanecieron sin cambio. Las gr3ficas obtenidas se muestran en 5.8.

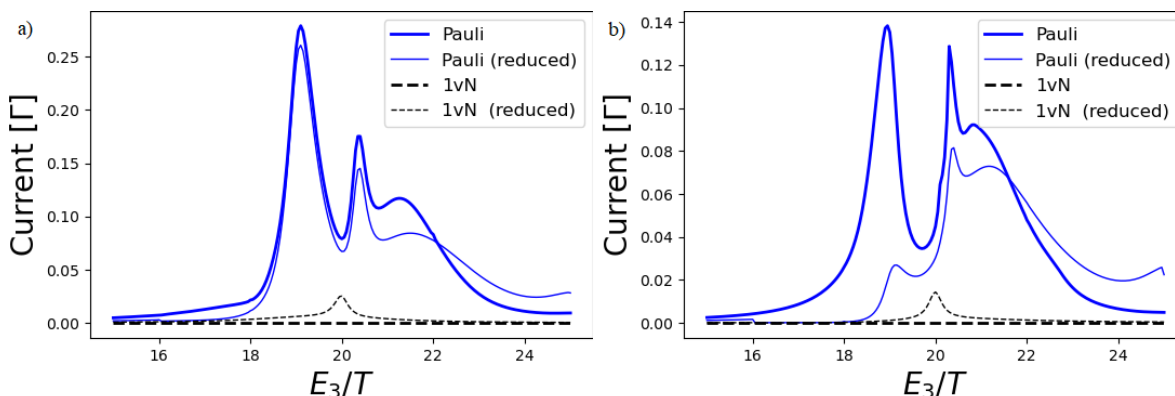


Figura 5.8: Comparaci3n de los valores de corriente con respecto al valor de energ3a del estado 3 solucionando con la ecuaciones de Pauli y de von Neumann en a) con los valores originales de par3metros y b) con un aumento en

De estas gr3ficas podemos ver que la diferencia entre la corriente con el Liouvilliano reducido y sin reducir arroja resultados similares en a) pero difieren un poco m3s en b), adem3s, al realizar el cambio de  $\Gamma$  para b) se ve un cambio importante en el pico de energ3a entre 20 y 22.

## 5.2. Sistemas de puntos cu3nticos triangulares

En esta secci3n se mostrar3n dos sistemas que fueron elegidos para tratar de obtener los mismos resultados que en las publicaciones originales, o en su caso, lo m3s similar posible, esto debido a que el Qmeq toma en cuenta algunos par3metros de forma obligatoria para poder solucionar el sistema a trav3s de las ecuaciones maestras, sin embargo, algunas de las formas de solucionar este tipo de problemas puede no considerar ciertas cosas o no especificar expl3citamente el valor de alguna variable.

### 5.2.1. Art3culo Physical Review B - Dark states in the magnetotransport through triple quantum dot

El primer sistema que se trabajo consiste en tres puntos cu3nticos acoplados en geometr3a triangular [11] como se puede observar en la figura 5.9.

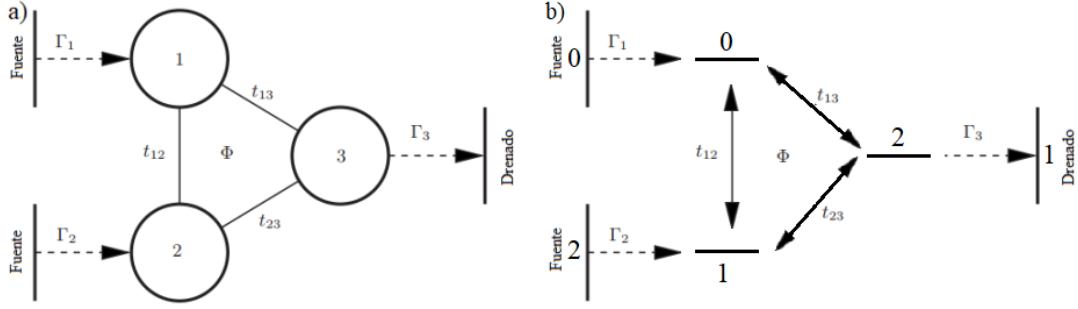


Figura 5.9: Modelo de triple punto cuántico sin espín, acoplados en geometría triangular con aplicación de un campo magnético en el centro, como se muestra en a), los estados y la numeración usada para la introducción de datos en el Qmeq se muestran en b)

Esta geometría es una de las más estudiadas en este tipo de sistemas de arreglos de puntos cuánticos. Para este sistema en particular, no se considera el espín, pero sí un campo magnético aplicado en el centro del triángulo sin extenderse hasta las trayectorias de los electrones, con el objetivo de ver el efecto Aharonov-Bohm, además de los dark states, los cuales se formarán debido a la geometría triangular. Comenzamos con la definición del hamiltoniano de este sistema, el cual en forma matricial está dado por:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & t_{12}e^{i\phi} & t_{13} \\ t_{12}e^{-i\phi} & -\Delta & t_{23} \\ t_{13} & t_{23} & \varepsilon \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Donde  $\Delta$  y  $\varepsilon$  corresponden a las energías de los puntos cuánticos y  $\phi$  es la fase agregada solo al acople  $t_{12}$  debido al campo magnético. Solo se le agrega la fase al término  $t_{12}$  por una transformación de Gauge y la fase queda definida como:

$$\phi = \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} \quad (5.5)$$

Donde  $\Phi$  es el flujo magnético encerrado en el triángulo y  $\Phi_0$  es el flujo magnético cuántico, sin embargo, como el Qmeq toma las constantes físicas normalizadas entonces  $\Phi_0 = 1$ .

Para resolver el sistema se usó la ecuación de Lindblad, ya que toma en cuenta la población, además de que muestra dos resultados. El primero es el sistema sin campo magnético solo mostrando el dark state formado y el segundo resultado muestra las oscilaciones de corriente debido al efecto Aharonov-Bohm. Para la duplicación de los resultados se usó igualmente la ecuación de Lindblad y los mismos valores de acople entre los puntos cuánticos, obteniendo los valores de la figura 5.10

Podemos ver que los resultados son muy similares, sin embargo cabe mencionar que los autores no hacen mención de los valores que le dan a la interacción coulombiana ( $U$ ), a la temperatura ( $temp$ ), al voltaje bias ( $vbias$ ) ni a gamma ( $gam$ ), por lo que elegimos los valores como  $U = 15$ ,  $temp = 0,5$ ,  $vbias = 10$  y  $gam = 1$ , mismos valores que se

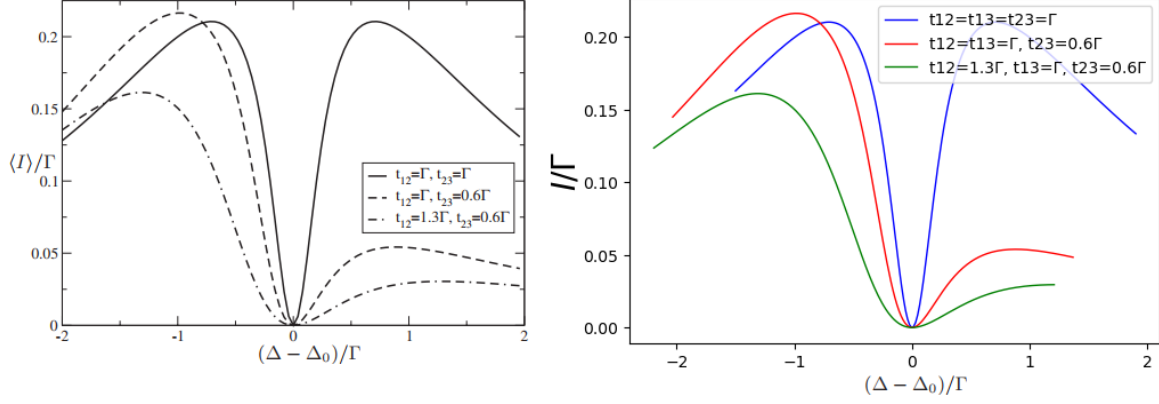


Figura 5.10: Comparación de los resultados obtenidos, del lado izquierdo en el artículo y de lado derecho los resultados obtenidos por el Qmeq para los mismos valores de parámetros y sin aplicación de campo magnético.

usaron para los resultados al aplicar campo magnético y ver el efecto Aharonov-Bohm como se muestra en la figura 5.11

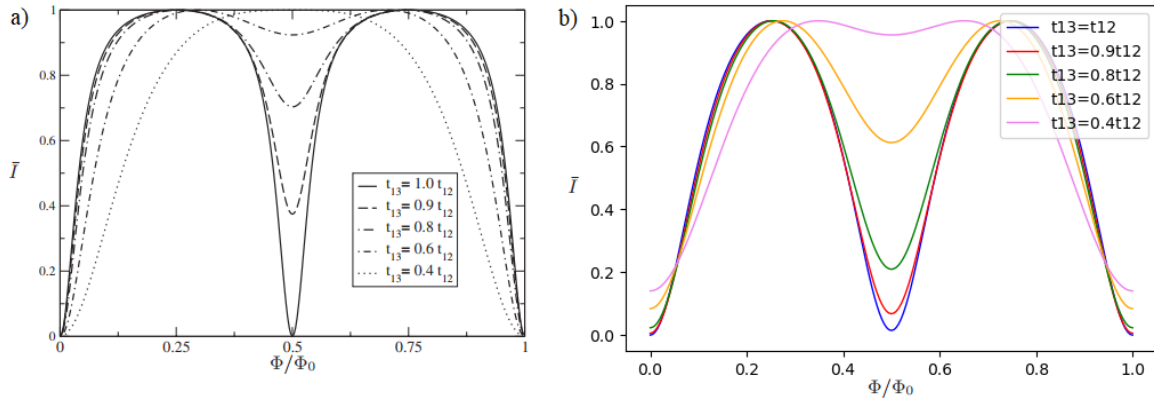


Figura 5.11: Comparación de de las oscilaciones de corriente al aplicar campo magnético y obtener el efecto Aharonov-Bohm, en a) los resultados originales del artículo y en b) los obtenidos por Qmeq donde se ve una disminución un poco mas lenta del dark state en 0.5.

En este resultado se pueden observar algunas diferencias con el resultado original, principalmente que el dark state se va eliminando más lentamente mostrando una curvatura un poco mas pronunciada, pero el comportamiento en general es el mismo que en el resultado original.

## 5.2.2. Artículo Physical Review B - Dark states in spin-polarized transport through triple quantum dot molecules

Para este sistema [40], se simuló un triple punto cuántico, igualmente en configuración triangular, con la diferencia de que en este caso solo se acopla a la fuente el punto 1 y al drenado el punto 2 como se muestra en la figura 5.12, además de que si se toma en cuenta el espín del electrón.

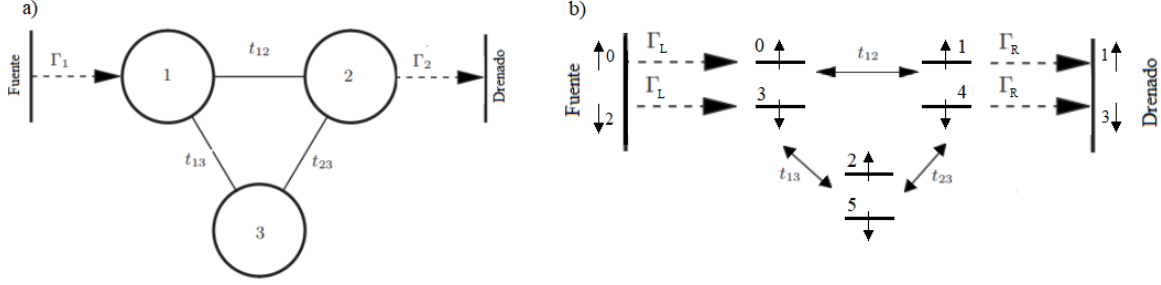


Figura 5.12: Representación del sistema de tres puntos cuánticos acoplados de forma triangular con solo el punto cuántico 1 con comunicación con la fuente y el punto cuántico 2 con el drenado mostrado en a), en b) se esquematizan los estados dentro de los puntos cuánticos al considerar el espín electrónico.

Este sistema, al tener en cuenta el espín puede hacerse una configuración de polarización paralela y una antiparalela, esto es que se magneticen las guías con un campo magnético hacia la misma dirección para la configuración en paralelo o en direcciones opuestas para el antiparalelo.

Los autores usan ambas configuraciones y comparan los resultados obtenidos para varios factores, pero en nuestro caso solo estamos interesados en el comportamiento de la corriente. En la investigación original se uso la técnica diagramatica en tiempo real para solucionar el sistema, se especifican los valores de las energías de los puntos cuánticos, la interacción coulombiana, la temperatura, el valor de la tasa de tunelaje, los potenciales químicos y el valor del acople entre los puntos cuánticos.

Para replicar el sistema es necesario introducir el hamiltoniano al Qmeq, el cual esta dado por:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k\sigma} \varepsilon_{\alpha k\sigma} c_{\alpha k\sigma}^\dagger c_{\alpha k\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_j n_{j\sigma} + U_j \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + \frac{U_{ij}}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \\
 & + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{t_{ij}}{2} \sum_{\sigma} (d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^\dagger + d_{j\sigma}) \sum_{k\sigma} (v_L c_{Lk\sigma}^\dagger d_{1\sigma} + v_R c_{Rk\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + H.c) \quad (5.6)
 \end{aligned}$$

Donde  $n_{j\sigma} = d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}$  representan la creación y aniquilación de un electrón con espín  $\sigma$  y  $v_L(v_R)$  son los elementos de la matriz de tunelaje.

Los resultados obtenidos al resolver con la ecuación de Pauli se muestran en la figura 5.13.

En esta figura se gráfica el voltaje bias en el eje  $x$  y el valor absoluto de la corriente en el eje  $y$ ; en las gráficas se puede observar un poco de diferencia en el comportamiento de la corriente en la obtenida por la ecuación de Pauli (inciso b)) y la original con la técnica diagramatica en tiempo real (inciso a)). Además, en la gráfica obtenida con el Qmeq no se muestra diferencia entre la configuración paralela o antiparalela a pesar de que se proveen todos los parámetros requeridos por el Qmeq, lo que puede indicar que las diferencias sean principalmente por las diferencias entre los métodos de solución.



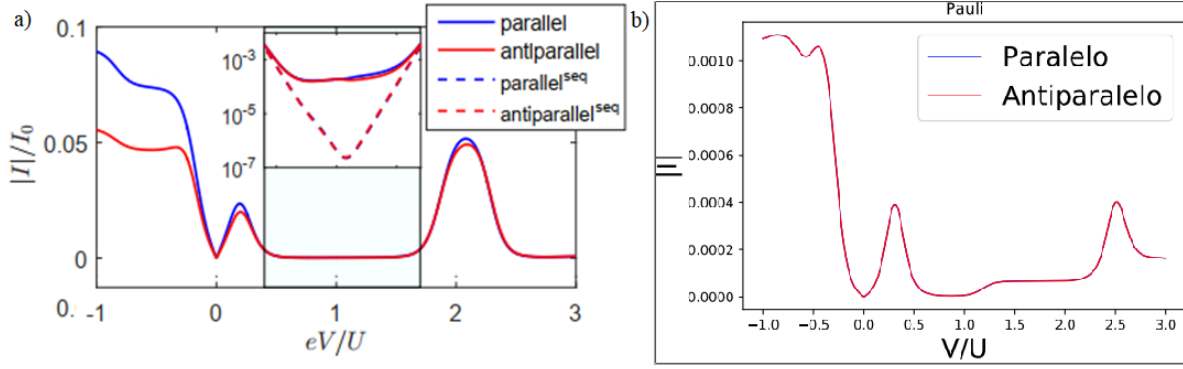


Figura 5.13: Gráficas de la corriente absoluta contra el voltaje bias, en a) el resultado obtenido en el artículo y en b) el obtenido al introducir el sistema al Qmeq, en ambos casos se muestra la configuración paralela y antiparalela de la magnetización de las guías.

### 5.3. Elaboración de un sistema propio: sistema bow tie

En esta sección se pensó en un modelo novedoso en el que se pudieran estudiar los efectos en los que estamos interesados, por lo cual se decidió estudiar un modelo de cinco puntos cuánticos acoplados, de forma que se formen dos caminos cerrados tipo moño (bow tie) dentro de los cuales se aplicara un campo magnético independiente en cada uno como se muestra en la figura 5.14

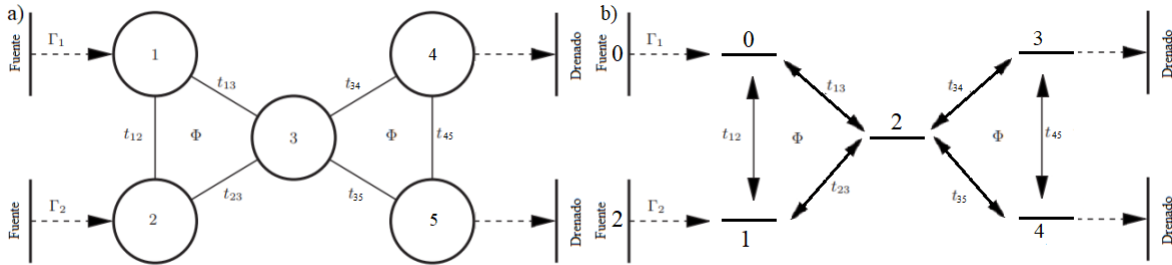


Figura 5.14: Modelo de cinco puntos cuánticos elegido para estudiar los fenómenos de dark states y Aharonov-Bohm, en a) se muestra el arreglo de los puntos y los campos magnéticos izquierdo y derecho que pueden aplicarse, y en b) se especifican los estados energéticos y la numeración usada con el Qmeq.

Esta configuración permitirá observar los efectos de Aharonov-Bohm en dos partes del sistema y ver como interaccionan las dos interferencias en conjunto o por separado, además de que se pueden obtener dark states como en el artículo de la sección 5.2.1 con la elección de los parámetros  $t_{35}$  y  $t_{45}$  como cero, lo cual permite el paso de corriente, pero sin formar el segundo camino cerrado, lo cual no causa la segunda interferencia.

El primer paso para resolver el sistema elegido es plantear el hamiltoniano que describa el arreglo de puntos cuánticos, el cual esta dado de forma general por:

$$H = H_{Guas} + H_{Puntos} + H_{Tunelaje} \quad (5.7)$$

De donde  $H_{Guas}$  corresponde a la energía de las guías, que de forma explícita esta descrito por:

$$H_{Guas} = \sum_{\alpha=L,R;k} \varepsilon_{\alpha k} c_{\alpha k}^{\dagger} c_{\alpha k} \quad (5.8)$$

Donde  $c_{\alpha k}^{\dagger}$  ( $c_{\alpha k}$ ) representa la creación (aniquilación) de un electrón de energía  $\varepsilon$  con momento  $k$  del electrodo  $\alpha$ .

El siguiente término  $H_{Puntos}$  describe la energía de los puntos cuánticos y sus interacciones, el cual esta compuesto como lo indica la ecuación 3.3 por lo tanto se tiene para los cinco puntos cuánticos:

$$H_{Puntos} = \sum_{j=1}^5 \varepsilon_j d_j^{\dagger} d_j + (t_{13} d_1^{\dagger} d_3 + t_{23} d_2^{\dagger} d_3 + t_{12} e^{i\phi_L} d_1^{\dagger} d_2 + t_{34} d_3^{\dagger} d_4 + t_{35} d_3^{\dagger} d_5 + t_{45} e^{i\phi_R} d_4^{\dagger} d_5) + \sum_{ij} U_{ij} d_j^{\dagger} d_i^{\dagger} d_i d_j \quad (5.9)$$

Con  $i \neq j$ ;  $d_j^{\dagger}$  ( $d_j$ ) representa la creación (destrucción) de un electrón en el punto de partícula única  $j$  con energía  $\varepsilon$ , los valores de  $t$  corresponden a los valores de tunelaje entre los puntos cuánticos indicados por los subíndices,  $U$  representa la interacción coulombiana entre los puntos cuánticos  $ij$ , y  $\phi$  indica la fase de Aharonov-Bohm, la cual se define como:

$$\phi = \oint A \cdot dl = 2\pi \frac{\Phi_{\alpha}}{\Phi_0} \quad (5.10)$$

Siendo  $\Phi$  el campo aplicado dentro de los caminos cerrados del modelo,  $\alpha = L, R$  indica el lado izquierdo o derecho respectivamente y  $\Phi_0$  es el flujo cuántico definido como  $\Phi_0 = h/e$  pero al usar las constantes normalizadas en el Qmeq, este valor será igual a 1.

La última parte del hamiltoniano es la referente al tunelaje, el cual esta dado por:

$$H_{Tunelaje} = \sum_k t_{L1} d_1^{\dagger} c_{Lk} + t_{L2} d_2^{\dagger} c_{Lk} + t_{R4} d_4^{\dagger} c_{Rk} + t_{R5} d_5^{\dagger} c_{Rk} + H.c \quad (5.11)$$

Del cual  $L$  y  $R$  indican el lado izquierdo y derecho de las uniones túnel con la fuente y el drenado y  $t$  es la amplitud de tunelaje de los puntos cuánticos con el ambiente. Además, siguiendo las aproximaciones indicadas en la sección 3.3 la tasa de tunelaje esta dada por  $\Gamma_{\alpha i} = 2\pi\nu_F |t_{\alpha i}|^2$

Los valores de los parámetros serán elegidos con base a la experiencia adquirida con los ejemplos trabajados y los modelos replicados, por lo que los valores escogidos se muestran en la tabla 5.3

Parámetro	Notación	Valor
Temperatura	temp	0.001
Ancho de banda	dband	$10^4$
Tasa de tunelaje	gam	1
Energía punto cuántico 1	E1	0
Energía punto cuántico 2	E2	0
Energía punto cuántico 3	E3	5
Energía punto cuántico 4	E4	0
Energía punto cuántico 5	E5	0
Acoplamiento entre estados 12	t12	gam
Acoplamiento entre estados 13	t13	gam
Acoplamiento entre estados 23	t23	gam
Acoplamiento entre estados 34	t34	gam
Acoplamiento entre estados 35	t35	gam
Acoplamiento entre estados 45	t45	gam
Interacción coulombiana	U	1
Voltaje gate	gate	0
Voltaje bias	bias	40
Potencial químico izquierdo	mul	$V_{bias}/2$
Potencial químico derecho	mur	$-V_{bias}/2$
Campo magnético izquierdo	phil	0
Campo magnético derecho	phir	0

Tabla 5.3: Tabla de valores iniciales del modelo de cinco puntos cuánticos

Los valores mostrados en la tabla corresponden al valor inicial de cada parámetro, sin embargo, para estudiar el comportamiento del sistema se irán realizando cambios en algunos de ellos.

De comienzo, nos interesa conocer el comportamiento de la corriente al variar el voltaje bias, el cual, como puede verse en los valores de la tabla 5.3 modifica los valores de los potenciales químicos izquierdo y derecho, también podemos ver el cambio de comportamiento al variar los valores de acoplamiento entre los puntos cuánticos, y por último, ver las diferencias al resolver con las distintas ecuaciones maestras de primer orden. Los resultados se muestran en la figura 5.15

En estos resultados podemos observar como en a) al variar a valores menores de acoplamiento, la curva de corriente disminuye su intensidad, ya que es más complicado realizar el tunelaje entre los puntos cuánticos. En b) notamos que las ecuaciones de Lindblad, Redfield y von Neumann de primer orden muestran resultados muy similares, sin embargo, la ecuación de Pauli, a pesar de que sigue un poco el comportamiento de la curva de las otras ecuaciones, contiene muchas variaciones en los valores de la corriente, este

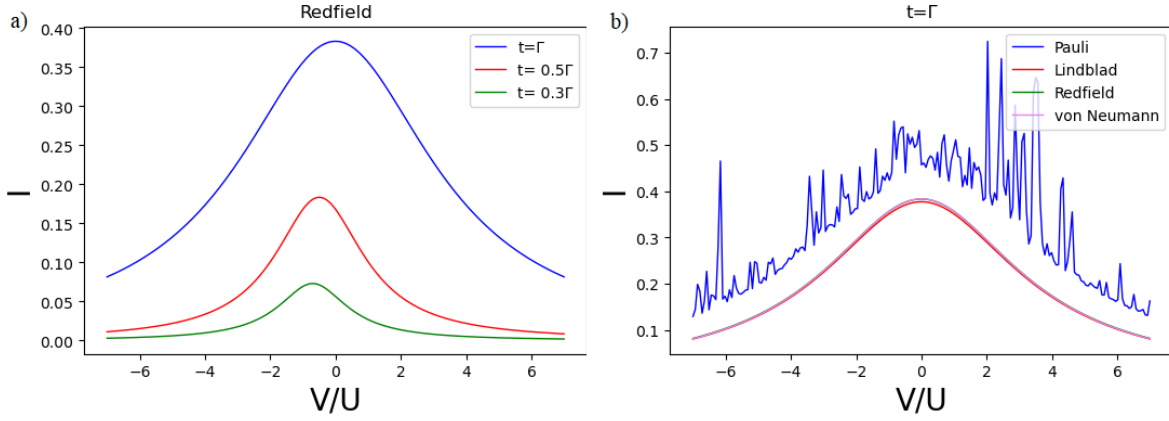


Figura 5.15: Resultados del comportamiento de la corriente al variar el voltaje bias en a) con valores distintos de acoplamiento entre los puntos cuánticos y en b) con los valores iniciales pero resuelto con las distintas ecuaciones maestras de primer orden.

comportamiento se atribuye a que la ecuación de Pauli no toma en cuenta los valores de la población, que corresponden a los valores de los acoplos entre los puntos cuánticos, por lo que no logra describir satisfactoriamente los cambios de corriente.

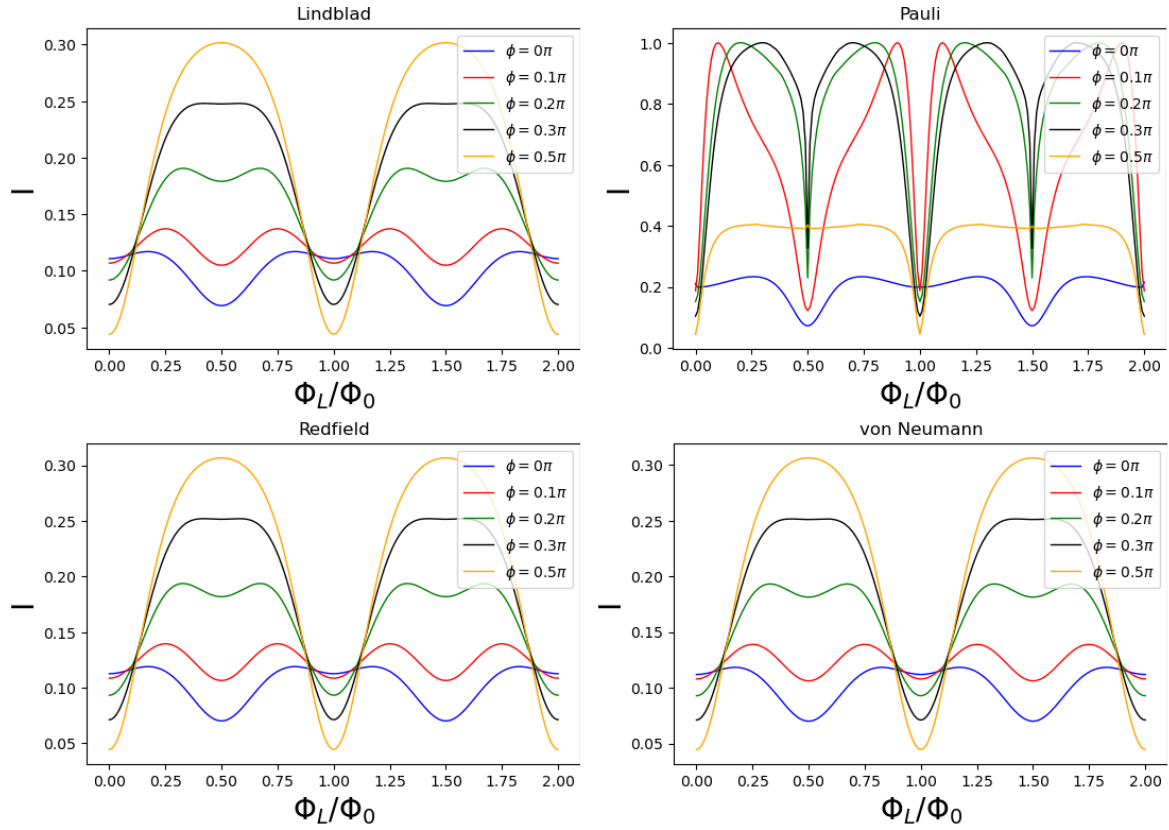


Figura 5.16: Gráficas del comportamiento de la corriente al variar el campo magnético del lado izquierdo dejando fijo el valor del campo magnético del lado derecho, en a) con la ecuación de Lindblad, en b) con la ecuación de Pauli, en c) resolviendo con la ecuación de Redfield y en d) con von Neumann de primer orden

El siguiente comportamiento que nos interesa es observar los efectos de Aharonov-Bohm y los dark states, por lo que se aplicaran distintos valores a los campos magnéticos izquierdo y derecho por separado mientras se deja el otro campo magnético con valor fijo. Los resultados obtenidos con cada ecuación maestra se muestran en la figura 5.16 para los cambios en el campo magnético izquierdo y en la figura 5.17 para las variaciones en el campo magnético derecho.

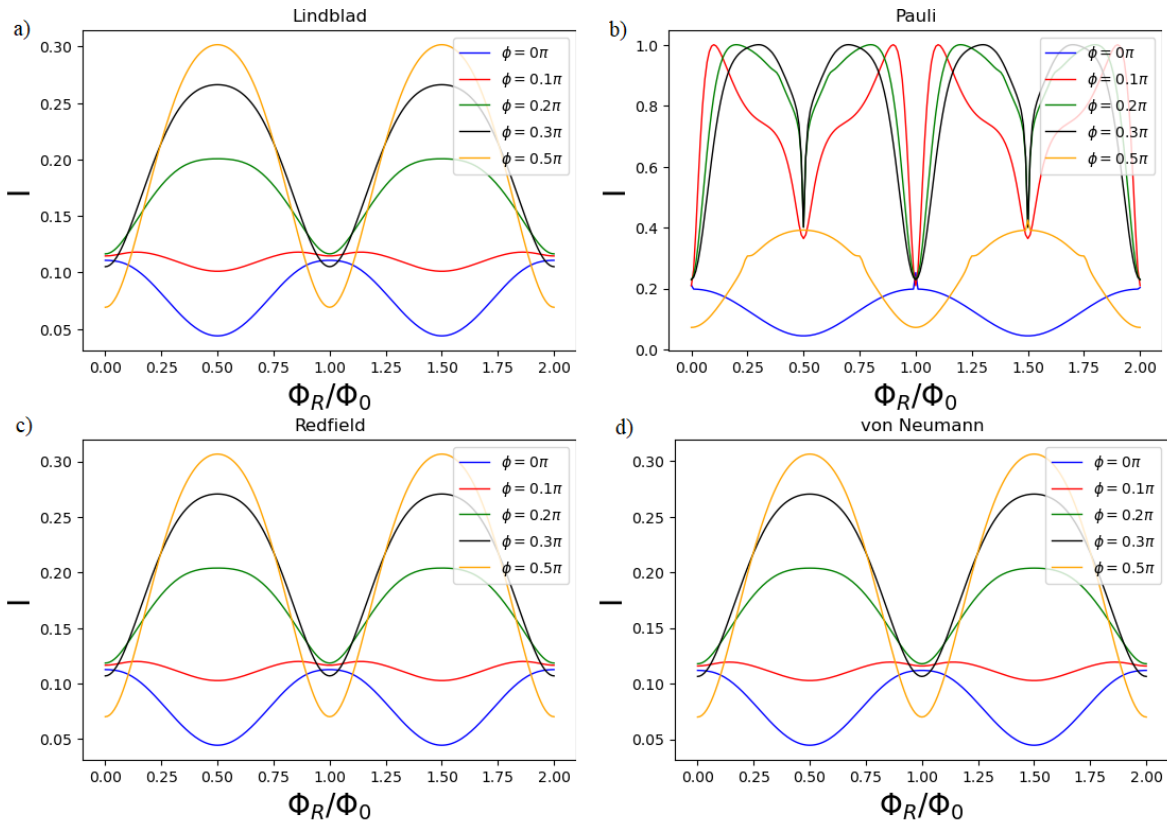


Figura 5.17: Resultados de el comportamiento de la corriente al variar el campo magnético derecho mientras se deja fijo el campo magnético izquierdo resolviendo con la ecuación maestra de a) Lindblad, b) Pauli, c) Redfield y d) von Neumann de primer orden.

Al variar el campo magnético del lado izquierdo  $\phi_L$  mientras se mantiene  $\phi_R$  en un valor fijo, se pueden ver oscilaciones en la corriente debido al efecto Aharonov-Bohm. En estas gráficas se muestra como la ecuación de Pauli no describe el correcto comportamiento de la corriente, mientras que las otras tres ecuaciones arrojan resultados casi idénticos. En cuanto al comportamiento, en  $\Phi_L/\Phi_0 = 0,5$  la corriente puede pasar de un valor mínimo con  $\phi_R = 0$  a un valor máximo con  $\phi_R = 0,5\pi$ , si se sigue aumentando el valor del campo magnético derecho la curva comienza a bajar de valor. Para el valor de  $\Phi_L/\Phi_0 = 1$  es el valor mínimo para todos los valores de los campos magnéticos, excepto cuando  $\phi_R = 0$ .

En cuanto a los resultados obtenidos al dejar fijo el campo magnético izquierdo y variar el campo magnético derecho figura 5.17 se nota que igualmente la ecuación de Pauli

no describe correctamente el comportamiento de la corriente, además, a diferencia de los resultados obtenidos al variar el campo magnético izquierdo, en este caso no se va formando el dark state en 0.5 como en 5.16 si no que la corriente va disminuyendo de valor conforme el valor del campo magnético izquierdo hasta cambiar a valores negativos a valores muy cercanos a  $\phi = 0$ .

El comportamiento en la variación de los campos magnéticos por separado es muy similar, el valor mínimo con  $\phi = 0$  se vuelve el valor máximo para  $\phi = 0,5\pi$  y los valores mínimos de cada gráfica para  $\Phi_L/\Phi_0 = 1$ .

Interesados con observar el comportamiento de la corriente para cada uno de los valores de campo magnético tanto izquierdo como derecho, se genero un ciclo iterativo que nos pudiera arrojar los valores para cada campo con lo que se obtuvo un gráfico en tres dimensiones realizado con el software Wolfram Mathematica [41] el cual se muestra en la figura 5.18

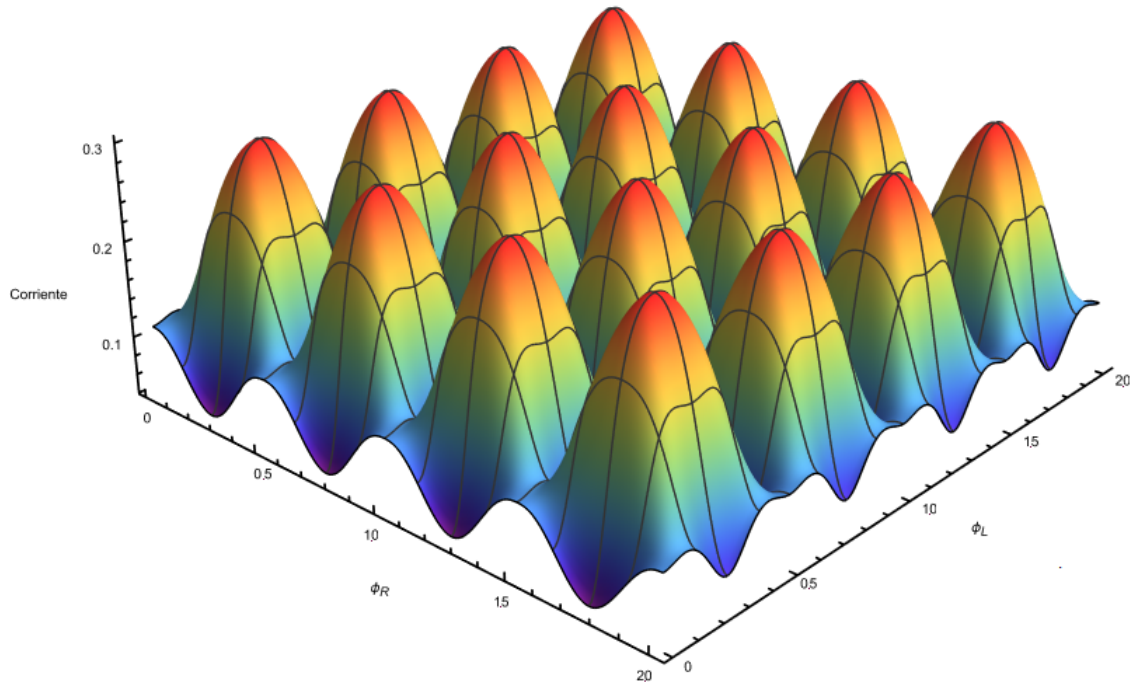


Figura 5.18: Comportamiento de la corriente al variar ambos campos magnéticos simultáneamente desde una vista 3D.

Ahora, al haber visto como cambia la corriente al variar independientemente cada uno de los campos magnéticos, nos interesa ver como seria la interferencia al ir variando ambos campos simultáneamente, pero también como cambia si se elije un valor distinto de energía en el punto cuántico 3, lo cual se logra si se modifica el voltaje gate, con lo que se obtienen las gráficas de la figura 5.19.

Para resolver este caso se eligió la ecuación maestra de Lindblad y en el resultado se ve como la interferencia entre los dos campos magnéticos forman dark states mas marcados, como en el caso de  $\varepsilon_3 = 9$ , pero también, al ir aumentando la energía del punto cuántico 3, se vuelve mas complicado el paso de los electrones por el sistema por lo

que los valores de la corriente van disminuyendo cada vez mas hasta llegar al punto del bloqueo coulombiano donde ya no haya flujo de corriente.

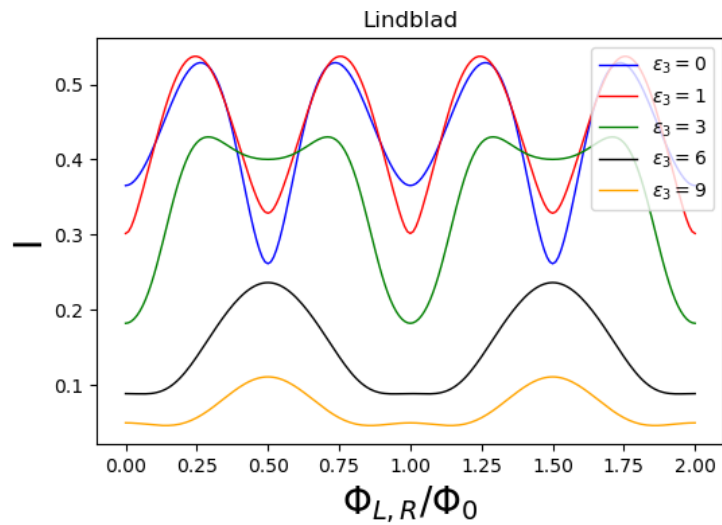


Figura 5.19: Comportamiento de la corriente al variar ambos campos magnéticos simultáneamente para varios valores de energía en el punto cuántico 3.





# Capítulo 6

## Conclusiones

En esta tesis se estudió el transporte electrónico en puntos cuánticos en distintas configuraciones de puntos cuánticos cambiando la geometría y el número de puntos en el sistema con el objetivo de aprovechar las propiedades cuánticas que aparecen al trabajar a escala nanométrica, esto permitirá el posible futuro desarrollo de nuevos dispositivos electrónicos más eficientes y de menor tamaño.

Los sistemas que se estudiaron fueron el sistema de un solo punto cuántico con consideración de espín, dos puntos cuánticos en serie, tres puntos cuánticos en serie con espín, tres puntos cuánticos en configuración triangular con uno o dos puntos conectados a la terminal fuente y uno solo punto cuántico a la terminal drenado, por último, se desarrolló un sistema novedoso de cinco puntos cuánticos. Todo esto nos ayudó a comprender desde el correcto planteamiento matemático, como puede ser simulado, que técnicas de análisis se pueden usar para resolverlos y cual es el comportamiento de la corriente debido a los dark states y el efecto Aharonov-Bohm.

En particular, el sistema de cinco puntos cuánticos muestra una disminución y corrimiento en el valor máximo de la corriente al disminuir el acoplamiento entre los puntos cuánticos mientras se varía el voltaje bias en el sistema sin emplear ningún campo magnético.

Al tener este sistema quintuple una geometría en la que se forman dos caminos cerrados, se aplicó en cada uno de estos caminos un campo magnético independiente del otro, los cuales fueron variados primero el campo del lado izquierdo, luego el campo del lado derecho y al final variar los dos simultáneamente. Al variar el lado izquierdo se obtiene una oscilación en la corriente donde se puede tener un valor máximo de corriente cuando los dos campos magnéticos coinciden en  $L * 0,5\pi$  con  $L = 0, 1, 2, \dots$ , formando una oscilación con forma de  $M$  cada valor del campo  $\pi$ . Cuando se varía el campo magnético del lado derecho el valor mínimo de corriente se mantiene para valores del campo de 0 hasta 0.1, después el valor mínimo se vuelve valor máximo; este tipo de comportamiento puede servir para crear dispositivos electrónicos lógicos de un tamaño muy reducido los cuales al controlar el campo magnético se pueda controlar el valor de corriente.

Por último se variaron ambos campos magnéticos y se observó como cambia el com-

portamiento de la corriente al modificar la energía del punto cuántico central (punto 3) con lo que se obtuvo comportamientos muy distintos en los que algunos mostraban zonas de interferencia en la que se formaron dark states más marcados.

Con estos resultados obtenidos se cumplieron los objetivos planteados de simular el transporte electrónico en puntos cuánticos y observar los efectos de dark states y Aharonov-Bohm en un sistema propio y novedoso por lo que se está escribiendo un artículo sobre el tema, el cual se espera publicar en una revista indizada.

# Bibliografía

- [1] Rolf E. Hummel, *Electronic properties of materials*, Springer, 2012.
- [2] Luis Farrera G., *Conductores semiconductores y aislantes*, <https://www.rua.unam.mx/portal/recursos/ficha/19791/conductores-semiconductores-y-aislantes>.
- [3] Brus, L *Electronic Wave Functions in Semiconductor Clusters: Experiment and Theory*. The Journal of Physical Chemistry. 90(12): 2555–2560, 1986.
- [4] Ana Isabel Sánchez Solís, *Síntesis y caracterización de puntos cuánticos de PbSe con aplicaciones en celdas fotovoltaicas con configuración FTO/TiO<sub>2</sub>/CdS/PbSe/ZnS*, Tesis de maestría en ciencias, Centro de investigaciones en óptica, 2016
- [5] DS Kumar, BJ Kumar, HM Mahesh *Quantum nanostructures (QDs): an overview* Synthesis of Inorganic Nanomaterials, 59-88, 2018.
- [6] Murphy CJ, Coffey JL. *Quantum Dots: A Primer*. Applied Spectroscopy, 56(1), 16A-27A, 2002.
- [7] Lydia L. Sohn Leo P. Kouwenhoven Gerd Schön, *Mesoscopic Electron Transport: Chapter 4*, Springer, 105-214, 1997.
- [8] Fotios Avgidis, *Single charge transport and charge sensing in quantum dots*, Bachelor of science thesis, University of Twente, 2016.
- [9] Andreas Fuhrer, Carina Fasth, *Coulomb blockade in Quantum Dots*, Lund University, 1-16, 2007.
- [10] I. Weymann, B. R. Bułka, and J. Barnaś, *Dark states in transport through triple quantum dots: The role of cotunneling*, Phys. Rev. B, 83(19), 195302, 2011.
- [11] Emary, Clive, *Dark states in the magnetotransport through triple quantum dots*, Phys. Rev. B, 76(24), 245319, 2007.
- [12] Wrześniewski, Kacper and Weymann, Ireneusz, *Influence of Magnetic Field on Dark States in Transport through Triple Quantum Dots*, Acta Physica Polonica A, 132, 108-111, 2017.

- [13] Qiong Wang, Jun Liu, Ning Tang and Hao-Sheng Zeng, *Dark states and Aharonov—Bohm oscillations in multi-quantum-dot systems*, Chinese Phys. B, 20(2), 020303, 2011.
- [14] Y. Aharonov and D. Bohm, *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, Phys. Rev., 115(3), 485-491, 1959.
- [15] Ricardo Heras, *Classical nonlocality and the Aharonov-Bohm effect*, arXiv:1902.01694 [physics.class-ph], 2019.
- [16] Akira Tonomura, Nobuyuki Osakabe, Tsuyoshi Matsuda, Takeshi Kawasaki, and Junji Endo, *Evidence for Aharonov-Bohm Effect with Magnetic Field Completely Shielded from Electron wave*, Physical Review Letters, 56(8), 792-795, 1986.
- [17] Oliver Orasch, *The Aharonov-Bohm-Effect*, Karl-Franzens-Universität Graz, Bachelor Thesis, 2014.
- [18] Peshkin M, *The Aharonov-Bohm effect Part one: Theory. In: Peshkin M., Tonomura A. (eds) The Aharonov-Bohm Effect. Lecture Notes in Physics*, vol 340. Springer, Berlin, 1989.
- [19] Gediminas Kiršanskas, Jonas Pedersen, Olov Karlström, Martin Leijnse, Andreas Wacker, *QmeQ 1.0: An open-source Python package for calculations of transport through quantum dot devices*, Computer Physics Communications, 221, 317–342,(2017).
- [20] Goldozian, B., Damtie, F., Kiršanskas, G. *Transport in serial spinful multiple-dot systems: The role of electron-electron interactions and coherences*. Sci Rep 6, 22761, 2016.
- [21] William W. Parson, *Resonance Energy Transfer*, Springer Berlin, 2007.
- [22] Kacper Wrześniewski, Ireneusz Weymann, *Influence of Magnetic Field on Dark States in Transport through Triple Quantum Dots*, Acta physica polonica a, 132(1),109-111, 2017.
- [23] Yang, X., Liu, Y. *Multiple-path Quantum Interference Effects in a Double-Aharonov-Bohm Interferometer* Nanoscale Res Lett 5, 1228, 2010.
- [24] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal, *Quantum Monte Carlo simulations of solids* Rev. Mod. Phys. 73(1), 33-83, 2001.
- [25] Konstantin Kikoin and Yshai Avishai, *Kondo Tunneling through Real and Artificial Molecules* Phys. Rev. Lett. 86(10), 2090-2093, 2001.
- [26] V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, and P. I. Arseyev, *Charge trapping in the system of interacting quantum dots* Solid State Commun. 168, 36-41, 2013.
- [27] Christina Pörtl, Clive Emary, and Tobias Brandes, *Two-particle dark state in the transport through a triple quantum dot*, Phys. Rev. B 80(11), 115313, 2009.

- [28] Babae Tooski, Sahib and Bulka, Bogdan, *Dark States and Transport through Quantum Dots*, Acta Physica Polonica a, 121(5), 1231-1233, 2012.
- [29] James G. Simmonds, James E. Mann, Jr. *A First Look at Perturbation Theory*, Courier Corporation, New York, 1998.
- [30] Daniel Manzano, *A short introduction to the Lindblad master equation*, AIP Advances, 10(2), 1-28, 2020.
- [31] Allen, M. *The sage encyclopedia of communication research methods*, (Vols. 1-4). Thousand Oaks, CA: SAGE Publications, 2017.
- [32] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Commun. Math. Phys. 48, 119-130, 1976.
- [33] Yaşar Demirel, Vincent Gerbaud, *Nonequilibrium Thermodynamics (Fourth Edition)*, Elsevier, 2019.
- [34] G. Kirsanskas, M. Franckić, and A. Wacker, *A phenomenological position and energy resolving Lindblad approach to quantum kinetics (in preparation)*, Physical Review B, 97(3), 035432-1-035432-16, 2018.
- [35] J.R. Johansson, A.J.G. Pitchford, C. Granade, A.L. Grimsmo, N. Shammah, S. Ahmed, N. Lambert, B. Li, J. Lishman, S. Cross, and E. Giguère *QuTiP: Quantum Toolbox in Python Userguide*, 2011.
- [36] Andrey R. Kolovsky, *Quantum entanglement and the Born-Markov approximation for an open quantum system*, Physical Review E, 101(6), 062116-1-062116-5, 2020.
- [37] Harbola, U., Esposito, M., Mukamel, S. *Quantum master equation for electron transport through quantum dots and single molecules*. Physical Review B, 74(23), 235309, 2006.
- [38] Wenderoth, S., Bätge, J., Härtle, R. *Sharp peaks in the conductance of a double quantum dot and a quantum-dot spin valve at high temperatures: A hierarchical quantum master equation approach*. Physical Review B, 94(12), 121303, 2016.
- [39] Nilo Ney Coutinho Menezes, *Introducción a la programación con python: Algoritmos y lógica de programación para principiantes*, Novatec, Sao Paulo, 2014.
- [40] K. Wrześniewski and I. Weymann, *Dark states in spin-polarized transport through triple quantum dot molecules*, Phys. Rev. B, 97(7), 075425, 2018.
- [41] Wolfram Research, Inc., Mathematica, Version 12.3, Champaign, IL (2021).

# Resumen

En el transporte electrónico en puntos cuánticos pueden aparecer algunos efectos particulares dependiendo de las características específicas del sistema como la geometría o la presencia de campos magnéticos. En este trabajo nos interesamos por estudiar el efecto de los dark states y el efecto de Aharonov-Bohm, los cuales pueden usarse para el control de la corriente en los sistemas de puntos cuánticos.

Esta tesis está ordenada de forma que, en el capítulo 1, se dan las bases teóricas necesarias para entender los fundamentos físicos que nos permiten entender de mejor manera el transporte electrónico en puntos cuánticos. En el capítulo 2 se describen los efectos cuánticos de dark states y de Aharonov-Bohm. En el capítulo 3 se explica el planteamiento analítico de los arreglos de puntos cuánticos, aquí notamos como incrementando el número de grados de libertad o de puntos cuánticos las ecuaciones se vuelven cada vez más complicadas, además, para resolver las ecuaciones utilizamos las ecuaciones maestras de Pauli, Lindblad, Redfield y von Neumann haciendo de los cálculos un proceso, en general, largo y tedioso, por lo que, en el capítulo 4, se presenta la opción del modelado computacional como una excelente alternativa. En nuestro estudio se usó de punto de partida el paquete de código Qmeq, (por sus siglas en inglés Quantum master equation for quantum dot transport), el cual está escrito en el lenguaje de programación Python y usa las ecuaciones maestras de Pauli, Lindblad Redfield y la ecuación de von Neumann de primer y segundo orden.

Finalmente, en el capítulo 5 se desarrolla el trabajo de modelado comenzando con algunos ejemplos modificados del Qmeq, seguido de la obtención de resultados de dos sistemas triangulares y la comparación con resultados obtenidos en artículos publicados, y se termina con el desarrollo de un sistema de cinco puntos cuánticos acoplados de manera que formen dos caminos cerrados, dentro de los cuales se aplican dos campos magnéticos independientes, permitiendo el estudio de los efectos de interés.

# Abstract

In the electronic transport in quantum dots may appear many particular effects depending on the features of the system, the geometry, or the presence of magnetic fields. In this work, we are interested in dark states and the Aharonov-Bohm effect, which can be used to control the current in the system of quantum dots.

This thesis is organized as, in chapter 1 the theoretic background of physics that allow us to better understand the electronic transport in quantum dots. In chapter 2 we describe the dark states and the Aharonov-Bohm effect. In chapter 3 the analytic approach of quantum dots arrays is explained, here we note that as we increment the number of degrees of freedom or the number of quantum dots the equations become more complex, as well, the solution of these equations is obtained by the Pauli, Lindblad, Redfield and von Neumann master equations, making the calculations, in general, difficult and tedious, because of that, in chapter 4 the computational modeling is presented as a the perfect option to solve it. In our study, we used as a start point the Qmeq package (Quantum master equation for quantum transport), which was written on Python, and use the Pauli, Lindblad, Redfield master equations and von Neumann for first and second order.

Finally, in chapter 5 we develop the modeling work beginning with some modified examples of the Qmeq package, after that we obtain two results of triangular systems and we compare them with articles published. We finish with the development of a bow tie system which consists of five quantum dots coupled creating two closed paths inside of which we apply two independent magnetic fields, allowing the study of the effects of interest.