

Tesis Doctoral

Relaciones de fluctuación-disipación y temperaturas efectivas en transporte cuántico dependiente del tiempo

Caso, Alvaro

2012

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

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

Cita tipo APA:

Caso, Alvaro. (2012). Relaciones de fluctuación-disipación y temperaturas efectivas en transporte cuántico dependiente del tiempo. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

Cita tipo Chicago:

Caso, Alvaro. "Relaciones de fluctuación-disipación y temperaturas efectivas en transporte cuántico dependiente del tiempo". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2012.

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

**Relaciones de fluctuación-disipación y
temperaturas efectivas en transporte cuántico
dependiente del tiempo**

Trabajo de Tesis para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas

por Álvaro Caso

Director de Tesis: Dr. Gustavo S. Lozano

Consejera de estudios: Dra. Victoria I. Bekeris

Buenos Aires, 2012

A Nini.

Resumen

En este trabajo de Tesis se estudian los conceptos de *temperatura local* y *temperatura efectiva* en sistemas mesoscópicos fuera del equilibrio. Para definir y estudiar estos conceptos se eligió como ámbito el estudio del transporte cuántico en sistemas mesoscópicos llevados fuera del equilibrio mediante la aplicación de potenciales externos que presentan una dependencia armónica en el tiempo.

En el Capítulo 1 se introducen los sistemas mesoscópicos. Se describe el área de la física denominada *transporte cuántico* y se mencionan las magnitudes físicas relevantes, las escalas de longitud y energía características y se describen algunos de los métodos de fabricación de este tipo de dispositivos. Además se presenta el dispositivo que se estudiará en este trabajo.

En el Capítulo 2 se introduce el formalismo utilizado para el tratamiento de un problema general de transporte cuántico. El mismo se basa en el denominado formalismo de Keldysh de funciones de Green de no-equilibrio. Se hace una formulación Hamiltoniana del problema general de transporte cuántico y se encuentran expresiones para las corrientes de carga y de calor.

En el Capítulo 3 se presenta la definición de *temperatura local* (T_{IP}) mediante la inclusión de una punta de prueba que actúa como termómetro. Se encuentran expresiones analíticas para esta temperatura en el régimen en el que la frecuencia Ω_0 de los potenciales externos es mucho más pequeña que la temperatura T de los reservorios ($\Omega_0 \ll T$). También se muestran expresiones explícitas para el caso opuesto ($\Omega_0 \gg T$). Se estudia su comportamiento a lo largo del sistema y su relación con el flujo de calor. Además se estudia la validez de la ley de Wiedemann-Franz, que relaciona la conductancia eléctrica con la térmica, para este sistema fuera del equilibrio.

En el Capítulo 4 se estudia la posibilidad de definir una *temperatura efectiva* (T^{eff}) a través de una relación de fluctuación-disipación (RFD) local para funciones de Green

de una partícula. Se encuentra una expresión analítica en el límite de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) que coincide exactamente con la obtenida para la temperatura local.

En el Capítulo 5 se estudia la posibilidad de definir otra temperatura efectiva (T^{eff*}) a través de una RFD para funciones de correlación corriente-corriente. Para ello, en primer lugar se calculan dichas funciones de correlación dentro del formalismo de Keldysh. Las expresiones obtenidas son comparadas con las correspondientes al formalismo de matriz de dispersión y se muestra analíticamente que coinciden. Una vez calculadas las funciones de correlación se estudia el comportamiento de la temperatura efectiva y se la compara con la temperatura local T_{IP} . Se muestra que coinciden en el régimen de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$), en el cual además T_{IP} coincide con la temperatura efectiva T^{eff} definida a partir de una RFD para funciones de Green de una partícula. Es decir que en este régimen todas las definiciones estudiadas de temperatura coinciden.

El Capítulo 6 está destinado a los últimos comentarios, discusión de los resultados y conclusiones. En los Apéndices A y B se encuentran los detalles de algunos de los cálculos realizados a lo largo de este trabajo.

Palabras clave: Transporte Electrónico en Sistemas Mesoscópicos, Temperatura Efectiva, Procesos y Fenómenos de Ruido.

Fluctuation-dissipation relations and effective temperatures in time-dependent quantum transport

Abstract

In this thesis we study the concepts of *local temperature* and *effective temperature* in mesoscopic systems out of equilibrium. We study these concepts within the framework of quantum transport in mesoscopic systems driven out of equilibrium by harmonically time-dependent external potentials.

In Chapter 1 we present the definition of mesoscopic system and we describe the area of physics called *quantum transport*. We establish the relevant physical quantities, length and energy scales and describe some of the fabrication methods for these devices. In addition we present the device which will be studied in this work.

In Chapter 2 we introduce the formalism employed to study the problem of quantum transport. It is based in the Keldysh non-equilibrium Green's function formalism. We establish the Hamiltonian formulation of the general problem of quantum transport and we find expressions for charge and heat currents.

In Chapter 3 we introduce the definition of *local temperature* (T_{IP}) via the inclusion of a probe that acts as a thermometer. We find analytical expressions for this temperature in the regime where the frequency Ω_0 of the external potentials is much lower than the temperature T of the reservoirs ($\Omega_0 \ll T$). We also give explicit expressions for the opposite case ($\Omega_0 \gg T$). We study its behavior along the system and its relation to the heat current. In addition we study the validity of the Wiedemann-Franz law, which relates charge and heat conductances, for this system out of equilibrium.

In Chapter 4 we study the possibility of defining an *effective temperature* (T^{eff}) through a local fluctuation-dissipation relation (FDR) for one-particle Green's functions. We find an analytic expression in the low frequency limit ($\Omega_0 \ll T$) which is exactly the same found for the local temperature.

In Chapter 5 we study the possibility of defining another effective temperature (T^{eff*}) by means of a FDR for current-current correlation functions. To do this, first we calculate those correlation functions within the Keldysh formalism. The expressions are compared with the ones obtained within the scattering matrix approach and we show analytically that both coincide. We study the behavior of this effective temperature and compare it to the local temperature T_{lP} . We show that both coincide in the low frequency regime ($\Omega_0 \ll T$), in which in addition T_{lP} coincides with the effective temperature T^{eff} defined from a FDR for one-particle Green's functions. This means that in this regime all the proposed definitions of temperature coincide.

Chapter 6 is devoted to final remarks, discussion and conclusions. In the Appendices A and B we find details of some of the calculations done for this work.

Keywords: Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Effective Temperature, Noise Processes and Phenomena

Índice general

Resumen	I
Abstract	III
1. Introducción	1
1.1. Motivación	2
1.2. Sistemas mesoscópicos y transporte cuántico	3
1.3. Métodos de fabricación	5
1.4. Dispositivo estudiado	6
2. Formalismo Teórico	11
2.1. Funciones de Green de no equilibrio	11
2.1.1. Formulación de Keldysh	18
2.1.2. Espacio de Keldysh y forma triangular	22
2.1.3. Continuación analítica y teorema de Langreth	25
2.2. Aplicación a problemas de transporte cuántico	29
2.2.1. Formulación Hamiltoniana	30
2.2.2. Cálculo de corrientes	31
2.2.3. Cálculo de funciones de Green	34
2.2.4. Solución de la Ecuación de Dyson	41
2.2.5. Algunas fórmulas útiles	44

3. Temperatura local en Bombeadores Cuánticos	49
3.1. Modelo	49
3.2. Definición de temperatura local	52
3.2.1. Resultados	56
3.3. Definición alternativa de temperatura local	58
3.4. La temperatura local y el flujo de calor	62
3.5. Conductancias eléctrica y térmica y la ley de Wiedemann-Franz generalizada	66
3.6. Conclusiones	73
4. Relaciones de fluctuación-disipación y temperatura efectiva	75
4.1. Motivación	76
4.2. Temperatura efectiva a partir de funciones de Green de una partícula	76
4.3. Temperatura efectiva y temperatura local	78
4.4. Conclusiones	81
5. Funciones de correlación y temperatura efectiva	83
5.1. Motivación	83
5.2. Funciones de Green de operadores corriente	84
5.3. Funciones de correlación corriente-corriente y ruido	85
5.4. Temperatura efectiva a partir de funciones de correlación	86
5.5. Cálculo de las funciones de correlación	87
5.6. Comparación de la temperatura efectiva con la local	90
5.7. Conclusiones	94
6. Conclusiones	97
Apéndices	
A. Cálculo de la temperatura local variando T_P y μ_P	101
B. Cálculo de funciones de correlación corriente-corriente	105
Agradecimientos	109
Lista de Trabajos Publicados	111
Bibliografía	113

Capítulo 1

Introducción

A lo largo de los últimos años hemos presenciado un creciente interés en un nuevo campo denominado *nanociencia* cuyo objetivo central es el de estudiar, fabricar y controlar dispositivos en la escala de unos pocos nanómetros. Los avances tecnológicos que permitieron la miniaturización de los circuitos electrónicos en las últimas décadas son los mismos que nos permiten hoy en día trabajar en escalas espaciales muy pequeñas y nos permiten especular que, en un futuro no muy lejano, se puedan construir dispositivos a escala atómica (denominados *nanoestructuras*) a un bajo costo y con aplicaciones interesantes.

Esta tendencia hacia la miniaturización de los dispositivos ha sido acompañada por un importante crecimiento en la actividad científica destinada a comprender, entre otras cosas, los mecanismos de transporte electrónico, de energía y de espín así como también la producción de calor y entropía en este tipo de sistemas, donde los efectos cuánticos son determinantes. Si bien la motivación tecnológica para desarrollar investigación en esta área es evidente, también existe una motivación desde la ciencia básica debido a que, en este tipo de sistemas, los conceptos más fundamentales de la mecánica estadística y la termodinámica son puestos a prueba, más aún cuando el proceso que se desea estudiar corresponde a una situación fuera del equilibrio. Es en este contexto que se desarrolla el presente trabajo de Tesis, donde pondremos especial énfasis en aspectos relacionados con transporte cuántico fuera del régimen estacionario.

1.1. Motivación

La comprensión de la producción de entropía y su conexión con la dinámica de no-equilibrio ha sido un tema central de investigación en otras áreas de la física, incluyendo los regímenes de envejecimiento (*aging*) en sistemas vidriosos, materiales granulares y coloides [1–11]. Un concepto muy exitoso utilizado en la caracterización de estados de no-equilibrio ha sido el de *temperatura efectiva*. La introducción de este concepto constituyó un hallazgo muy importante en este campo debido a que, aún cuando el sistema evoluciona fuera del equilibrio, es posible identificar un parámetro que tiene las mismas propiedades que la temperatura de un sistema en equilibrio. Más aún, en algunas ocasiones es posible formular una generalización de las relaciones de fluctuación de equilibrio con este nuevo parámetro jugando un rol en la temperatura efectiva [3–14]. Precisamente, en sistemas vidriosos, la definición de una temperatura efectiva fue introducida a través de relaciones de fluctuación-disipación generalizadas [1, 2] y la validez de una temperatura definida de esta manera como un concepto físico significativo fue corroborada al mostrar que coincide con aquella que mediría un termómetro para dichos sistemas [3, 4]. Posteriormente, la definición de temperatura efectiva a partir de una relación de fluctuación-disipación fue introducida en modelos cuánticos en las Refs. [12, 13] para sistemas vidriosos y luego explorada en el contexto de sistemas electrónicos en la Ref. [14].

Como se mencionó en el comienzo de esta introducción, a lo largo de los últimos años ha habido un creciente interés en lograr una mejor comprensión de los mecanismos de producción de calor y de flujo de energía en sistemas cuánticos fuera del equilibrio a nivel microscópico. Ejemplos de esto son los efectos termoeléctricos en contactos puntuales cuánticos (*quantum point contacts*) [15], bombeadores cuánticos forzados mediante la aplicación de potenciales alternos sobre sus paredes [16], capacitores cuánticos [17], pequeñas heteroestructuras forzadas (*driven*) [18, 19], al igual que juntas atómicas y moleculares [20], o sistemas nanomecánicos [21–24] y fotónicos [25]. En particular, consideramos que el estudio del transporte cuántico en este tipo de sistemas ofrece un contexto ideal para explorar los temas fundamentales presentados con anterioridad, como la producción de calor, el flujo de energía y las temperaturas efectivas. Sistemas particularmente interesantes son aquellos en los que potenciales alternos actúan localmente en alguna región de la muestra, que se define como “siste-

ma central”. En la práctica, este sistema central fuera del equilibrio se encuentra en contacto con cables macroscópicos que permanecen en equilibrio termodinámico y que actúan como reservorios térmicos y de partículas. Un ejemplo paradigmático de esto lo representa un punto cuántico en cuyas paredes actúan dos potenciales alternos con una diferencia de fase entre ellos. Este dispositivo se denomina *bombeador cuántico* [26–35] y tanto la idea general como su realización experimental se presentarán en la Sección 1.4.

El objetivo de este trabajo de Tesis es el de estudiar los conceptos de temperatura efectiva (definida a través de una relación de fluctuación-disipación) y de temperatura local (definida mediante el acoplamiento de un termómetro al sistema) en sistemas mesoscópicos. Para ello se eligió como sistema el bombeador cuántico.

1.2. Sistemas mesoscópicos y transporte cuántico

A principios de los años 80 la *física de sistemas mesoscópicos* emergió como un nuevo campo de investigación científica [36]. El término *mesoscópico* se utilizó con el objetivo de enfatizar la importancia de estudiar una escala espacial intermedia (*me-so*) entre la escala *microscópica* y la *macroscópica*. La idea principal es que la escala *macroscópica* está gobernada por la *física clásica*, mientras que la escala *microscópica* está regida por la *mecánica cuántica*. Por lo tanto, se consideraba que la escala mesoscópica debía corresponder a un terreno gobernado por la competencia entre estos dos regímenes. Numerosos experimentos realizados a lo largo las dos décadas posteriores al surgimiento de este campo de la física no revelaron ninguna separación clara entre la escala mesoscópica y la microscópica. Debido a la universalidad del comportamiento independientemente de la escala, este campo de la física cambió su nombre por el de *transporte cuántico*.

Existen longitudes características que permiten caracterizar el comportamiento de un sistema mesoscópico. Las más relevantes son

- la longitud de onda de Fermi λ_F ,
- la longitud de coherencia de fase L_ϕ ,
- el camino libre medio elástico l .

La longitud de onda de Fermi está relacionada con la temperatura del sistema y permite realizar una separación entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica. Cuando la separación entre partículas es mucho mayor que λ_F el sistema puede ser tratado clásicamente, mientras que si λ_F es del orden o mayor que la separación entre partículas la naturaleza cuántica del sistema no puede ser ignorada. Esto ocurre por ejemplo en heteroestructuras semiconductoras a muy baja temperatura, en las cuales la longitud de onda de Fermi puede alcanzar los 100 nm. Por otra parte, la longitud de coherencia de fase L_ϕ es la distancia dentro de la cual se conserva la fase de la función de onda. Esta es la longitud que permite definir el régimen mesoscópico, debido a que es necesario que L_ϕ sea mayor que la longitud L característica del sistema para que se trate de un sistema coherente y se pongan de manifiesto los fenómenos característicos de la interferencia cuántica. Esta longitud está relacionada con el tiempo medio entre colisiones inelásticas τ_ϕ , que puede deberse a interacción electrón-electrón o interacción electrón-fonón. Este tiempo es mayor cuanto menor es la temperatura y por lo tanto los experimentos en este tipo de sistemas suele realizarse a temperaturas del orden de los mK, resultando L_ϕ del orden del μm . Finalmente, el camino libre medio $l = v_F \tau_e$ (donde v_F es la velocidad de Fermi y τ_e es el tiempo medio entre colisiones elásticas) es la distancia promedio que recorre una partícula antes de sufrir una colisión elástica y ser dispersado en consecuencia. Dentro del transporte coherente ($L_\phi > L$) pueden distinguirse tres regímenes de acuerdo a la relación entre el tamaño L del sistema y el camino libre medio elástico l :

- Balístico: cuando el camino libre medio l entre colisiones elásticas es mayor que L ,
- Difusivo: cuando el camino libre medio l entre colisiones elásticas es menor que L ,
- Localizado: cuando el camino libre medio l entre colisiones elásticas es mucho menor que L .

A su vez, el comportamiento de un sistema es determinado por la relación entre las escalas de energía externas (determinadas por el experimento) y las internas. Si bien, como se mencionó, los principios físicos no dependen del tamaño de la estructura, las escalas internas de energía sí lo hacen y son tanto más grandes cuanto menor

son las estructuras. Esto implica que los efectos importantes del transporte cuántico, que podría observarse a temperatura ambiente en un dispositivo de escala atómica, requieren temperaturas de helio líquido ($4,2K$) o incluso temperaturas por debajo de $1K$ para ser observadas en dispositivos de mayor tamaño. No obstante las técnicas criogénicas cuentan con un avanzado nivel de desarrollo que permite acceder a estas temperaturas a un costo relativamente bajo, razón por la cual esto no resulta un inconveniente mayor a la hora de realizar los experimentos.

Debido a que la fenomenología es independiente de la escala, lo más lógico consiste en fabricar y estudiar dispositivos no tan pequeños, que resultan más fáciles de construir y de controlar. Su estudio permite comprender los efectos cuánticos y sus posibles aplicaciones antes de pasar a fabricarlos a escala atómica.

1.3. Métodos de fabricación

En esta Sección haremos una breve reseña sobre los métodos de fabricación de los sistemas mesoscópicos. En principio es necesario hacer una distinción entre el espesor de las nanoestructuras y sus dimensiones laterales. Para controlar el espesor de la nanoestructura se utilizan técnicas para fabricar películas delgadas. Para el caso de metales y aislantes se utiliza la evaporación física (*sputtering*) mientras que para semiconductores se utiliza el crecimiento epitaxial por haces moleculares (MBE) que permite, por ejemplo, crear heteroestructuras compuestas por GaAs y AlAs. Este método permite depositar controladamente los distintos elementos sobre un sustrato y, debido a que las estructuras son monitoreadas en tiempo real mediante difracción de rayos X, el proceso de fabricación puede ser controlado cuidadosamente, obteniéndose altos niveles de pureza. Mediante la aplicación de este método es posible lograr que el camino libre medio l sea de algunas decenas de μm y en consecuencia el transporte electrónico resulte balístico en regiones bastante grandes.

Por otra parte, las dimensiones laterales de las nanoestructuras están determinadas por técnicas litográficas. Existen distintas variantes de estas técnicas, pero esencialmente son todas similares. Usualmente el primer paso consiste en cubrir el sustrato con un polímero. El mismo es expuesto a un haz (que puede ser de radiación electromagnética o de electrones) con el patrón que se desea fabricar. Luego se utiliza un solvente en el cual solo es soluble el polímero que fue expuesto, dejando al descubierto

el patrón deseado directamente sobre el sustrato. El polímero que no fue expuesto actúa como máscara, cubriendo el resto del sustrato, en el que no queremos que se encuentre la estructura que deseamos fabricar. Luego el metal es evaporado, cubriendo toda la superficie de la muestra, quedando directamente sobre el sustrato en las zonas deseadas y sobre el polímero en las otras. Finalmente el resto del polímero es disuelto con otro solvente, llevándose consigo el metal que lo cubría. El resultado es una delgada capa de metal cuya forma es la del patrón dibujado en primer lugar sobre el polímero. La diferencia entre utilizar un haz de electrones y radiación electromagnética es por supuesto que poseen distintos límites para el tamaño mínimo de las estructuras resultantes debido a la diferencia en la longitud de onda. La litografía óptica permite una resolución del orden de $3\mu m$, mientras que la litografía por haz de electrones permite alcanzar resoluciones inferiores al μm . Debido a que este último tipo de litografía está limitada a regiones pequeñas, solo aquellas partes del sistema que requieran resolución inferior al μm son fabricadas de esta manera. Para el resto de la estructura típicamente se utiliza litografía óptica. De este modo la muestra es fabricada en etapas intercalando distintas técnicas. En la Figura 1.1 se puede ver las imágenes de una estructura fabricada mediante las técnicas mencionadas en esta Sección obtenidas con un microscopio electrónico de barrido (SEM) para distintas magnificaciones.

1.4. Dispositivo estudiado

Como se mencionó en la Sección 1.1, el dispositivo elegido para estudiar los conceptos de temperaturas local y efectiva en sistemas cuánticos dependientes del tiempo fue el *bombeador cuántico*. El mecanismo de bombeo cuántico fue propuesto inicialmente por Thouless [37] para sistemas cerrados a temperatura nula. Posteriormente la formulación fue ampliada por Spivak y colaboradores [38, 39] a sistemas abiertos a temperatura finita. En este caso, el sistema descrito consiste en un punto cuántico, que se encuentra conectado a reservorios mediante contactos puntuales balísticos, a través del cual se genera una corriente continua como resultado de la variación adiabática de dos voltajes de compuerta (que denominaremos X_1 y X_2) que determinan la forma de la nanoestructura. La magnitud de la corriente inducida es proporcional a la frecuencia Ω_0 con la que oscilan X_1 y X_2 y al producto de las amplitudes $\delta X_1 \delta X_2$ (para

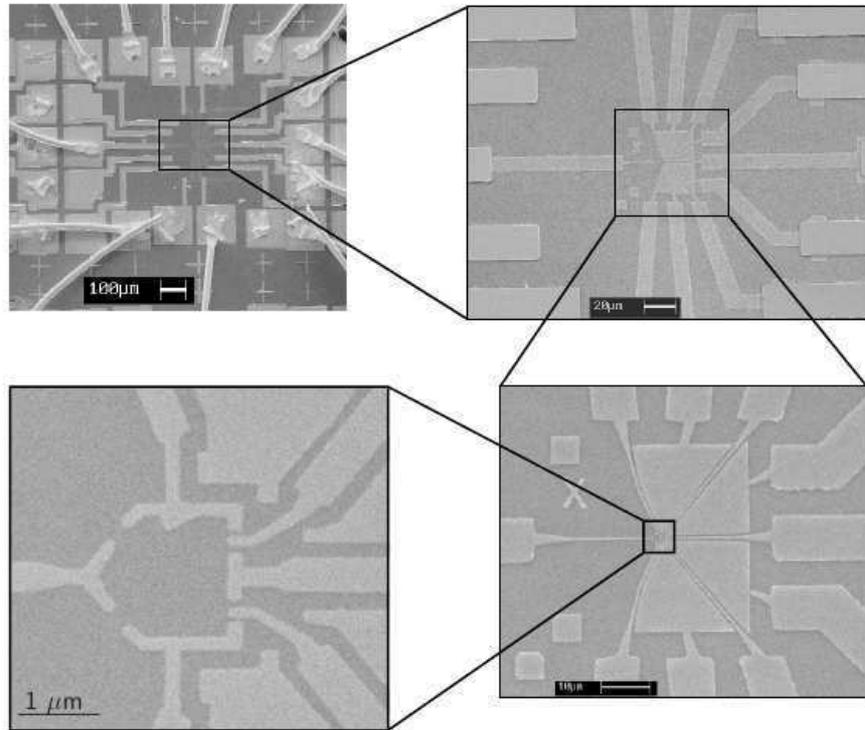


Figura 1.1: Micrografías SEM con distintas magnificaciones de un sistema mesoscópico fabricado mediante técnicas litográficas sobre una heteroestructura de GaAs-AlGaAs. Extraída de [28].

amplitudes pequeñas). La dirección de esta corriente dependerá de las propiedades microscópicas del sistema.

La primera realización experimental de un bombeador cuántico con estas características fue lograda por M. Switkes y colaboradores [27] sobre una heteroestructura de GaAs-AlGaAs (ver micrografías SEM en la Figura 1.1). La heteroestructura de GaAs-AlGaAs consiste en algunas capas alternadas de GaAs y AlGaAs como se muestra en el panel izquierdo de la Figura 1.2. El espesor típico de estas capas se ubica en las pocas decenas de nm . La heteroestructura comienza con un sustrato de GaAs. Sobre él se coloca una capa de AlGaAs sin dopar. Por encima se coloca una nueva capa de AlGaAs pero dopada con impurezas de tipo n . Una nueva capa de AlGaAs sin dopar se coloca encima y finalmente se termina con una capa de GaAs para evitar la oxidación del AlGaAs. En la interfase entre el sustrato de GaAs y la capa de AlGaAs

sin dopar se forma un gas de electrones bidimensional (2DEG). En el panel derecho se puede observar la energía de la banda de conducción. El espesor de las distintas capas se puede ajustar para sintonizar las propiedades del 2DEG, como pueden ser la movilidad o la densidad de electrones. Debido a la ubicación del nivel de Fermi, los electrones quedan confinados a la interfase, pudiéndose mover libremente en las otras dos direcciones espaciales. A temperaturas suficientemente bajas solo se encuentra ocupado el nivel energético más bajo del potencial de confinamiento, reforzando el carácter bidimensional del gas de electrones. Encima de esta heteroestructura se colocan compuertas de tipo Schottky fabricadas mediante las técnicas litográficas descritas en la Sección anterior. Estas compuertas se encuentran separadas del 2DEG. La aplicación de un voltaje negativo lo suficientemente grande ($\sim -1V$) expulsa completamente al gas de electrones de la región que se encuentra debajo de la compuerta (cuyo tamaño dependerá de la magnitud del voltaje aplicado). En la Figura 1.3 se puede ver un esquema del 2DEG con las compuertas de tipo Schottky que permiten aislar una pequeña región del gas de electrones. Esta región es el punto cuántico. Su forma y tamaño puede ser controlada mediante la modificación de los voltajes aplicados. Esto permite estudiar puntos cuánticos diferentes con un único dispositivo experimental. Este esquema corresponde a la realización experimental que se muestra en la Figura 1.1.

El trabajo está organizado de la siguiente manera. En el Capítulo 2 se presentará el formalismo de funciones de Green de no-equilibrio y su aplicación a problemas de transporte cuántico. En el Capítulo 3 se introducirá la definición de *temperatura local* en un sistema mesoscópico dependiente del tiempo y se estudiará su comportamiento y su relación con el flujo de calor. En el Capítulo 4 se presentará el concepto de *temperatura efectiva* a través de una relación de fluctuación-disipación generalizada para funciones de Green de una partícula y se estudiará su relación con la temperatura local antes definida. En el Capítulo 5 se calcularán las funciones de correlación corriente-corriente para estos sistemas y a partir de ellas se definirá una relación de fluctuación-disipación generalizada diferente que dará lugar a una nueva temperatura efectiva. Se estudiará su comportamiento y su relación con las temperaturas definidas anteriormente. Finalmente, el Capítulo 6 estará dedicado a los comentarios finales y conclusiones.

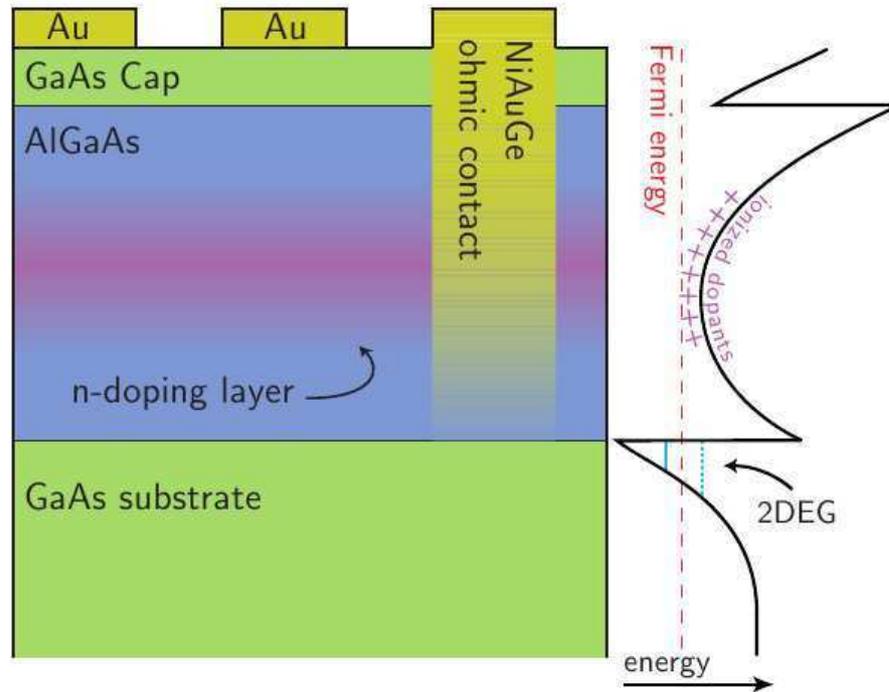


Figura 1.2: Izquierda: esquema de la heteroestructura de GaAs-AlGaAs con compuertas de tipo Schottky depositadas sobre la superficie y un contacto ohmico de NiAuGe. La zona intermedia más oscura de la capa de AlGaAs indica la región dopada. Derecha: Banda de conducción que muestra el pozo de potencial que se forma en la interfase entre el GaAs y el AlGaAs, que confina el 2DEG. Extraída de [28].

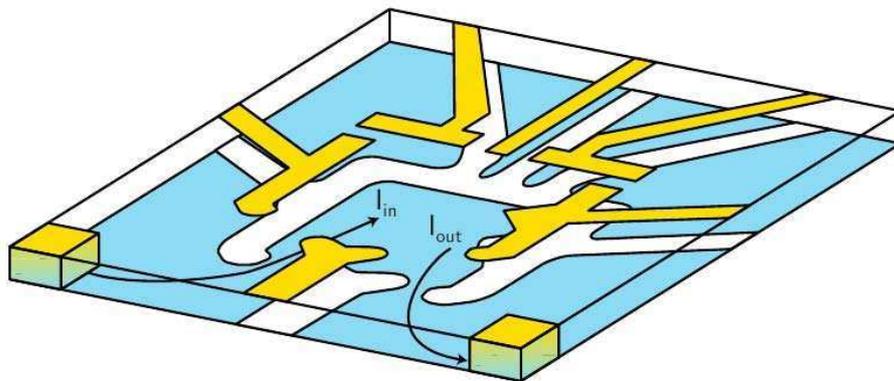


Figura 1.3: Esquema de las compuertas de tipo Schottky encima de un 2DEG (región azul) que, mediante la aplicación de voltajes negativos, permiten expulsar al gas de electrones y crear un punto cuántico. Los contactos ohmicos de NiAuGe están representados por cuadrados en la zona inferior de la imagen. Extraída de [28].

Capítulo 2

Formalismo Teórico

En esta sección se presentará el formalismo teórico utilizado para resolver los problemas abordados en este trabajo de tesis. Cabe destacar que existen numerosas técnicas para tratar problemas fuera del equilibrio. En nuestro caso la elección fue la del formalismo de funciones de Green de no equilibrio, formulado de manera independiente por L. P. Kadanoff y G. Baym [40] por un lado y por L. V. Keldysh [41] por otro. Estas formulaciones tienen su origen en trabajos pioneros de la escuela de Schwinger [42–44] y resultan ser equivalentes. Existe una extensa literatura sobre las funciones de Green de no-equilibrio dentro de la cual podemos mencionar las Refs. [45–49]. En lo que sigue se considerará conocida la teoría de funciones de Green de equilibrio tanto a temperatura cero como a temperatura finita. Para una reseña sobre ambas teorías ver por ejemplo la Ref. [50].

2.1. Funciones de Green de no equilibrio

La principal diferencia entre la construcción de una teoría de equilibrio y una de no equilibrio es que la hipótesis de que el sistema regresa al estado fundamental (o a un estado de equilibrio termodinámico a temperatura finita) cuando $t \rightarrow +\infty$, que es válida en el caso de equilibrio, no resulta válida fuera del equilibrio. J. Schwinger [42] propuso que esta dificultad puede ser salvada permitiendo al sistema evolucionar desde $t = -\infty$ al momento de interés (que denominaremos t_1) y luego continuar la evolución temporal desde t_1 de vuelta a $-\infty$. Cabe mencionar que si la función que se describe depende de dos tiempos (como es el caso de las funciones de Green) la

evolución debe continuar hasta el mayor de los dos. La ventaja de este procedimiento es que los valores de expectación no están referidos al estado final del sistema (de no equilibrio) sino al estado inicial en el que el sistema fue preparado a $t = -\infty$. El precio que hay que pagar por esto es que aparecen dos ramas temporales una que avanza en el tiempo y otra que retrocede. Todo esto quedará más claro un poco más adelante, cuando explicitemos las transformaciones necesarias para que la estructura de la teoría sea similar a la de equilibrio.

Comencemos entonces con la formulación del problema de no equilibrio. Para ello consideremos, en primer lugar, un sistema en equilibrio descrito por el siguiente Hamiltoniano

$$h = H_0 + H^i. \quad (2.1)$$

El primer término (H_0) corresponde a un Hamiltoniano de partículas libres (es decir un Hamiltoniano cuadrático que permite la aplicación de teorema de Wick) y el segundo (H^i) contiene todas las interacciones entre partículas (los aspectos de muchos cuerpos del problema). En equilibrio termodinámico, el estado del sistema está descrito por la matriz densidad

$$\rho(h) = \frac{1}{Z} e^{-\beta h}, \quad (2.2)$$

donde $Z = \text{Tr}[e^{-\beta h}]$, $\beta = 1/k_B T$ y las energías están medidas con respecto al potencial químico μ (alternativamente se podría reemplazar $h \rightarrow h - \mu N$, donde N es el operador número de partículas).

Una forma estándar de obtener un estado de no equilibrio es la de suponer que, a tiempos menores a un cierto t_0 , el sistema se encuentra en el estado de equilibrio termodinámico descrito por la Ec. (2.2). Para sacar al sistema del equilibrio, a tiempo t_0 se enciende una perturbación irreversible dependiente del tiempo descrita por un Hamiltoniano $H'(t)$. En estas condiciones, el Hamiltoniano total resulta

$$H = h + H'(t), \quad (2.3)$$

con $H'(t) = 0$ para $t < t_0$. La perturbación $H'(t)$ puede tratarse por ejemplo de un campo eléctrico o del acoplamiento a contactos a diferente potencial químico.

Uno de los objetivos principales de la mecánica estadística de no equilibrio es el de calcular valores de expectación de algún observable físico, asociado a un operador

O , para tiempos $t \geq t_0$,

$$\langle O(t) \rangle = \text{Tr}[\rho(h)O_H(t)], \quad (2.4)$$

donde $O_H(t)$ es el observable en la representación de Heisenberg. Cabe señalar que el subíndice H indica que la dependencia temporal está gobernada por el Hamiltoniano total. Esta definición se puede extender trivialmente a cantidades que dependen de dos tiempos (o n tiempos) como las funciones de Green o las funciones de correlación.

El procedimiento para abordar el problema de no equilibrio es análogo al realizado para la situación de equilibrio. En este último caso se realiza una expansión diagramática, de Feynman [51, 52] para el caso de temperatura cero o de Matsubara [53] para temperatura finita. Ambas expansiones se basan en el teorema de Wick, que permite escribir un producto de una cantidad arbitraria de operadores como sumas de productos dos operadores apareados. Este teorema es válido siempre y cuando los valores medios se realicen sobre operadores no interactuantes y la matriz densidad inicial corresponda a una matriz de una sola partícula. Inmediatamente se pueden distinguir dos problemas en la formulación de no equilibrio: el primero radica en que la matriz densidad $\rho(h)$ es una matriz densidad de muchos cuerpos (debido al término H^i en la Ec. (2.1)); el segundo consiste en que el Hamiltoniano total H también contiene términos de muchos cuerpos y por consiguiente su correspondiente operador de evolución temporal también los posee.

Veamos primero cómo resolver el primero de estos problemas. El objetivo es el de transformar el operador O_H en la representación de Heisenberg, que evoluciona con el Hamiltoniano total H , a un operador O_{H_0} en la representación de interacción, que evoluciona con el Hamiltoniano de partícula libre H_0 . Debido a que dos operadores deben ser eliminados (la perturbación externa dependiente del tiempo $H'(t)$ y las interacciones entre partículas H^i) se suelen realizar dos transformaciones que resultan un poco más complicadas que en el caso de equilibrio. La primera transformación consiste en cambiar la dependencia temporal de O_H a O_h (es decir eliminar $H'(t)$). Esto puede lograrse mediante la transformación

$$O_H(t) = v_h^\dagger(t, t_0)O_h(t)v_h(t, t_0), \quad (2.5)$$

donde

$$v_h(t, t_0) = T \left\{ e^{-i \int_{t_0}^t dt' H'_h(t')} \right\}, \quad (2.6)$$

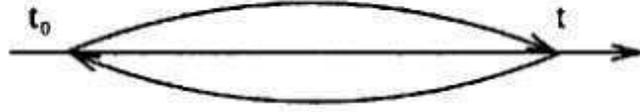


Figura 2.1: Contorno cerrado C_t . Imagen extraída de [49].

siendo T el operador de orden cronológico y

$$H'_h(t) = e^{ih(t-t_0)} H'(t) e^{-ih(t-t_0)}. \quad (2.7)$$

Utilizando la Ec. (2.6), el operador O_H dado en la Ec. (2.5) se puede escribir de la siguiente manera

$$O_H(t) = \tilde{T} \left\{ e^{i \int_{t_0}^t dt' H'_h(t')} \right\} O_h(t) T \left\{ e^{-i \int_{t_0}^t dt' H'_h(t')} \right\}, \quad (2.8)$$

donde \tilde{T} corresponde al operador de orden anti-cronológico.

En este momento es conveniente introducir un contorno cerrado C_t para esta transformación, que se muestra en la Figura 2.1. Dicho contorno corre sobre el eje real desde t_0 hasta t (rama C_t^+) y luego vuelve de t a t_0 (rama C_t^-). Junto con este contorno se define el operador de orden cronológico sobre este contorno T_{C_t} de la siguiente manera: aquellos operadores evaluados en tiempos que ocurren después en el contorno C_t deben ubicarse a la izquierda de los operadores con tiempos anteriores (ordenados según el contorno). Para operadores con tiempos en la rama C_t^+ , T_{C_t} se comporta como el operador orden cronológico mientras que, para operadores con tiempos en la rama C_t^- , se comporta como el operador de orden anti-cronológico. Cabe señalar que cualquier tiempo de la rama C_t^+ antecede (en el sentido de orden sobre el contorno) a cualquier tiempo de la rama C_t^- . Una notación frecuente para distinguir en qué rama se encuentra un determinado tiempo $t_1 \in [t_0, t]$ es la de colocarle un superíndice $+$ si este tiempo se encuentra en la rama superior (t_1^+) y un superíndice $-$ si se encuentra en la rama inferior (t_1^-).

Utilizando la definición del contorno C_t y del operador T_{C_t} , es fácil ver que la Ec. 2.8 se puede rescribir de manera más compacta como

$$O_H(t) = T_C \left\{ e^{-i \int_{C_t} dt' H'_h(t')} O_h(t) \right\}. \quad (2.9)$$

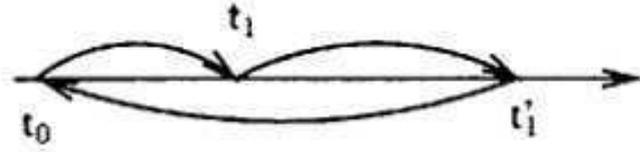


Figura 2.2: Contorno cerrado C . Imagen extraída de [49].

Para motivar la siguiente transformación resulta conveniente introducir la definición de función de Green ordenada sobre el contorno mediante al utilización del operador de orden cronológico sobre el contorno (T_C). Debido a que la función de Green es un operador que depende de dos tiempos (t_1 y t_1'), es necesario introducir un nuevo contorno C (que se muestra en el Figura 2.2). Este contorno comienza y termina en t_0 y pasa una única vez por los tiempos t_1 y t_1' . En estas condiciones la función de Green se define como

$$G(1, 1') = -i \langle T_C \{ \psi_H(1) \psi_H^\dagger(1') \} \rangle, \quad (2.10)$$

donde los campos ψ obedecen una estadística fermiónica. Más adelante, en la Sección 5.2, definiremos la función de Green para operadores con estadística bosónica.

Esta definición, completamente análoga a la definición de la teoría de equilibrio, permite desarrollar ambas teorías en forma paralela. Más adelante analizaremos en detalle esta función. Por el momento solo es necesaria para motivar la segunda transformación. Como se puede observar, se trata de un valor medio de un operador en la representación de Heisenberg. La única diferencia con la Ec. (2.4) es que se trata de un operador de dos tiempos. Por lo tanto, realizando un procedimiento similar al que llevó a la obtención de la Ec. (2.9), la función de Green se puede escribir como

$$G(1, 1') = -i \langle T_C \{ S_C^H \psi_h(1) \psi_h^\dagger(1') \} \rangle, \quad (2.11)$$

donde se define

$$S_C^H = e^{-i \int_C dt' H'_h(t')}. \quad (2.12)$$

Como se mencionó con anterioridad, para poder aplicar el teorema de Wick es necesario que el valor medio se tome respecto de una matriz densidad de un solo

Figura 2.3: Contorno de Matsubara C' .

cuerpo y que los operadores también sean de un solo cuerpo. Para ello es necesaria una segunda transformación. Se define el siguiente operador

$$v(t, t_0) = T \left\{ e^{-i \int_{t_0}^t dt' H_{H_0}^i(t')} \right\}, \quad (2.13)$$

donde $H_{H_0}^i$ es el operador H^i en la representación de interacción respecto del Hamiltoniano H_0 . Utilizando este operador para tiempos imaginarios se puede escribir

$$e^{-\beta h} = e^{-\beta H_0} v(t_0 - i\beta, t_0). \quad (2.14)$$

Definiendo el operador sobre el contorno de Matsubara C' (ver Figura 2.3)

$$S_{C'} = e^{-i \int_{C'} dt' H_{H_0}^i(t')}, \quad (2.15)$$

el numerador de la Ec. (2.2) se puede escribir como

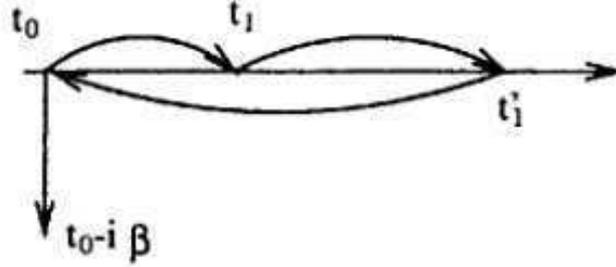
$$e^{-\beta h} = e^{-\beta H_0} S_{C'}. \quad (2.16)$$

Por lo tanto, la matriz densidad $\rho(h)$ se puede escribir de la siguiente manera:

$$\rho(h) = \frac{e^{-\beta H_0} S_{C'}}{\text{Tr}[e^{-\beta H_0} S_{C'}]} \equiv \frac{\rho_0 S_{C'}}{\text{Tr}[\rho_0 S_{C'}]}, \quad (2.17)$$

donde se definió $\rho_0 = e^{-\beta H_0} / Z_0$ con $Z_0 = \text{Tr}[e^{-\beta H_0}]$.

Escribiendo explícitamente el valor medio $\langle \dots \rangle$ como la traza con la matriz densi-

Figura 2.4: Contorno cerrado C^i . Imagen extraída de [49].

dad $\text{Tr}[\rho(h) \dots]$ y utilizando la transformación para llevar a los operadores de campo ψ_h a la representación de interacción con respecto a H_0 , la Ec. (2.11) adquiere la siguiente forma

$$G(1, 1') = -i \frac{\text{Tr} \left[\rho_0 T_{C^i} \left\{ S_{C^i} S_C \psi_{H_0}(1) \psi_{H_0}^\dagger(1') \right\} \right]}{\text{Tr} \left[\rho_0 T_{C^i} \{ S_{C^i} S_C \} \right]}, \quad (2.18)$$

donde

$$S_C = e^{-i \int_C dt' H_{H_0}^i(t')}, \quad (2.19)$$

$$S_{C^i} = e^{-i \int_{C^i} dt' H_{H_0}^i(t')}, \quad (2.20)$$

siendo C el contorno de la Figura 2.2, C^i el contorno indicado en la Figura 2.4 y el operador T_{C^i} corresponde al orden cronológico sobre el contorno C^i .

La Ec. (2.18) se puede describir de la siguiente manera

$$G(1, 1') = -i \frac{\langle T_{C^i} \left\{ S_{C^i} S_C \psi_{H_0}(1) \psi_{H_0}^\dagger(1') \right\} \rangle_0}{\langle T_{C^i} \{ S_{C^i} S_C \} \rangle_0}, \quad (2.21)$$

donde $\langle \dots \rangle_0$ se entiende como el valor medio respecto de la matriz densidad de una sola partícula ρ_0 , es decir $\text{Tr}[\rho_0 \dots]$, y el subíndice H_0 indica que se trata de los operadores en la representación de interacción respecto de H_0 .

El resultado de la Ec. (2.21) es muy importante debido a que, por un lado se trata de un resultado exacto y por otro, toda la dependencia temporal se encuentra en el Hamiltoniano H_0 (que es exactamente soluble). Además, como el valor medio se toma

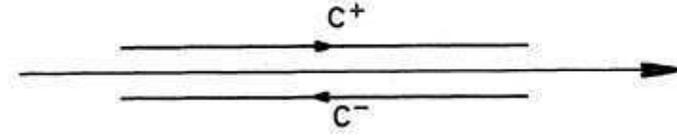


Figura 2.5: Contorno cerrado C_K . Imagen extraída de [47] y parcialmente modificada.

respecto de la matriz densidad ρ_0 , proveniente de un Hamiltoniano cuadrático, permite la aplicación del teorema de Wick. De este modo, se pueden construir diagramas de Feynman para la teoría de no equilibrio de manera completamente análoga a la teoría de equilibrio. Al igual que en esta última teoría, el denominador cancela los diagramas desconectados.

2.1.1. Formulación de Keldysh

El resultado de la Ec. (2.21) es el más general posible. Sin embargo, en muchas situaciones físicas, como por ejemplo el transporte en régimen estacionario, objeto de estudio de este trabajo de tesis, es posible considerar que las correlaciones iniciales carecen de importancia una vez que el sistema alcanza el estado estacionario. En consecuencia, para abordar este tipo de problemas se utiliza la formulación de Keldysh, en la que se desprecian las correlaciones iniciales mediante el límite $t_0 \rightarrow -\infty$. Debido a que se asume que las funciones de Green decaen lo suficientemente rápido como función de la diferencia de tiempos, se desprecia la parte del contorno C' (ver Figura 2.3), que se extiende entre t_0 y $t_0 - i\beta$. Cálculos teniendo en cuenta explícitamente las correlaciones iniciales mostraron que despreciar esta parte del contorno es equivalente a despreciar las correlaciones iniciales [54–57]. Por lo tanto, si se desprecian las correlaciones iniciales, tomando el límite de $t_0 \rightarrow -\infty$, el contorno C^i se reduce al contorno C , empezando y terminando en $-\infty$. Además, este contorno puede ser extendido más allá del mayor de los dos tiempos (t_1 y t_1') hasta $+\infty$, por medio del operador de evolución temporal, obteniéndose el contorno C_K introducido por Keldysh [41]. Este contorno se muestra en la Figura 2.5 y consiste de dos ramas: C_K^+ que se extiende de $-\infty$ a $+\infty$ y C_K^- que se extiende de $+\infty$ a $-\infty$. Para simplificar la notación, a partir de este momento utilizaremos la letra C para denotar el contorno de Keldysh C_K .

En síntesis, en el formalismo de Keldysh la interacción entre partículas (H^i) es encendida en forma adiabática de tal modo que la interacción es nula cuando $t \rightarrow -\infty$ y, por lo tanto, la matriz densidad del estado inicial es una matriz densidad de partícula libre ρ_0 (correspondiente al Hamiltoniano H_0). Como se mencionó en el apartado anterior, una matriz densidad ρ_0 de estas características permite la aplicación del teorema de Wick. El único inconveniente es que ahora hay dos ramas temporales (C^+ y C^-) y es necesario encontrar una forma apropiada para llevar registro de en qué rama se encuentra cada uno de los argumentos temporales.

Para solucionar este inconveniente se define la función de Green ordenada sobre el contorno, que fue aquella que introdujimos oportunamente en la Ec. (2.10) para motivar la segunda de las transformaciones. Esta función está definida como

$$G(1, 1') = -i\langle T_C \{ \psi_H(1) \psi_H^\dagger(1') \} \rangle = \begin{cases} -i\langle \psi_H(1) \psi_H^\dagger(1') \rangle & \text{si } t_1 > t_{1'} \text{ en } C, \\ i\langle \psi_H^\dagger(1') \psi_H(1) \rangle & \text{si } t_1 \leq t_{1'} \text{ en } C, \end{cases} \quad (2.22)$$

donde la diferencia de signo de la segunda línea respecto de la primera aparece debido a la estadística fermiónica de los operadores de campo ψ . Más adelante, en la Sección 5.2, definiremos la función de Green ordenada sobre el contorno para operadores bosónicos, en la cual no hay diferencia de signo debido a la estadística bosónica. Los tiempos t_1 y $t_{1'}$ se encuentran sobre el contorno C y los operadores de campo ψ se encuentran en la representación de Heisenberg.

Debido a que las funciones de Green ordenadas sobre el contorno dependen de dos tiempos (t_1 y $t_{1'}$) y estos tiempos a su vez puede encontrarse en cualquiera de las dos ramas del contorno de Keldysh (C^+ o C^-), esto da origen a cuatro funciones de Green [47]

$$G(1, 1') = \begin{cases} G_C(1, 1') & \text{si } t_1, t_{1'} \in C^+, \\ G^>(1, 1') & \text{si } t_1 \in C^-, t_{1'} \in C^+, \\ G^<(1, 1') & \text{si } t_1 \in C^+, t_{1'} \in C^-, \\ G_{\bar{C}}(1, 1') & \text{si } t_1, t_{1'} \in C^-, \end{cases} \quad (2.23)$$

donde G_C es la función de Green *causal*,

$$G_C(1, 1') = -i\langle T \{ \psi_H(1) \psi_H^\dagger(1') \} \rangle, \quad (2.24)$$

siendo T el operador de orden cronológico. $G^>$ es denominada *mayor*,

$$G^>(1, 1') = -i\langle\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')\rangle, \quad (2.25)$$

$G^<$ es denominada *menor*,

$$G^<(1, 1') = i\langle\psi_H^\dagger(1')\psi_H(1)\rangle, \quad (2.26)$$

y $G_{\tilde{C}}$ es la *anti-causal*,

$$G_{\tilde{C}}(1, 1') = -i\langle\tilde{T}\{\psi_H(1)\psi_H^\dagger(1')\}\rangle, \quad (2.27)$$

donde \tilde{T} es el operador de orden anti-cronológico.

Se acostumbra definir otras tres funciones de Green en términos de las presentadas anteriormente:

$$G^r(1, 1') = G_C(1, 1') - G^<(1, 1') = \theta(t_1 - t_{1'})[G^>(1, 1') - G^<(1, 1')], \quad (2.28)$$

$$G^a(1, 1') = G_C(1, 1') - G^>(1, 1') = -\theta(t_{1'} - t_1)[G^>(1, 1') - G^<(1, 1')], \quad (2.29)$$

$$G^K(1, 1') = G^>(1, 1') + G^<(1, 1'). \quad (2.30)$$

Estas funciones de Green se denominan *retardada*, *avanzada* y *de Keldysh* respectivamente. Por el momento son definiciones, pero aparecerán naturalmente en la Sección 2.1.2. Estas funciones de Green satisfacen las siguientes propiedades:

$$G^a(1, 1') = [G^r(1', 1)]^*, \quad (2.31)$$

$$G^{<, >, K}(1, 1') = -[G^{<, >, K}(1', 1)]^*. \quad (2.32)$$

Es fácil ver que estas cuatro funciones definidas en las Ecs. (2.24)-(2.27) no son linealmente independientes debido a que se satisface la siguiente identidad:

$$G_C(1, 1') + G_{\tilde{C}}(1, 1') = G^<(1, 1') + G^>(1, 1'). \quad (2.33)$$

A esta altura resulta conveniente escribir la función de Green ordenada sobre el contorno (ver Ec. (2.10)) después de realizada la transformación que lleva los opera-

dores de campo a la representación de interacción respecto del Hamiltoniano H_0 :

$$G(1, 1') = -i \frac{\langle T_C \{ S_C \psi_{H_0}(1) \psi_{H_0}^\dagger(1') \} \rangle_0}{\langle T_C \{ S_C \} \rangle_0}, \quad (2.34)$$

donde el subíndice 0 se conservó para resaltar que el valor medio se toma respecto de una matriz densidad ρ_0 de una partícula y todos los operadores se encuentran en la representación de interacción respecto del Hamiltoniano H_0 . La expansión del operador S_C , al igual que en la teoría de equilibrio, conduce a una ecuación para G . En virtud del teorema de Wick, cada término de esta expansión se expresa como productos de funciones de Green de una partícula del sistema no perturbado. Cada término puede ser descrito en forma diagramática, de manera completamente análoga a la formulación diagramática de Feynman de la teoría de equilibrio a temperatura cero, y por lo tanto la estructura es idéntica a la de equilibrio. La única diferencia radica en que las integrales en los vértices se realizan sobre el contorno C , en lugar de ser sobre el eje real (teoría de equilibrio a temperatura cero) o sobre la inversa de la temperatura (en el caso de temperatura finita).

Al igual que en el caso de la formulación de equilibrio, la expansión del operador S_C da lugar a una serie geométrica que puede ser agrupada dando lugar al concepto de una autoenergía, obteniendo la ecuación que debe satisfacer la función de Green, conocida como ecuación de Dyson

$$\begin{aligned} G(1, 1') &= G^0(1, 1') + \int dx_2 \int_C d\tau_2 G^0(1, 2) U(2) G(2, 1') \\ &\quad + \int dx_2 \int dx_3 \int_C d\tau_2 \int_C d\tau_3 G^0(1, 2) \Sigma(2, 3) G(3, 1'), \end{aligned} \quad (2.35)$$

donde todos los tiempos se encuentran sobre el contorno de Keldysh de la Figura 2.5 y G^0 corresponde a la función de Green del sistema sin perturbar. Para escribir la ecuación de esta manera se asumió que el término de no-equilibrio del Hamiltoniano ($H'(t)$) puede ser representado por un potencial externo U de una partícula, que es lo que sucede con frecuencia. A menudo, este segundo término puede ser absorbido dentro de la definición de G^0 y de este modo se escribe la ecuación de Dyson en forma

completamente análoga a la del caso de equilibrio:

$$G(1, 1') = G^0(1, 1') + \int dx_2 \int dx_3 \int_C d\tau_2 \int_C d\tau_3 G^0(1, 2) \Sigma(2, 3) G(3, 1'). \quad (2.36)$$

Esto define una ecuación cerrada para G , que puede resolverse una vez calculada la autoenergía. No obstante los observables de un sistema físico no dependen directamente de la función de Green G ordenada sobre el contorno sino de las funciones de Green *menor* (2.26), *mayor* (2.25), *retardada* (2.28) y *avanzada* (2.29). Por otra parte, es conveniente que las integrales en la expansión perturbativa se encuentren sobre el eje real. Una forma de lograr esto es la que propuso Keldysh [41] en su trabajo original y que presentaremos en la siguiente Sección.

2.1.2. Espacio de Keldysh y forma triangular

La función de Green G ordenada sobre el contorno puede representarse como una sola matriz \mathbf{G} en lo que se denomina espacio de Keldysh (de 2×2),

$$\mathbf{G}(1, 1') = \begin{pmatrix} G^{++}(1, 1') & G^{+-}(1, 1') \\ G^{-+}(1, 1') & G^{--}(1, 1') \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

donde el primer superíndice indica a qué rama pertenece el tiempo t_1 mientras que el segundo superíndice hace lo propio con el tiempo $t_{1'}$. Con esta nueva notación representamos las mismas funciones de Green de las Ecs. (2.24)-(2.27) como distintas componentes de una función de Green \mathbf{G} matricial:

$$G^{++}(1, 1') = G_C(1, 1'), \quad (2.38)$$

$$G^{+-}(1, 1') = G^<(1, 1'), \quad (2.39)$$

$$G^{-+}(1, 1') = G^>(1, 1'), \quad (2.40)$$

$$G^{--}(1, 1') = G_{\tilde{C}}(1, 1'). \quad (2.41)$$

La identidad (2.33) que satisfacen las cuatro funciones de Green definidas en las Ecs. (2.24)-(2.27) se puede escribir en términos de estas nuevas componentes de la siguiente manera:

$$G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+}. \quad (2.42)$$

La autoenergía también adopta una forma matricial en el espacio de Keldysh de manera análoga a la función de Green \mathbf{G} ordenada sobre el contorno:

$$\mathbf{\Sigma}(1, 1') = \begin{pmatrix} \Sigma^{++}(1, 1') & \Sigma^{+-}(1, 1') \\ \Sigma^{-+}(1, 1') & \Sigma^{--}(1, 1') \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

donde los superíndices indican lo mismo que en el caso de \mathbf{G} . Los elementos de matriz de la autoenergía cumplen

$$\Sigma^{++}(1, 1') = \begin{cases} -\Sigma^{-+}(1, 1') & \text{si } t > t', \\ -\Sigma^{+-}(1, 1') & \text{si } t \leq t', \end{cases} \quad (2.44)$$

$$\Sigma^{--}(1, 1') = \begin{cases} -\Sigma^{+-}(1, 1') & \text{si } t > t', \\ -\Sigma^{-+}(1, 1') & \text{si } t \leq t'. \end{cases} \quad (2.45)$$

Es fácil ver, a partir de las Ecs. (2.44) y (2.45) que las componentes de la autoenergía satisfacen la relación

$$\Sigma^{++} + \Sigma^{--} = -(\Sigma^{+-} + \Sigma^{-+}). \quad (2.46)$$

Utilizando esta representación, la ecuación de Dyson se puede escribir como

$$\mathbf{G}(1, 1') = \mathbf{G}^0(1, 1') + \int dx_2 \int dx_3 \int dt_2 \int dt_3 \mathbf{G}^0(1, 2) \mathbf{\Sigma}(2, 3) \mathbf{G}(3, 1'), \quad (2.47)$$

donde \mathbf{G}^0 es la representación matricial de la función de Green ordenada sobre el contorno correspondiente al sistema no interactuante. De este modo se ve manifestamente que el formalismo de Keldysh es idéntico al utilizado para sistemas en equilibrio con la excepción de que en este caso las funciones de Green y la autoenergía son matrices de 2×2 en el espacio de Keldysh.

Debido a la identidad (2.42), que relaciona las cuatro componentes de la representación matricial, dichas componentes no resultan ser linealmente independientes. Por lo tanto debe existir una transformación lineal en el espacio de Keldysh que lleve a una matriz con solo tres coeficientes no nulos. En su formulación original [41], Keldysh propuso la siguiente transformación unitaria

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

que permite escribir \mathbf{G} de la siguiente manera

$$\mathbf{G} \longrightarrow \tilde{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} 0 & G^a \\ G^r & G^K \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

donde $\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{RGR}^\dagger$ y las funciones de Green G^r , G^a y G^K son aquellas definidas en las Ecs. (2.28)-(2.30) y corresponden a las siguientes combinaciones lineales de componentes en el espacio de Keldysh

$$G^r = G^{++} - G^{+-}, \quad (2.50)$$

$$G^a = G^{++} - G^{-+}, \quad (2.51)$$

$$G^K = G^{+-} + G^{-+}. \quad (2.52)$$

Con esta misma transformación, la autoenergía adquiere la forma

$$\tilde{\Sigma}(1, 1') = \begin{pmatrix} \Omega(1, 1') & \Sigma^r(1, 1') \\ \Sigma^a(1, 1') & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

donde $\Omega = \Sigma^{+-} + \Sigma^{-+} = \Sigma^K$.

La ecuación de Dyson queda expresada en términos de las matrices transformadas de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathbf{G}} = \tilde{\mathbf{G}}^0 + \tilde{\mathbf{G}}^0 \tilde{\Sigma} \tilde{\mathbf{G}}, \quad (2.54)$$

donde se omite, por simplicidad, las integrales sobre los argumentos internos.

Escribiendo explícitamente las distintas componentes de la ecuación de Dyson matricial se puede ver que las funciones de Green retardada y avanzada satisfacen ecuaciones de Dyson por separado

$$G^r = G^{0,r} + G^{0,r} \Sigma^r G^r, \quad (2.55)$$

$$G^a = G^{0,a} + G^{0,a} \Sigma^a G^a, \quad (2.56)$$

mientras que la función de Green de Keldysh G^K satisface

$$G^K = G^{0,K} + G^{0,K} \Sigma^a G^a + G^{0,r} \Sigma^K G^a + G^{0,r} \Sigma^r G^K. \quad (2.57)$$

El procedimiento para resolver estas ecuaciones de Dyson es el siguiente: primero se calculan las tres componentes de la autoenergía; luego se resuelven las ecuaciones para $G^{r,a}$; por último se resuelve la ecuación para G^K utilizando todo lo obtenido anteriormente. No obstante, para el cálculo de corrientes o de funciones de correlación serán necesarias las funciones de Green *menor* y *mayor* definidas en las Ecs. (2.26) y (2.25). Para encontrar las ecuaciones que satisfacen dichas funciones habría que escribir la ecuación de Dyson para la función de Green \mathbf{G} en su forma no triangular o utilizar las reglas de Langreth, que presentaremos a continuación.

2.1.3. Continuación analítica y teorema de Langreth

Como se mencionó en la Sección 2.1.1, si bien la ecuación de Dyson 2.35 resulta muy importante desde el punto de vista formal, el hecho de que las integrales deban ser realizadas sobre el contorno cerrado C de la Figura 2.5 hace que sea imposible de poner en práctica de manera sencilla y sistemática. Para ello es necesario reemplazar las integrales sobre el contorno C por integrales en el eje real. Una forma de hacer esto es mediante la representación matricial presentada en la Sección 2.1.2. Otra forma es un procedimiento que se conoce como continuación analítica.

Al considerar la ecuación de Dyson (Ec. (2.35)), nos encontramos con términos de la forma

$$C(\tau_1, \tau_{1'}) = \int_C d\tau' A(\tau_1, \tau') B(\tau', \tau_{1'}), \quad (2.58)$$

donde solo escribimos de manera explícita la dependencia temporal para simplificar la notación.

Consideremos primero que $\tau_1 = t_1 \in C^+$ y $\tau_{1'} = t_{1'} \in C^-$ con $t_1 < t_{1'}$, es decir que estamos analizando $C^<(t_1, t_{1'})$, y deformemos el contorno como se muestra en la Figura 2.6.

La Ec. (2.58) se transforma en

$$C(t_1, t_{1'}) = \int_{C_1} d\tau' A(t_1, \tau') B^<(\tau', t_{1'}) + \int_{C_1'} d\tau' A^>(t_1, \tau') B(\tau', t_{1'}), \quad (2.59)$$

donde el símbolo $<$ aparece en B en el primer término debido al hecho de que mientras t' esté en el contorno C_1 se cumple que $t' < t_{1'}$ (sobre el contorno). Algo análogo sucede

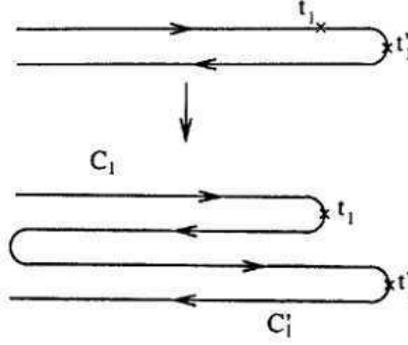


Figura 2.6: Deformación del contorno C . Imagen extraída de [49] y parcialmente modificada.

con el símbolo $>$ y la función A en el segundo término. Para continuar, consideremos únicamente el primer término de la Ec. (2.59), separando la integración en dos partes

$$\int_{C_1} d\tau' A(t_1, \tau') B^<(\tau', t_{1'}) = \int_{-\infty}^{t_1} dt' A^>(t_1, t') B^<(t', t_{1'}) + \int_{t_1}^{-\infty} dt' A^<(t_1, t') B^<(t', t_{1'}). \quad (2.60)$$

Utilizando la definición de función de Green retardada (Ec. (2.28)), la Ec. (2.60) se puede escribir como

$$\int_{C_1} dt' A(t_1, \tau') B^<(\tau', t_{1'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' A^r(t_1, t') B^<(t', t_{1'}). \quad (2.61)$$

Realizando un procedimiento análogo sobre el segundo término de la Ec. (2.59), se obtiene el siguiente resultado

$$C^<(t_1, t_{1'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' [A^r(t_1, t') B^<(t', t_{1'}) + A^<(t_1, t') B^a(t', t_{1'})]. \quad (2.62)$$

El resultado para $C^>(t_1, t_{1'})$ se obtiene a partir de este último simplemente cambiando $<$ por $>$.

La componente retardada se obtiene a partir de la definición dada en la Ec. (2.28),

utilizando el resultado de la Ec. (2.61)

$$\begin{aligned}
C^r(t_1, t_{1'}) &= \theta(t_1 - t_{1'})[C^>(t_1, t_{1'}) - C^<(t_1, t_{1'})] \\
&= \theta(t_1 - t_{1'}) \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(B^> - B^<) + (A^> - A^<)B^a] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dt' A^r(t_1, t') B^r(t', t_{1'}), \tag{2.63}
\end{aligned}$$

donde se utilizaron las definiciones de funciones retardadas y avanzadas de las Ecs. (2.28) y (2.29). Un resultado análogo para la función avanzada se puede obtener reemplazando r por a .

Los resultados de las Ecs. (2.62) y (2.63) para un producto de la forma $C = AB$ pueden resumirse de la siguiente manera

$$C^{<, >} = A^r B^{<, >} + A^{<, >} B^a, \tag{2.64}$$

$$C^{r, a} = A^{r, a} B^{r, a}. \tag{2.65}$$

Por otra parte, en ocasiones en los cálculos (sobre todo para funciones de correlación) aparecen productos de la forma

$$C(\tau, \tau') = A(\tau, \tau') B(\tau', \tau), \tag{2.66}$$

con tiempos τ y τ' en el contorno C pero sin integración. Un ejemplo de un producto de la forma (2.66) lo encontraremos al calcular las funciones de correlación corriente-corriente en la Sección 5.5. Es claro que la componente *menor* es simplemente

$$C^<(t, t') = A^<(t, t') B^>(t', t). \tag{2.67}$$

La fórmula para la componente *mayor* se obtiene intercambiando $<$ con $>$. Existen más reglas de Langreth, que pueden encontrarse por ejemplo en [49]. Para este trabajo solo necesitaremos las que hemos presentado en este apartado.

Regresemos entonces a nuestro objetivo principal que es el de formular ecuaciones para las funciones de Green que contengan únicamente integrales sobre el eje real. Para ello nos valemos de las reglas de Langreth, aplicándolas sobre la ecuación de Dyson (2.36). Como resultado de esto se obtienen las ecuaciones que deben satisfacer

las componentes *retardada*, *avanzada*, *menor* y *mayor*.

$$G^r = G^{0,r} + G^{0,r}\Sigma^r G^r, \quad (2.68)$$

$$G^a = G^{0,a} + G^{0,a}\Sigma^a G^a, \quad (2.69)$$

$$G^< = G^{0,<} + G^{0,<}\Sigma^a G^a + G^{0,r}\Sigma^< G^a + G^{0,r}\Sigma^r G^<, \quad (2.70)$$

$$G^> = G^{0,>} + G^{0,>}\Sigma^a G^a + G^{0,r}\Sigma^> G^a + G^{0,r}\Sigma^r G^>, \quad (2.71)$$

donde se omiten las integrales sobre las variables internas por simplicidad, pero se recuerda que dichas integrales se realizan en el espacio real. Es fácil ver que sumando las Ecs. (2.70) y (2.71) se obtiene la Ec. (2.57).

Como se mencionó en la Sección 2.1.2, las Ecs. (2.68) y (2.69) pueden ser resueltas en forma independiente una vez calculada la autoenergía. Las funciones obtenidas resolviendo estas ecuaciones, junto con la autoenergía, son utilizadas para resolver las ecuaciones (2.70) y (2.71). Resulta conveniente describir la Ec. (2.68) reemplazando en forma iterativa $G^<$. La primera iteración lleva a

$$G^< = (1 + G^{0,r}\Sigma^r)G^{0,<}(1 + \Sigma^a G^a) + (G^{0,r} + G^{0,r}\Sigma^r G^{0,r})\Sigma^< G^a + (G^{0,r}\Sigma^r)^2 G^<. \quad (2.72)$$

Es fácil convencerse que la iteración n lleva a

$$G^< = (1 + G^{0,r}\Sigma^r + \dots + (G^{0,r}\Sigma^r)^n)G^{0,<}(1 + \Sigma^a G^a) + (G^{0,r} + G^{0,r}\Sigma^r G^{0,r} + \dots + G^{0,r}(\Sigma^r G^{0,r})^n)\Sigma^< G^a + (G^{0,r}\Sigma^r)^{n+1} G^<, \quad (2.73)$$

y es trivial de demostrar por inducción completa.

Lo único que resta es notar que, a partir de la Ec. (2.68), se puede escribir reemplazando iterativamente G^r ,

$$G^r = G^{0,r} \sum_{k=0}^{\infty} (\Sigma^r G^{0,r})^k. \quad (2.74)$$

Por lo tanto, en el límite $n \rightarrow \infty$, la Ec. (2.73) se convierte en:

$$G^< = (1 + G^r \Sigma^r)G^{0,<}(1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^< G^a. \quad (2.75)$$

Esta forma de escribir la ecuación para para la función de Green *menor* resulta conveniente en muchos problemas de sistemas fuera del equilibrio en los que se estudia el régimen estacionario. En dichos problemas se puede despreciar el primer término de la Ec. (2.75), que contiene la función de Green $G^{0,<}$, que está asociado al régimen transitorio [48].

Una ecuación similar a (2.75) es válida para la función de Green *mayor* simplemente cambiando $<$ por $>$. Sumando ambas ecuaciones se obtiene la ecuación para la función de Green de Keldysh G^K , que podría haberse obtenido siguiendo el mismo procedimiento iterativo pero aplicado a la Ec. (2.57).

2.2. Aplicación a problemas de transporte cuántico

La teoría moderna del transporte cuántico en sistemas mesoscópicos fue desarrollada inicialmente por R. W. Landauer [58] y posteriormente ampliada por M. Büttiker [59]. Como se mencionó en la Sección 1.3, existe una amplia variedad de métodos de fabricación de nanoestructuras. Una característica común a la totalidad de dichos métodos es que dos nanoestructuras que en teoría deberían ser idénticas, por ejemplo dos estructuras fabricadas siguiendo exactamente el mismo procedimiento, resultan diferentes en la práctica. La razón para que esto ocurra es que existe desorden provocado por la presencia de defectos que inevitablemente se encuentran presentes en cada estructura fabricada y que varían de una muestra a otra. En la mayoría de los casos ni la posición de dichos defectos ni el potencial que generan pueden ser controlados o medidos. Esto daría lugar a que la descripción de sistemas como estos requiera un número demasiado grande de parámetros que no pueden ser controlados. Afortunadamente, las propiedades de transporte de cualquier nanoestructura pueden expresarse utilizando un conjunto mucho más pequeño de parámetros siempre y cuando se satisfaga la condición de que los electrones atraviesen la estructura sin pérdida de energía, es decir experimentando solo dispersiones elásticas. En esto se basa la idea fundamental del formalismo desarrollado por Landauer y Büttiker: cualquier conductor cuántico, independientemente de su método de fabricación, puede ser descrito por dos o más

reservorios conectados a través de cables ideales a una región intermedia en la que ocurren fenómenos de dispersión elásticos.

El formalismo de Landauer y Büttiker utiliza, para la descripción de la región intermedia, el formalismo de matriz de dispersión (*scattering matrix formalism*) que solo resulta apropiado para problemas de electrones no interactuantes. En cambio, el formalismo de funciones de Green de no-equilibrio, como se mencionó en la Sección 2.1, es una técnica que permite tratar en forma sistemática las interacciones de muchos cuerpos. No obstante en este trabajo de Tesis solo se considerarán sistemas de electrones no interactuantes, por lo cual ambas formulaciones resultan equivalentes.

2.2.1. Formulación Hamiltoniana

En la Figura 2.7 se muestra un esquema del problema a estudiar. El mismo consiste en un sistema central (C) conectado a un número M de reservorios. La descripción Hamiltoniana del problema es la siguiente:

$$\hat{H}_{total} = \hat{H}_{res} + \hat{H}_{cont} + \hat{H}_{sys}(t), \quad (2.76)$$

donde el primer término corresponde al Hamiltoniano de los reservorios, que se representa mediante electrones libres

$$\hat{H}_{res} = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger \hat{c}_{k\alpha}, \quad (2.77)$$

con el número cuántico $k\alpha$ identificando los grados de libertad del reservorio α y $\varepsilon_{k\alpha}$ la energía correspondiente a dicho estado.

Por otra parte, el Hamiltoniano de contacto H_{cont} describe el acoplamiento entre los distintos reservorios y el sistema central (y eventualmente también podría dar cuenta de acoplamientos directos entre reservorios, aunque en este trabajo no tendremos en cuenta esta posibilidad). Este Hamiltoniano puede escribirse de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{cont} = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k\alpha} \sum_{l\alpha} t_{k\alpha,l\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger \hat{c}_{l\alpha} + h.c., \quad (2.78)$$

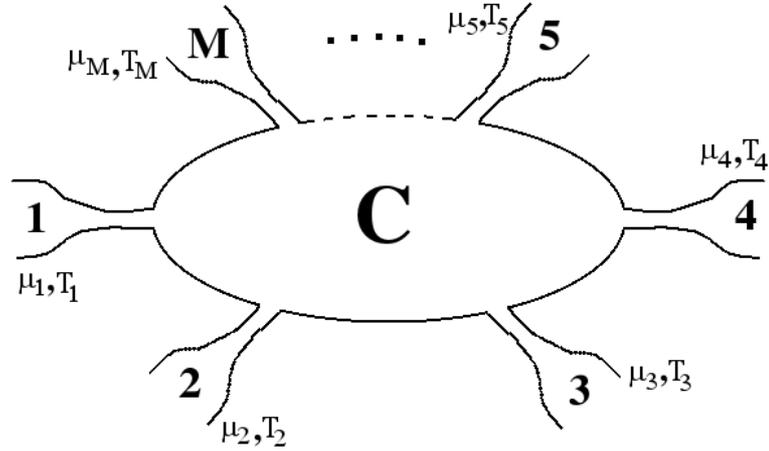


Figura 2.7: Representación esquemática del problema general de transporte cuántico. El mismo consta de un sistema central C conectado a M reservorios, cada uno con un potencial químico μ_α y una temperatura T_α con $\alpha = 1, \dots, M$.

donde los operadores \hat{c}_l corresponden a los sitios del sistema central. El índice $l\alpha$ indica los sitios del sistema central a los cuales se encuentra acoplado el reservorio α , mientras que $t_{k\alpha, l\alpha}$ indica el elemento de matriz de salto entre el grado de libertad $k\alpha$ del reservorio α y el sitio $l\alpha$ del sistema central. Este Hamiltoniano de contacto corresponde a la situación más general de contacto entre M reservorios y el sistema central. En la Sección 2.2.3 consideraremos algunas aproximaciones para simplificar el problema.

Finalmente, el Hamiltoniano del sistema central $\hat{H}_{sys}(t)$ se representa de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{sys}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t), \quad (2.79)$$

donde $\hat{H}'(t)$ contiene toda la dependencia temporal del problema. En principio este término puede dejarse sin especificar debido a que los resultados que se presentan a continuación no dependen de la forma de \hat{H}_{sys} .

2.2.2. Cálculo de corrientes

Estamos interesados en obtener los operadores corriente de carga (\hat{J}^e) y corriente de calor (\hat{J}^Q) en los reservorios y sus respectivos valores medios. Consideremos en primer lugar la corriente de carga que fluye del sistema central hacia el reservorio

α . La misma se puede calcular a partir de la variación del número de partículas del reservorio α representado por el operador

$$\hat{N}_\alpha = \sum_{k\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger \hat{c}_{k\alpha}. \quad (2.80)$$

La corriente entonces se escribe como

$$J_\alpha^e = \langle \hat{J}_\alpha^e \rangle = -e \left\langle \frac{\partial \hat{N}_\alpha}{\partial t} \right\rangle = -\frac{ie}{\hbar} \langle [H_{total}, \hat{N}_\alpha] \rangle, \quad (2.81)$$

donde e es la carga elemental ($e > 0$). Es fácil ver que

$$[\hat{H}_{res}, \hat{N}_\alpha] = [\hat{H}_{sys}, \hat{N}_\alpha] = 0, \quad (2.82)$$

debido a que el número de partículas en el reservorio α debe conservarse en el caso de no encontrarse acoplado al sistema central. Por lo tanto la corriente se reduce a calcular el conmutador con el Hamiltoniano \hat{H}_{cont} y se obtiene que el valor medio de la corriente que fluye del sistema al reservorio α a tiempo t es:

$$J_\alpha^e = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k\alpha, l\alpha} \left(t_{k\alpha, l\alpha} \langle \hat{c}_{k\alpha}^\dagger \hat{c}_{l\alpha} \rangle - t_{k\alpha, l\alpha}^* \langle \hat{c}_{l\alpha}^\dagger \hat{c}_{k\alpha} \rangle \right), \quad (2.83)$$

mientras que el operador correspondiente resulta ser

$$\hat{J}_\alpha^e(t) = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k\alpha, l\alpha} \left(t_{k\alpha, l\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{l\alpha}(t) - t_{k\alpha, l\alpha}^* \hat{c}_{l\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{k\alpha}(t) \right). \quad (2.84)$$

A esta altura resulta conveniente describir el valor medio de la corriente dado en la Ec. (2.83) como

$$J_\alpha^e(t) = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{ie}{\hbar} \sum_{k\alpha, l\alpha} \left(t_{k\alpha, l\alpha} \langle \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(t') \hat{c}_{l\alpha}(t) \rangle - t_{k\alpha, l\alpha}^* \langle \hat{c}_{l\alpha}^\dagger(t') \hat{c}_{k\alpha}(t) \rangle \right), \quad (2.85)$$

y utilizar la definición de la función de Green *menor* dada en la Ec. (2.26). De este modo, el valor medio de la corriente puede expresarse como

$$J_\alpha^e(t) = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{e}{\hbar} \sum_{k\alpha, l\alpha} \left(t_{k\alpha, l\alpha} G_{l\alpha, k\alpha}^<(t, t') - t_{k\alpha, l\alpha}^* G_{k\alpha, l\alpha}^<(t, t') \right). \quad (2.86)$$

Si además utilizamos la propiedad de que $G_{j,j'}^<(t, t') = -[G_{j,j'}^<(t, t')]^*$, la expresión final para la corriente media resulta

$$J_\alpha^e(t) = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left[\sum_{k\alpha, l\alpha} t_{k\alpha, l\alpha} G_{l\alpha, k\alpha}^<(t, t') \right]. \quad (2.87)$$

Ahora calculamos la corriente de calor J^Q que fluye hacia los reservorios. La corriente de calor que fluye hacia el reservorio α se define a partir de la corriente de energía J^E y la corriente de carga J^e de la siguiente manera:

$$J_\alpha^Q = J_\alpha^E - \frac{\mu_\alpha}{e} J_\alpha^e. \quad (2.88)$$

Entonces, para calcular la corriente de calor, basta con calcular la corriente de energía y utilizar el resultado obtenido anteriormente para la corriente de carga.

La corriente de energía se calcula de manera completamente análoga a la implementada con la corriente de carga. Para eso observamos que dicha corriente puede calcularse a partir de la variación del operador energía del reservorio α representado por operador

$$\hat{H}_\alpha = \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger \hat{c}_{k\alpha}. \quad (2.89)$$

El valor medio de la corriente de energía que fluye hacia el reservorio α se escribe entonces como

$$J_\alpha^E = \left\langle \frac{\partial \hat{H}_\alpha}{\partial t} \right\rangle = -\frac{ie}{\hbar} \langle [\hat{H}_{total}, \hat{H}_\alpha] \rangle. \quad (2.90)$$

Al igual que en el caso de la corriente de carga, es fácil ver que

$$[\hat{H}_{res}, \hat{H}_\alpha] = [\hat{H}_{sys}, \hat{H}_\alpha] = 0, \quad (2.91)$$

debido a que la energía del reservorio α debe conservarse en el caso de no encontrarse acoplado al sistema central. Por lo tanto la corriente se reduce a calcular el conmutador con el Hamiltoniano \hat{H}_{cont} y se obtiene que el valor medio de la corriente de energía que fluye del sistema al reservorio α es:

$$J_\alpha^E = \frac{i}{\hbar} \sum_{k\alpha, l\alpha} \varepsilon_{k\alpha} \left(t_{k\alpha, l\alpha} \langle \hat{c}_{k\alpha}^\dagger \hat{c}_{l\alpha} \rangle - t_{k\alpha, l\alpha}^* \langle \hat{c}_{l\alpha}^\dagger \hat{c}_{k\alpha} \rangle \right), \quad (2.92)$$

mientras que el operador correspondiente resulta ser

$$\hat{J}_\alpha^E(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{k\alpha, l\alpha} \varepsilon_{k\alpha} \left(t_{k\alpha, l\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{l\alpha}(t) - t_{k\alpha, l\alpha}^* \hat{c}_{l\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{k\alpha}(t) \right). \quad (2.93)$$

Siguiendo un procedimiento análogo al realizado con la corriente de carga, la corriente de energía puede escribirse como

$$J_\alpha^E(t) = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{2}{\hbar} \text{Re} \left[\sum_{k\alpha, l\alpha} \varepsilon_{k\alpha} t_{k\alpha, l\alpha} G_{l\alpha, k\alpha}^<(t, t') \right]. \quad (2.94)$$

Por lo tanto el valor medio de la corriente de calor puede escribirse como

$$J_\alpha^Q(t) = J_\alpha^E(t) - \frac{\mu_\alpha}{e} J_\alpha^e(t) = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{2}{\hbar} \text{Re} \left[\sum_{k\alpha, l\alpha} (\varepsilon_{k\alpha} - \mu_\alpha) t_{k\alpha, l\alpha} G_{l\alpha, k\alpha}^<(t, t') \right]. \quad (2.95)$$

Cabe destacar que los resultados presentados en las Ecs. (2.87) y (2.95) son válidos para cualquier elección del Hamiltoniano $\hat{H}_{sys}(t)$ del sistema central dado que solo dependen del Hamiltoniano de contacto elegido. Las particularidades de cada Hamiltoniano $\hat{H}_{sys}(t)$, como la geometría del sistema o el tipo de dependencia temporal, aparecerán en las funciones de Green $G_{l, k\alpha}^<(t, t')$, que calcularemos en la Sección 2.2.3.

2.2.3. Cálculo de funciones de Green

En esta Sección, aplicaremos en forma específica las ideas presentadas en la Sección 2.1 a un problema de transporte como el introducido en la Sección 2.2.1. Si pensamos en separar el Hamiltoniano total de la siguiente manera,

$$H_{total} = (H_{res} + H_{sys}) + H_{cont}, \quad (2.96)$$

podemos escribir la ecuación de Dyson para la función de Green para este sistema como

$$G_{j, j'}(\tau, \tau') = g_{j, j'}^0(\tau, \tau') + \sum_{j_1, j_2} \int_C d\tau_1 G_{j, j_1}(\tau, \tau_1) (H_{cont})_{j_1, j_2} g_{j_2, j'}^0(\tau_1, \tau'), \quad (2.97)$$

donde los índices j, j', j_1 y j_2 corresponden grados de libertad del sistema total, es decir del sistema central y de los reservorios, mientras que g^0 corresponde a la función de Green del Hamiltoniano $H_0(t) = H_{res} + H_{sys}(t)$. Lo único que resta es especializar los índices j y j' para obtener las funciones de Green que nos interesan. Para simplificar un poco el problema general vamos a realizar dos aproximaciones que se mantendrán por el resto del trabajo. La primera es considerar que cada reservorio α se acopla a un único sitio l_α del sistema central. Esto permite eliminar todas las sumatorias en l_α . Una segunda aproximación es que el elemento de matriz t_{k_α, l_α} no depende del valor particular de k_α , es decir que $t_{k_\alpha, l_\alpha} = t_\alpha$ para todo k_α . Estas dos aproximaciones no son necesarias debido a que la resolución que se presenta a continuación es trivialmente extensible al caso general, simplemente se hicieron para simplificar el problema al ser abordado por primera vez.

Primero consideremos el caso particular en que uno de los índices pertenece al sistema central mientras que el otro se encuentra en el reservorio α , Esta función de Green es la que nos resulta útil a la hora de calcular las corrientes de carga y de calor. La misma se puede escribir a partir de la Ec. (2.97) especializando en $j = l$ y $j' = k_\alpha$:

$$G_{l, k_\alpha}(\tau, \tau') = t_\alpha^* \int_C d\tau_1 G_{l, l_\alpha}(\tau, \tau_1) g_{k_\alpha, k_\alpha}^0(\tau_1, \tau'), \quad (2.98)$$

La ausencia de un término $g_{l, k_\alpha}^0(\tau, \tau')$ se debe a que el Hamiltoniano H_0 no mezcla los grados de libertad del sistema central con los de los reservorios y por lo tanto ese término es nulo. Tampoco acopla los grados de libertad de reservorios distintos, ni distintos grados de libertad dentro de un mismo reservorio, por eso el último término resulta diagonal. Finalmente, el elemento de matriz del Hamiltoniano de contacto es $(H_{cont})_{l_\alpha, k_\alpha} = t_\alpha^*$, lo que lleva al resultado de la Ec. (2.98).

El segundo caso interesante es aquel en que los dos índices corresponden a grados de libertad de los reservorios. Más adelante encontraremos que las funciones de Green cuyos índices se encuentran en reservorios distintos resultan útiles para calcular correlaciones de corriente. En este caso es mejor escribir la ecuación de Dyson de otra manera:

$$G_{j, j'}(\tau, \tau') = g_{j, j'}^0(\tau, \tau') + \sum_{j_1, j_2} \int_C d\tau_1 g_{j, j_1}^0(\tau, \tau_1) (H_{cont})_{j_1, j_2} G_{j_2, j'}(\tau_1, \tau'), \quad (2.99)$$

y especializar en $j = k\alpha$ y $j' = k\beta$. En este caso la expresión queda de la siguiente manera:

$$G_{k\alpha, k\beta}(\tau, \tau') = \delta_{\alpha, \beta} \delta_{k\alpha, k\beta} g_{k\alpha, k\alpha}^0(\tau, \tau') + \int_C d\tau_1 g_{k\alpha, k\alpha}^0(\tau, \tau_1) (H_{cont})_{k\alpha, l\alpha} G_{l\alpha, k\beta}(\tau_1, \tau'). \quad (2.100)$$

Reemplazando con la Ec. (2.98) y usando que $(H_{cont})_{k\alpha, l\alpha} = t_\alpha$, la Ec. (2.100) se puede escribir como

$$G_{k\alpha, k\beta}(\tau, \tau') = \delta_{\alpha, \beta} \delta_{k\alpha, k\beta} g_{k\alpha, k\alpha}^0(\tau, \tau') + t_\alpha t_\beta^* \int_C d\tau_1 d\tau_2 \times g_{k\alpha, k\alpha}^0(\tau, \tau_1) G_{l\alpha, l\beta}(\tau_1, \tau_2) g_{k\beta, k\beta}^0(\tau_2, \tau'). \quad (2.101)$$

Como se puede apreciar a partir de las Ecs. (2.98) y (2.101), las funciones de Green que necesitamos calcular para determinar las corrientes y las fluctuaciones de corriente dependen de las funciones de Green g^0 de los reservorios desacoplados (que son conocidas) y de las funciones de Green con índices l, l' en el sistema central. Entonces nos resta encontrar estas funciones. Para ello debemos plantear la ecuación de Dyson (2.97) con índices en el sistema central:

$$G_{l, l'}(\tau, \tau') = g_{l, l'}^0(\tau, \tau') + \sum_{\alpha, k\alpha} \int_C d\tau_1 G_{l, k\alpha}(\tau, \tau_1) (H_{cont})_{k\alpha, l\alpha} g_{l\alpha, l'}^0(\tau_1, \tau'). \quad (2.102)$$

Utilizando el resultado de la Ec. (2.98) y que $(H_{cont})_{k\alpha, l\alpha} = t_\alpha$,

$$G_{l, l'}(\tau, \tau') = g_{l, l'}^0(\tau, \tau') + \sum_\alpha \int_C d\tau_1 d\tau_2 G_{l, l\alpha}(\tau, \tau_1) \Sigma_\alpha(\tau_1, \tau_2) g_{l\alpha, l'}^0(\tau_2, \tau'), \quad (2.103)$$

donde se definió la autoenergía

$$\Sigma_\alpha(\tau_1, \tau_2) = |t_\alpha|^2 \sum_{k\alpha} g_{k\alpha, k\alpha}^0(\tau_1, \tau_2). \quad (2.104)$$

Antes resolver la ecuación de Dyson (2.103), veamos qué forma tienen las distintas componentes de la autoenergía. Debido a la definición (2.104), las componentes *retardada*, *avanzada*, *menor* y *mayor* de la autoenergía, se escriben en términos de las respectivas componentes de las funciones de Green de los reservorios desacoplados de

la siguiente manera:

$$\Sigma_{\alpha}^{r,a}(t_1, t_2) = |t_{\alpha}|^2 \sum_{k\alpha} g_{k\alpha, k\alpha}^{0,r,a}(t_1, t_2), \quad (2.105)$$

$$\Sigma_{\alpha}^{<, >}(t_1, t_2) = |t_{\alpha}|^2 \sum_{k\alpha} g_{k\alpha, k\alpha}^{0,<, >}(t_1, t_2). \quad (2.106)$$

A su vez, las funciones de Green g^0 de reservorios desacoplados representados por Hamiltonianos de electrones libres (ver Ec. (2.77)) se escriben como

$$g_{k\alpha, k\alpha}^{0,r}(t_1, t_2) = -i\theta(t_1 - t_2)e^{-i\varepsilon_{k\alpha}/\hbar(t_1 - t_2)}, \quad (2.107)$$

$$g_{k\alpha, k\alpha}^{0,a}(t_1, t_2) = i\theta(t_2 - t_1)e^{-i\varepsilon_{k\alpha}/\hbar(t_1 - t_2)}, \quad (2.108)$$

$$g_{k\alpha, k\alpha}^{0,<, >}(t_1, t_2) = \lambda_{\alpha}^{<, >}(\varepsilon_{k\alpha})e^{-i\varepsilon_{k\alpha}/\hbar(t_1 - t_2)}, \quad (2.109)$$

siendo

$$\lambda_{\alpha}^{<}(\varepsilon_{k\alpha}) = if_{\alpha}(\varepsilon_{k\alpha}), \quad (2.110)$$

$$\lambda_{\alpha}^{>}(\varepsilon_{k\alpha}) = -i[1 - f_{\alpha}(\varepsilon_{k\alpha})], \quad (2.111)$$

con $f_{\alpha}(\varepsilon)$ la función de Fermi del reservorio α con potencial químico μ_{α} y temperatura T_{α} :

$$f_{\alpha}(\hbar\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta_{\alpha}(\varepsilon - \mu)}}, \quad (2.112)$$

donde $\beta_{\alpha} = 1/k_B T_{\alpha}$.

Sus respectivas transformadas de Fourier pueden calcularse y se obtiene

$$\Sigma_{\alpha}^{r,a,<, >}(t_1, t_2) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t_1 - t_2)} \Sigma_{\alpha}^{r,a,<, >}(\omega), \quad (2.113)$$

donde

$$\Sigma_{\alpha}^r(\omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Gamma_{\alpha}(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \equiv \Gamma_{\alpha}^r(\omega), \quad (2.114)$$

$$\Sigma_{\alpha}^a(\omega) = [\Sigma_{\alpha}^r(\omega)]^*, \quad (2.115)$$

$$\Sigma_{\alpha}^{<, >}(\omega) = \lambda_{\alpha}^{<, >}(\omega)\Gamma_{\alpha}(\omega) \equiv \Gamma_{\alpha}^{<, >}(\omega), \quad (2.116)$$

y se definió la función espectral del reservorio α como

$$\Gamma_\alpha(\omega) \equiv 2\pi|t_\alpha|^2\rho_\alpha(\omega) = 2\pi|t_\alpha|^2 \sum_{k\alpha} \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}). \quad (2.117)$$

Ahora que presentamos las distintas componentes de la autoenergía, podemos volver a la ecuación de Dyson (2.103). La misma es idéntica a la ecuación presentada en la Ec. (2.36). Se podría seguir entonces el mismo procedimiento para resolver. Es decir, primero tomar la componente *retardada* de la ecuación:

$$G_{l,l'}^r(t,t') = g_{l,l'}^{0,r}(t,t') + \sum_\alpha \int dt_1 dt_2 G_{l,l\alpha}^r(t,t_1) \Sigma_\alpha^r(t_1,t_2) g_{l\alpha,l'}^{0,r}(t_1,t'), \quad (2.118)$$

donde $g_{l,l'}^{0,r}$ es la función de Green *retardada* del sistema central aislado de los reservorios. Sin embargo esta función no es conocida *a priori* y sería necesario calcularla antes de resolver esta ecuación. No obstante, en principio, se podría resolver la Ec. (2.118) y encontrar G^r (y en consecuencia también G^a , pues $G^a = (G^r)^\dagger$) y luego utilizar estas funciones de Green para resolver la ecuación de las componentes *menor* y *mayor*,

$$G_{l,l'}^{<, >}(t,t') = \sum_\alpha \int dt_1 dt_2 G_{l,l\alpha}^r(t,t_1) \Sigma_\alpha^{<, >}(t_1,t_2) G_{l\alpha,l'}^a(t_1,t'), \quad (2.119)$$

donde el primer término de la Ec. (2.75), que contiene la función de Green $g_{l_1,l_2}^{0,<, >}$ fue descartado debido a que, como se mencionó anteriormente, se puede demostrar que solo tiene importancia en el régimen transitorio [48].

Como se puede ver, todo queda escrito en términos de la función de Green *retardada* con índices en el sistema central. Lo que resta hacer es encontrarla. En lugar de resolver la Ec. (2.118), resulta conveniente plantear el problema de otra manera, con el Hamiltoniano total separado de la siguiente manera:

$$H_{total} = (H_{res} + H_0 + H_{cont}) + H'(t), \quad (2.120)$$

y escribimos la ecuación de Dyson correspondiente:

$$G_{j,j'}(\tau, \tau') = G_{j,j'}^0(\tau, \tau') + \sum_{j_1, j_2} \int_C d\tau_1 G_{j,j_1}(\tau, \tau_1) (H'(\tau_1))_{j_1, j_2} G_{j_2, j'}^0(\tau_1, \tau'), \quad (2.121)$$

donde ahora G^0 representa las funciones de Green de la parte estacionaria del Hamiltoniano total, es decir del sistema central estacionario y los reservorios conectados ($H_{res} + H_0 + H_{cont}$), excluyendo la dependencia temporal, que se encuentra totalmente incluida en el término $H'(t)$. La solución que se obtenga resolviendo esta ecuación para la función de Green *retardada* debe ser exactamente la misma que la que se obtiene al resolver la Ec. (2.118) debido a que, si bien la separación que se hace del Hamiltoniano para obtener la ecuación es arbitraria, el Hamiltoniano total es siempre el mismo.

Entonces estamos interesados en resolver la ecuación

$$G_{l,l'}^r(t, t') = G_{l,l'}^{0,r}(t, t') + \sum_{j_1, j_2} \int dt_1 G_{l,j_1}^r(t, t_1) (H'(t_1))_{j_1, j_2} G_{j_2, l'}^{0,r}(t_1, t'). \quad (2.122)$$

Si bien se mencionó que todas las ecuaciones con el mismo Hamiltoniano deben necesariamente llevar a las mismas soluciones, cabe destacar que esta forma obtenida resulta particularmente apropiada para obtener soluciones perturbativas en el potencial dependiente del tiempo $H'(t)$.

La solución de la Ec. (2.122) es sencilla en el espacio de frecuencias por lo tanto es conveniente realizar la transformada de Fourier en la diferencia de tiempos $t - t'$. La función $\hat{G}^r(t, t')$ no es de equilibrio y por lo tanto no depende únicamente de la diferencia de tiempos $t - t'$. En este caso la transformada resulta:

$$\hat{G}^r(t, t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \hat{G}^r(t, \omega). \quad (2.123)$$

Por otra parte, la función de Green $\hat{G}^{0,r}(t, t')$ corresponde a un problema estacionario y por lo tanto depende solo de la diferencia de tiempos $t - t'$, con lo cual

$$\hat{G}^{0,r}(t, t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \hat{G}^{0,r}(\omega). \quad (2.124)$$

Por último conviene escribir el término $H'(t)$, que se supone con dependencia

armónica, de la siguiente manera:

$$\hat{H}'(t) = \sum_{k=\pm 1} \hat{V}(k) e^{-ik\Omega_0 t}. \quad (2.125)$$

Combinando todos estos elementos, podemos escribir la Ec. (2.122) de este modo:

$$\hat{G}^r(t, \omega) = \hat{G}^{0,r}(\omega) + \sum_{k=\pm 1} e^{-ik\Omega_0 t} \hat{G}^r(t, \omega + k\Omega_0) \hat{V}(k) \hat{G}^{0,r}(\omega). \quad (2.126)$$

Cabe destacar que la Ec. (2.126) presenta la misma estructura que la dinámica de un problema en el cual electrones con energía ω interactúan con un potencial V mediante la absorción o emisión de un fotón de energía Ω_0 teniendo en consecuencia una energía final $\omega \pm \Omega_0$. Debido a la naturaleza recursiva de esta ecuación se puede ver que procesos de absorción o emisión de varios fotones también son posibles. La resolución de la Ec. (2.126) lleva a la solución del problema.

Antes de resolver esta ecuación, algo que dejaremos para la siguiente sección, es conveniente hacer unas observaciones. La primera es que debido a que las ecuaciones tienen una dependencia armónica en t , la función de Green *retardada* puede escribirse como una serie de Fourier:

$$\hat{G}^r(t, \omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{\mathcal{G}}(n, \omega) e^{-in\Omega_0 t}. \quad (2.127)$$

A las funciones $\hat{\mathcal{G}}(n, \omega)$ se las denomina componentes de Floquet debido a que la ecuación anterior tiene una estructura similar a la propuesta por Floquet para las funciones de onda en el caso de Hamiltonianos que dependen del tiempo en forma periódica. Las componentes de Floquet satisfacen la siguiente identidad:

$$\hat{\mathcal{G}}(n, \omega) - \hat{\mathcal{G}}^\dagger(-n, \omega_n) = -i \sum_{n'} \hat{\mathcal{G}}(n + n', \omega_{-n'}) \hat{\Gamma}(\omega_{-n'}) \hat{\mathcal{G}}^\dagger(n', \omega_{-n'}), \quad (2.128)$$

donde $\omega_n = \omega + n\Omega_0$ y los elementos de matriz de $\hat{\Gamma}(\omega)$ son $\Gamma_{l,l'}(\omega) = \sum_{\alpha} \delta_{l,l\alpha} \delta_{l',l\alpha} \Gamma_{\alpha}(\omega)$, con Γ_{α} la función espectral del reservorio α definida en la Ec. (2.117).

Para demostrar esta identidad podemos comenzar con la definición de función de Green retardada de la Ec. (2.28) y utilizar la expresión para las funciones de Green

menor y mayor de la Ec. (2.119) junto con la representación de Floquet de la Ec. (2.127) combinada con la transformada (2.123). Todo esto nos lleva a

$$\hat{G}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \sum_{k_1, k_2} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i[\Omega_0(k_1 t - k_2 t') + \omega(t - t')]} \hat{\mathcal{G}}(k_1, \omega) \hat{\Gamma}(\omega) \hat{\mathcal{G}}^\dagger(k_2, \omega). \quad (2.129)$$

Realizando la transformada de Fourier en $t - t'$ de la Ec. (2.123) y quedándonos con el n -ésimo coeficiente de la serie de Fourier de la Ec. (2.127) llegamos a la siguiente expresión:

$$\hat{\mathcal{G}}(n, \omega) = \sum_{n'} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\hat{\mathcal{G}}(n + n', \omega') \hat{\Gamma}(\omega') \hat{\mathcal{G}}^\dagger(n', \omega')}{\omega - \omega'_{n'} + i\eta}, \quad (2.130)$$

con $\eta > 0$. Reemplazando directamente en el lado izquierdo de la Ec. (2.128) con la expresión obtenida y utilizando que

$$\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} = \mathcal{P} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega'} \right\} - i\pi\delta(\omega - \omega'), \quad (2.131)$$

se demuestra la identidad (2.128). Finalmente, es importante destacar que dicha identidad se reduce, cuando $V_0 = 0$, a la siguiente identidad entre funciones de Green de equilibrio:

$$\hat{\rho}(\omega) \equiv \hat{G}^{0,r}(\omega) - \hat{G}^{0,r^\dagger}(\omega) = -i\hat{G}^{0,r}(\omega) \hat{\Gamma}(\omega) \hat{G}^{0,r^\dagger}(\omega). \quad (2.132)$$

2.2.4. Solución de la Ecuación de Dyson

Existe un método recursivo, introducido en la Ref. [34], que permite resolver la Ec. (2.126). En esta Sección se presentará una versión simplificada de dicho método destinada a resolver el problema particular de este trabajo, para su formulación más general ver la mencionada referencia.

Antes de comenzar con el método, es necesario encontrar la función de Green \hat{G}^0 , que corresponde al problema estacionario del sistema central conectado a los reservorios. Este Hamiltoniano estacionario puede ser separado de la siguiente manera:

$$H_{st} = (H_{res} + H_0) + H_{cont}, \quad (2.133)$$

lo que lleva a una ecuación de Dyson cuya solución es

$$\hat{G}^{0,r}(\omega) = [(\omega + i\eta)\hat{1} - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}^r(\omega)]^{-1}, \quad (2.134)$$

donde $\eta > 0$, y $\Sigma^r(\omega) = \sum_{\alpha} \Sigma_{\alpha}^r(\omega)$, con $\Sigma_{\alpha}^r(\omega)$ la componente *retardada* de la autoenergía definida en la Ec. (2.114).

Una vez calculada esta función, el primer paso para encontrar las componentes de Floquet-Fourier $\hat{\mathcal{G}}(k, \omega)$ es fijar una frecuencia ω , que permite encontrar dichas componentes para esta frecuencia. El siguiente paso es definir un corte K , que determina el número de frecuencias que vamos a considerar y de este modo fija el número de ecuaciones acopladas que tendremos. Dada una elección de K tendremos $2K + 1$ ecuaciones de la forma (2.126) para las frecuencias $\omega - K\Omega_0, \dots, \omega, \dots, \omega + K\Omega_0$.

Por definición de corte, la Ec. (2.126) centrada en la frecuencia $\omega + K\Omega_0$ solo se acopla a aquella centrada en $\omega + (K - 1)\Omega_0$:

$$\hat{G}^r(t, \omega + K\Omega_0) [\hat{G}^{0,r}(\omega + K\Omega_0)]^{-1} = \hat{1} + e^{i\Omega_0 t} \hat{G}^r(t, \omega + (K - 1)\Omega_0) \hat{V}(-1), \quad (2.135)$$

donde se multiplicó a derecha por la inversa de $\hat{G}^{0,r}(\omega + K\Omega_0)$. Por lo tanto la función de Green $\hat{G}^r(t, \omega + K\Omega_0)$ puede ser expresada en términos de $\hat{G}^r(t, \omega + (K - 1)\Omega_0)$ y puede ser eliminada substituyendo la correspondiente expresión en la ecuación centrada en $\omega + (K - 1)\Omega_0$:

$$\begin{aligned} \hat{G}^r(t, \omega + (K - 1)\Omega_0) & \left\{ \left[\hat{G}^{0,r}(\omega + (K - 1)\Omega_0) \right]^{-1} - \hat{V}(-1) \hat{G}^{0,r}(\omega + K\Omega_0) \hat{V}(1) \right\} \\ & = \hat{1} + e^{i\Omega_0 t} \hat{G}^r(t, \omega + (K - 2)\Omega_0) \hat{V}(-1) + e^{-i\Omega_0 t} \hat{G}^{0,r}(t, \omega + K\Omega_0) \hat{V}(1). \end{aligned} \quad (2.136)$$

Este procedimiento puede ser repetido en forma sistemática para ir eliminando los modos de mayor frecuencia.

De manera análoga, es posible comenzar por la ecuación centrada en la frecuencia $\omega - K\Omega_0$ e implementar una substitución similar para ir eliminando las frecuencias más

bajas. En el paso m de este método se llega a

$$\begin{aligned} \hat{G}^r(t, \omega \pm m\Omega_0) [\hat{g}^{\pm m}(\omega \pm m\Omega_0)]^{-1} &= \hat{1} + e^{\pm i\Omega_0 t} \hat{G}^r(t, \omega + \pm(m-1)\Omega_0) \hat{V}(\mp 1) \\ &\quad + e^{\mp i\Omega_0 t} \hat{\gamma}^{\pm m}(t, \omega), \end{aligned} \quad (2.137)$$

donde

$$[\hat{g}^{\pm m}(\omega \pm m\Omega_0)]^{-1} = [\hat{G}^{0,r}(\omega \pm m\Omega_0)]^{-1} - \hat{V}(\mp 1) \hat{g}^{\pm(m+1)}(\omega \pm (m+1)\Omega_0) \hat{V}(\pm 1), \quad (2.138)$$

con $\hat{g}^{\pm K}(\omega \pm K\Omega_0) \equiv \hat{G}^{0,r}(\omega \pm K\Omega_0)$ y

$$\hat{\gamma}^{\pm m}(t, \omega) = [\hat{1} + e^{\mp i\Omega_0 t} \hat{\gamma}^{\pm(m+1)}(t, \omega)] \hat{g}^{\pm(m+1)}(\omega \pm (m+1)\Omega_0) \hat{V}(\pm 1), \quad (2.139)$$

con $\hat{\gamma}^{\pm K}(t, \omega) \equiv 0$.

Finalmente, este método permite escribir

$$\hat{G}^r(t, \omega) = \sum_{k=-K}^K \hat{\mathcal{G}}(k, \omega) e^{-ik\Omega_0 t}, \quad (2.140)$$

donde

$$\hat{\mathcal{G}}(0, \omega) = \left\{ \left[\hat{G}^{0,r}(\omega) \right]^{-1} - \hat{V}(-1) \hat{g}^{+1}(\omega + \Omega_0) \hat{V}(1) - \hat{V}(1) \hat{g}^{-1}(\omega - \Omega_0) \hat{V}(-1) \right\}^{-1}, \quad (2.141)$$

$$\hat{\mathcal{G}}(k, \omega) = \hat{g}^{+k}(\omega + k\Omega_0) \hat{V}(+1) \hat{\mathcal{G}}(k-1, \omega), \quad \text{con } k > 0, \quad (2.142)$$

$$\hat{\mathcal{G}}(k, \omega) = \hat{g}^{-|k|}(\omega + k\Omega_0) \hat{V}(-1) \hat{\mathcal{G}}(k+1, \omega), \quad \text{con } k < 0. \quad (2.143)$$

Es importante destacar que el procedimiento descrito se basa en operaciones con matrices pequeñas de $N \times N$, siendo N el tamaño del sistema central, razón por la cual resulta muy eficiente desde el punto de vista numérico. Este es el método implementado numéricamente para encontrar las soluciones a los sistemas propuestos en este trabajo de Tesis.

Si bien el método presentado permite resolver el sistema de ecuaciones (2.126) a orden arbitrario en forma numérica de manera eficiente, para encontrar soluciones analíticas es conveniente resolver recurriendo a una expansión perturbativa en \hat{V} a

orden bajo. La solución a orden más bajo en \hat{V} se obtiene considerando los términos con $k = -1, 0, 1$. Para ello se escribe

$$\hat{G}^r(t, \omega) \approx \sum_{k=-1}^1 \hat{\mathcal{G}}(k, \omega) e^{-ik\Omega_0 t}. \quad (2.144)$$

Reemplazando en ambos miembros de la Ec. (2.126) e igualando término a término se obtiene:

$$\hat{\mathcal{G}}(0, \omega) = \hat{G}^{0,r}(\omega), \quad (2.145)$$

$$\hat{\mathcal{G}}(\pm 1, \omega) = \hat{G}^{0,r}(\omega_{\pm 1}) \hat{V}(\pm 1) \hat{G}^{0,r}(\omega). \quad (2.146)$$

Es fácil ver que esta solución perturbativa a orden más bajo en \hat{V} equivale a un corte de $K = 1$ en el método general descrito con anterioridad.

2.2.5. Algunas fórmulas útiles

En esta Sección presentaremos algunas fórmulas que resultarán útiles más adelante. Para empezar, las dos transformaciones realizadas sobre la función de Green retardada (la transformada de Fourier en $t - t'$ de la Ec. (2.123) y la serie de Fourier de la Ec. (2.127)) puede ser combinadas y extendidas a cualquier función $A(t, t')$ en un problema con dependencia periódica en el tiempo de frecuencia Ω_0 , dando lugar a la siguiente definición de componentes de Floquet-Fourier $A(k, \omega)$:

$$A(t, t') = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i[k\Omega_0 t + \omega(t-t')]} A(k, \omega). \quad (2.147)$$

Veamos algunas fórmulas útiles que involucran las componentes de Floquet-Fourier. Las primeras dos son consecuencia directa de la propiedad (2.31) que satisfacen las funciones de Green *retardada* y *avanzada* y de la propiedad (2.32) que satisfacen las funciones de Green *menor* y *mayor*:

$$G_{j,j'}^a(k, \omega) = [G_{j',j}^r(-k, \omega_k)]^*, \quad (2.148)$$

$$G_{j,j'}^{<, >}(k, \omega) = -[G_{j',j}^{<, >}(-k, \omega_k)]^*. \quad (2.149)$$

Otra es un caso particular de la identidad (2.128), cuando los dos índices son iguales y $k = 0$:

$$2i \operatorname{Im}[G_{l,l}^r(0, \omega)] = G_{l,l}^r(0, \omega) - G_{l,l}^r(0, \omega)^* = -i \sum_{\gamma, n} \Gamma_{\gamma}(\omega_{-n}) |G_{l,l\gamma}^r(n, \omega_{-n})|^2, \quad (2.150)$$

donde se usó la forma explícita de $\hat{\Gamma}(\omega)$.

Por otra parte, a partir de introducir los desarrollos de Floquet-Fourier de las funciones de Green *retardada* y *avanzada* en la Ec. (2.119) junto con la transformada de Fourier de la autoenergía, se obtienen las componentes de Floquet-Fourier de las funciones de Green *menor* y *mayor* en términos de las respectivas componentes de la función de Green *retardada*:

$$G_{l,l'}^{<, >}(k, \omega) = \sum_{\gamma, n} G_{l,l\gamma}^r(k+n, \omega_{-n}) \Gamma_{\gamma}^{<, >}(\omega_{-n}) G_{l'\gamma}^r(n, \omega_{-n})^*. \quad (2.151)$$

En particular, si los dos índices son iguales y $k = 0$:

$$G_{l,l}^{<, >}(0, \omega) = \sum_{\gamma, n} \Gamma_{\gamma}^{<, >}(\omega_{-n}) |G_{l,l\gamma}^r(n, \omega_{-n})|^2. \quad (2.152)$$

Debido a que el método numérico presentado en la Sección 2.2.4 permite obtener las componentes de Floquet-Fourier de la función de Green *retardada*, es conveniente expresar todo en términos de las mismas. Comencemos con el valor medio de la corriente de carga que se encuentra en la Ec. (2.87). Para ello necesitamos la componente *menor* de

$$\sum_{k\alpha} t_{\alpha} G_{l,k\alpha}(t, t') = \int_C d\tau_1 G_{l,l\alpha}(\tau, \tau_1) \Sigma_{\alpha}(\tau_1, \tau'), \quad (2.153)$$

donde el término derecho se obtuvo a partir de multiplicar la Ec. (2.98) por t_{α} , sumar sobre $k\alpha$ y utilizar la definición de autoenergía dada en la Ec. (2.104). Mediante la aplicación del teorema de Langreth (ver Sección 2.1.3) se obtiene

$$\sum_{k\alpha} t_{\alpha} G_{l,k\alpha}^{<, >}(t, t') = \int dt_1 [G_{l,l\alpha}^{<, >}(t, t_1) \Sigma_{\alpha}^A(t_1, t') + G_{l,l\alpha}^R(t, t_1) \Sigma_{\alpha}^{<, >}(t_1, t')]. \quad (2.154)$$

La componente *menor* es la que nos permite calcular la corriente de carga, mientras que la *mayor* también resultará necesaria para calcular las correlaciones de corriente. Podemos escribir las componentes de Floquet-Fourier del lado izquierdo de la Ec. (2.154) de la siguiente manera:

$$\sum_{k\alpha} t_\alpha G_{l,k\alpha}^{<, >}(t, t') = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i[k\Omega_0 t + \omega(t-t')]} \sum_{k\alpha} t_\alpha G_{l,k\alpha}^{<, >}(k, \omega), \quad (2.155)$$

mientras que para el lado derecho podemos escribir las componentes de Floquet-Fourier de las funciones de Green G^r y $G^{<, >}$ (de acuerdo a la Ec. (2.147)) y las transformadas de Fourier de las distintas componentes de la autoenergía:

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i[k\Omega_0 t + \omega(t-t')]} [G_{l,l\alpha}^{<, >}(k, \omega) \Sigma_\alpha^A(\omega) + G_{l,l\alpha}^R(k, \omega) \Sigma_\alpha^{<, >}(\omega)]. \quad (2.156)$$

Por unicidad del desarrollo de Floquet-Fourier encontramos que

$$\sum_{k\alpha} t_\alpha G_{l,k\alpha}^{<, >}(k, \omega) = G_{l,l\alpha}^{<, >}(k, \omega) \Sigma_\alpha^A(\omega) + G_{l,l\alpha}^R(k, \omega) \Sigma_\alpha^{<, >}(\omega). \quad (2.157)$$

Ahora que tenemos la componentes de Floquet-Fourier que nos interesan podemos volver a la fórmula del valor medio de la corriente de carga (2.87) y escribirla de la siguiente manera:

$$J_\alpha^e(t) = 2e \operatorname{Re} \left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-ik\Omega_0 t} \sum_{k\alpha} t_\alpha G_{l\alpha, k\alpha}^{<}(k, \omega) \right]. \quad (2.158)$$

Como se puede apreciar, el valor medio de la corriente depende del tiempo en forma periódica con frecuencia fundamental Ω_0 . En este trabajo nos concentraremos en la componente continua de esta corriente, es decir en

$$\bar{J}_\alpha^e = 2e \int \frac{d\omega}{2\pi} \operatorname{Re} \left[\sum_{k\alpha} t_\alpha G_{l\alpha, k\alpha}^{<}(0, \omega) \right], \quad (2.159)$$

$$= 2e \int \frac{d\omega}{2\pi} \operatorname{Re} [G_{l\alpha, l\alpha}^{<}(0, \omega) \Sigma_\alpha^A(\omega) + G_{l\alpha, l\alpha}^R(0, \omega) \Sigma_\alpha^{<}(\omega)]. \quad (2.160)$$

donde para la última igualdad se utilizó el resultado de la Ec. (2.157) para $k = 0$.

Debido a que $\Sigma^<(\omega) = -\Sigma^<(\omega)^*$ y $G_{l,l}^<(0, \omega) = -[G_{l,l}^<(0, \omega)]^*$, podemos escribir

$$\bar{J}_\alpha^e = 2e \int \frac{d\omega}{2\pi} \{G_{l\alpha, l\alpha}^<(0, \omega) i\text{Im}[\Sigma_\alpha^A(\omega)] + i\text{Im}[G_{l\alpha, l\alpha}^R(0, \omega)] \Sigma_\alpha^<(\omega)\}. \quad (2.161)$$

Si ahora utilizamos las Ecs. (2.150) y (2.152) y que $\text{Im}[\Sigma_\alpha^a(\omega)] = \pi \Gamma_\alpha(\omega)$ obtenemos que,

$$\bar{J}_\alpha^e = e \int \sum_\gamma \sum_k \frac{d\omega}{2\pi} [f_\alpha(\omega_k) - f_\gamma(\omega)] \Gamma_\alpha(\omega_k) \Gamma_\gamma(\omega) |G_{l\alpha, l\gamma}^r(k, \omega)|^2. \quad (2.162)$$

Una procedimiento análogo puede realizarse para calcular la corriente de energía. El único detalle a tener en cuenta es que aparecen términos de la forma

$$|t_\alpha|^2 \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} g_{k\alpha, k\alpha}^0(t, t'). \quad (2.163)$$

Veamos como caso particular la componente *menor* de este término.

$$|t_\alpha|^2 \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} g_{k\alpha, k\alpha}^{0, <}(t, t') = |t_\alpha|^2 \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} \lambda_\alpha^<(\varepsilon_{k\alpha}) e^{-i\varepsilon_{k\alpha}(t-t')}. \quad (2.164)$$

Su transformada de Fourier resulta

$$|t_\alpha|^2 \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} g_{k\alpha, k\alpha}^{0, <}(t, t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \omega \lambda_\alpha^<(\omega) \Gamma_\alpha(\omega) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \omega \Sigma_\alpha^<(\omega). \quad (2.165)$$

Lo mismo puede hacerse para las otras componentes de la autoenergía. Es fácil ver que la única diferencia con el caso de la corriente de carga es que las transformadas de Fourier de cada una de las componentes de la autoenergía queda acompañada por un ω . En consecuencia la fórmula para el promedio temporal de la corriente de energía es

$$\bar{J}_\alpha^E = \int \sum_\gamma \sum_k \frac{d\omega}{2\pi} \omega [f_\alpha(\omega_k) - f_\gamma(\omega)] \Gamma_\alpha(\omega_k) \Gamma_\gamma(\omega) |G_{l\alpha, l\gamma}^r(k, \omega)|^2, \quad (2.166)$$

y en consecuencia, el promedio temporal de la corriente de calor resulta

$$\bar{J}_\alpha^Q = \int \sum_\gamma \sum_k \frac{d\omega}{2\pi} (\omega - \mu_\alpha) [f_\alpha(\omega_k) - f_\gamma(\omega)] \Gamma_\alpha(\omega_k) \Gamma_\gamma(\omega) |G_{l\alpha, l\gamma}^r(k, \omega)|^2. \quad (2.167)$$

Además de las expresiones para las corrientes de carga, energía y calor, necesitaremos otras expresiones, en particular aquellas que aparecerán en el cálculo de correlaciones de corriente. En particular nos encontraremos con la combinación

$$\sum_{k\alpha, k\beta} t_\alpha^* t_\beta G_{k\alpha, k\beta}(\tau, \tau') = \delta_{\alpha, \beta} \Sigma_\alpha(\tau, \tau') + \int_C d\tau_1 d\tau_2 \Sigma_\alpha(\tau, \tau_1) G_{l\beta, l\beta}(\tau_1, \tau_2) \Sigma_\beta(\tau_2, \tau'), \quad (2.168)$$

que se obtiene multiplicando Ec. (2.101) por $t_\alpha^* t_\beta$.

Mediante la aplicación del teorema de Langreth (ver Sección 2.1.3) se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{k\alpha, k\beta} t_\alpha^* t_\beta G_{k\alpha, k\beta}^{<, >}(t, t') &= \delta_{\alpha, \beta} \Sigma_\alpha^{<, >}(t, t') + \frac{1}{\hbar^2} \int dt_1 dt_2 [\Sigma_\alpha^R(t, t_1) G_{l\beta, l\beta}^R(t_1, t_2) \Sigma_\beta^{<, >}(t_2, t') \\ &\quad + \Sigma_\alpha^R(t, t_1) G_{l\beta, l\beta}^{<, >}(t_1, t_2) \Sigma_\beta^A(t_2, t') \\ &\quad + \Sigma_\alpha^{<, >}(t, t_1) G_{l\beta, l\beta}^A(t_1, t_2) \Sigma_\beta^A(t_2, t')], \end{aligned} \quad (2.169)$$

y sus componentes de Floquet-Fourier resultan:

$$\begin{aligned} \sum_{k\alpha, k\beta} t_\alpha^* t_\beta G_{k\alpha, k\beta}^{<, >}(k, \omega) &= \delta_{k, 0} \delta_{\alpha, \beta} \Sigma_\alpha^{<, >}(\omega) + \Sigma_\alpha^R(\omega_k) G_{l\alpha, l\beta}^R(k, \omega) \Sigma_\beta^{<, >}(\omega) \\ &\quad + \Sigma_\alpha^R(\omega_k) G_{l\alpha, l\beta}^{<, >}(k, \omega) \Sigma_\beta^A(\omega) + \Sigma_\alpha^{<, >}(\omega_k) G_{l\alpha, l\beta}^A(k, \omega) \Sigma_\beta^A(\omega)]. \end{aligned} \quad (2.170)$$

Capítulo 3

Temperatura local en Bombeadores Cuánticos

Para estudiar el concepto de *temperatura local* se decidió estudiar el transporte de calor en bombeadores cuánticos. Con este fin, se siguió un procedimiento inspirado en un trabajo pionero realizado por H. L. Engquist y P. W. Anderson [60] en los años 80. La idea es la de introducir, en la descripción microscópica del sistema, un instrumento de medición, que juegue el rol de un *termómetro*. En general, el instrumento de medición (o punta de prueba) consiste en un sistema macroscópico en equilibrio (un reservorio denominado con la letra P) con una temperatura T_P y un potencial químico μ_P bien definidos. El mismo se encuentra acoplado débilmente al sistema de tal modo que no introduce alteraciones en los mecanismos de transporte que se llevan a cabo en el sistema que se desea estudiar. En este sentido hablaremos de que se trata de una punta de prueba no invasiva. En el caso particular de una punta de prueba que actúa como termómetro es razonable pedir que se encuentre en equilibrio termodinámico local con el sistema. Este concepto será definido en la Sección 3.2. Los resultados originales de este Capítulo fueron publicados en las Refs. [61] y [62].

3.1. Modelo

En la Figura 3.1 se puede observar el esquema del sistema a estudiar. Este modelo corresponde al dispositivo descrito en la Sección 1.4, es decir que se trata de un

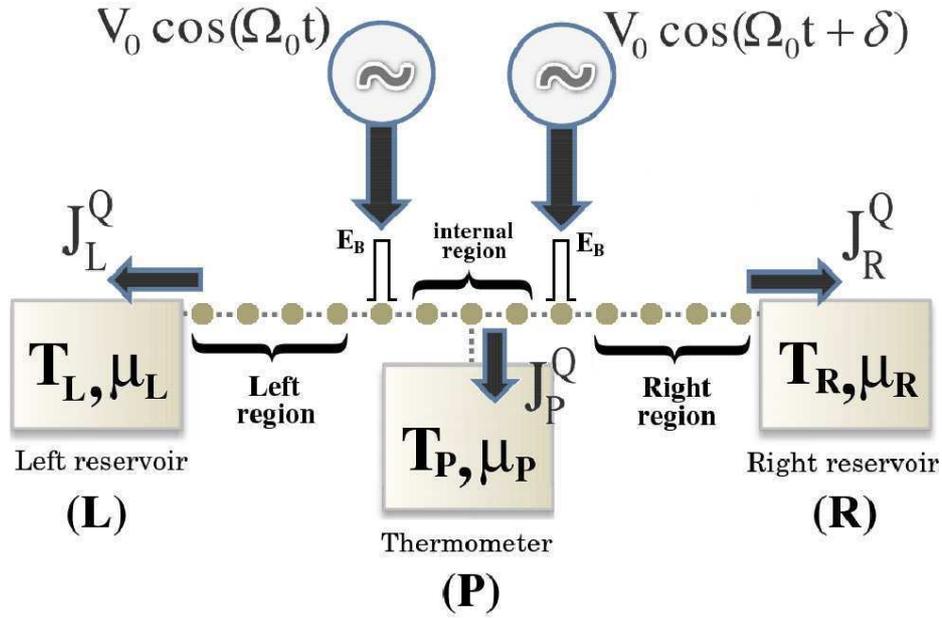


Figura 3.1: Esquema del dispositivo a estudiar. El sistema central consiste una cadena lineal con dos barreras de altura E_B que se encuentra conectada en sus extremos a dos reservorios (L y R). El tercer reservorio (P) representa la punta de prueba, débilmente acoplada al sistema. El transporte es inducido por el accionar de dos potenciales alternos (ambos con la misma amplitud V_0 y frecuencia Ω_0 pero con una diferencia de fase δ) aplicados sobre las barreras. Extraída de [62].

punto cuántico (modelado por una cadena lineal) conectado a dos cables (reservorios L y R) y llevado fuera del equilibrio por dos potenciales alternos desfasados aplicados sobre las paredes del punto cuántico. En la Sección 2.2.1 se formuló la descripción Hamiltoniana para un sistema de estas características.

El sistema a estudiar está descrito por un Hamiltoniano como el que se presenta en la Ec. (2.76) para el caso particular de dos reservorios. Es decir que, en este caso, el Hamiltoniano del sistema es

$$H_{sys}(t) = H_C(t) + \sum_{\alpha=L,R} (H_\alpha + H_{c\alpha}), \quad (3.1)$$

y los Hamiltonianos de contacto son como los de la Ec. (2.78) con la aproximación de que el elemento de matriz de acoplamiento no depende de $k\alpha$ y además, que cada

reservorio se acopla a un único sitio del sistema central. Bajo estas condiciones, el Hamiltoniano de contacto se escribe como

$$H_{cont} = \sum_{\alpha=L,R} t_{\alpha} \sum_{k_{\alpha}} \left(c_{k_{\alpha}}^{\dagger} c_{l_{\alpha}} + c_{l_{\alpha}}^{\dagger} c_{k_{\alpha}} \right), \quad (3.2)$$

donde $lL = 1$ y $lR = N$, siendo N el número de sitios de la cadena lineal que representa al punto cuántico. En otras palabras, el reservorio L se encuentra conectado al primer sitio de la cadena lineal mientras que el reservorio R se conecta al último, como se observa en la Figura 3.1.

A su vez, los reservorios están descriptos a través un Hamiltoniano de electrones libres como el que se encuentra en la Ec. (2.77).

Para estudiar este sistema es necesario incluir, a nivel de la descripción Hamiltoniana, un instrumento de medición (punta de prueba). Por lo tanto el sistema completo a estudiar se encuentra constituido por el sistema a estudiar, descripto por el Hamiltoniano (3.1) y el instrumento de medición (punta de prueba). Entonces, el Hamiltoniano total puede ser descripto de la siguiente manera:

$$H = H_{sys}(t) + H_{cP} + H_P, \quad (3.3)$$

donde H_P es el Hamiltoniano de la punta de prueba y H_{cP} describe el acoplamiento entre dicha punta de prueba y el sistema.

Para describir la punta de prueba se elige un Hamiltoniano de electrones libres como el de la Ec. (2.77):

$$H_P = \sum_{kP} \varepsilon_{kP} c_{kP}^{\dagger} c_{kP}, \quad (3.4)$$

mientras que el acoplamiento al sistema está dado por un Hamiltoniano de contacto

$$H_{cP} = t_P \sum_{kP} \left(c_{kP}^{\dagger} c_{lP} + c_{lP}^{\dagger} c_{kP} \right), \quad (3.5)$$

donde lP indica el sitio del sistema central (C) al cual se encuentra conectado la punta de prueba (reservorio P). Se supone que dicha punta de prueba es no invasiva, lo que implica suponer que el acoplamiento t_P con el sistema es lo suficientemente pequeño como para no introducir modificaciones en los procesos de transporte que se llevan a

cabo en el sistema central. Por tanto, t_P será tratado al orden más bajo en teoría de perturbaciones cuando sea necesario.

Como se mencionó en la Sección 2.2.1, la cadena lineal que representa al punto cuántico (sistema central C) puede ser descrito de la siguiente manera:

$$H_C(t) = H_0 + H'(t), \quad (3.6)$$

donde H_0 corresponde a un Hamiltoniano de electrones que en este trabajo de Tesis son considerados no interactuantes. Debido a que muchos de los resultados obtenidos no dependen del modelo particular por el momento no especificamos H_0 .

Por su parte, $H'(t)$ contiene toda la dependencia temporal del sistema central (i.e. los potenciales de compuerta alternos). Consideramos una función armónica con frecuencia Ω_0 , descrita por un Hamiltoniano como el de la Ec. (2.125).

3.2. Definición de temperatura local

El transporte de calor a lo largo del sistema central puede ocurrir debido a diferencias de temperatura o de potencial químico entre los reservorios o como resultado del bombeo debido a fuentes externas (en este caso los potenciales de compuerta alternos). En nuestro caso, los reservorios L y R a los que se encuentra conectado el sistema tienen ambos la misma temperatura T y el mismo potencial μ , así que el transporte solo es debido a la acción de los potenciales de compuerta alternos.

En una situación genérica, si la punta está conectada al sistema central a través de un sitio denominado lP , hay un flujo de calor entre ambos. Dependiendo de la temperatura a la que se encuentra la punta de prueba, el calor podría fluir desde la punta hacia el sistema o al revés. Se podría pensar que existe, en principio, una temperatura T_P de la punta de prueba para la cual no hay intercambio de calor (en promedio temporal) entre el sistema y la punta. Si no hay intercambio de calor, se podría pensar que la punta de prueba y el sitio al que se encuentra conectada tienen la misma “temperatura”. Esto motivaría una posible definición para la temperatura local del sitio (lP) al que se encuentra conectada la punta y la misma sería $T_{lP} = T_P$ cuando el flujo de calor es nulo. En otras palabras, la temperatura local del sitio lP corresponde a la temperatura que debería tener un reservorio acoplado al sistema a

través de dicho sitio para que el promedio temporal de la corriente de calor entre el sistema y la punta sea nulo. Esta es la definición de temperatura local que originalmente dimos en la Ref. [61].

En la Sección 2.2.5 se encontró la expresión analítica para la corriente de calor que fluye hacia el reservorio α (Ec. (2.167)) para un Hamiltoniano genérico $H_C(t)$ (correspondiente al sistema central) sin interacciones de muchos cuerpos. Consideremos ahora el caso particular de la corriente que fluye hacia el reservorio P en este sistema. Debido a que se trata de una punta no invasiva, podemos desarrollar la corriente a orden más bajo en t_P . Las funciones espectrales $\Gamma_\alpha(\omega)$ son proporcionales a $|t_\alpha|^2$ (ver Ec. (2.117)), por lo tanto la sumatoria en α sobre todos los reservorios puede ser restringida a L y R , que dan una contribución de orden $|t_P|^2$. El término $\alpha = P$ puede ser descartado debido a que daría una contribución de orden $|t_P|^4$. Una suposición adicional es la de trabajar en la aproximación *wide band*, considerando que $\Gamma_P(\omega) \sim cte$. Todas estas suposiciones no son necesarias para resolver el problema numéricamente pero permiten encontrar expresiones analíticas más sencillas en el caso perturbativo. En las condiciones mencionadas anteriormente, la corriente de calor de la Ec. (2.167) que fluye hacia la punta de prueba se puede escribir como

$$J_P^Q(\mu_P, T_P) = \Gamma_P \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [f_\alpha(\omega) - f_P(\omega_k)] (\omega_k - \mu) \Gamma_\alpha(\omega) |G_{lP,l\alpha}^R(k, \omega)|^2. \quad (3.7)$$

El valor de esta corriente depende de la temperatura de la punta (T_P) y de su potencial químico (μ_P) a través de la función de Fermi f_P que describe a dicho reservorio. Una primera definición de temperatura local podría ser la de fijar el potencial químico de la punta en un valor igual al de los reservorios ($\mu_P = \mu$), de modo que la corriente de calor solo dependa de la temperatura de la punta, y definir la temperatura local T_{lP} del sitio lP al que se encuentra conectado la punta como la solución de la ecuación

$$J_P^Q(\mu, T_{lP}) = 0. \quad (3.8)$$

En el caso genérico estas ecuaciones deben ser resueltas en forma numérica. Sin embargo, bajo ciertas condiciones, es posible encontrar una solución analítica. Dichas condiciones corresponden a baja temperatura T de los reservorios respecto del nivel de Fermi, forzado débil (*weak-driving*), es decir que la amplitud V_0 de los potenciales

externos es pequeña y régimen adiabático, que corresponde a la situación en la cual la frecuencia Ω_0 de los potenciales externos es menor que el tiempo de permanencia de los electrones en el sistema central [31, 32].

La primera aproximación que se realiza es la de forzado débil. Como se mencionó en la Sección 2.2.4, para valores pequeños de V_0 la ecuación de Dyson se resuelve a orden más bajo en esta amplitud siendo las componentes de Floquet-Fourier con $k = -1, 0, 1$ las únicas relevantes [16, 33–35]. Bajo esta condición, la corriente de calor de la Ec. (3.7) se escribe como

$$J_P^Q \propto \sum_{k=-1}^1 \int d\omega \phi_{lP}^Q(k, \omega) [f(\omega) - f_P(\omega_k)], \quad (3.9)$$

donde

$$\phi_l^Q(k, \omega) = (\omega_k - \mu) \varphi_l(k, \omega), \quad (3.10)$$

$$\varphi_l(k, \omega) = \sum_{\alpha=L,R} |G_{l,l\alpha}^R(k, \omega)|^2 \Gamma_\alpha(\omega). \quad (3.11)$$

Si la temperatura T de los reservorios es pequeña comparada con la energía de Fermi, es posible aplicar la expansión de Sommerfeld, quedándonos hasta orden T^2 . Bajo estas condiciones, la corriente de calor puede escribirse como

$$J_P^Q \propto \sum_{k=-1}^1 \left\{ \int_{\mu-k\Omega_0}^{\mu} d\omega \phi_{lP}^Q(k, \omega) + \frac{\pi^2}{6} T^2 F_{lP}^Q(k, \mu) - \frac{\pi^2}{6} (T_{lP})^2 F_{lP}^Q(k, \mu - k\Omega_0) \right\}, \quad (3.12)$$

donde

$$F_l^Q(k, \omega) = \frac{d}{d\omega} \phi_l^Q(k, \omega). \quad (3.13)$$

Como se mencionó con anterioridad, la temperatura local T_{lP} corresponde a la solución de la ecuación $J_P^Q(\mu, T_{lP}) = 0$. Directamente de la expresión de la corriente de calor de la Ec. (3.12) se puede obtener T_{lP} :

$$(T_{lP})^2 = \frac{\frac{6}{\pi^2} \sum_k \Phi_{lP}(k) + T^2 \sum_k F_{lP}^Q(k, \mu)}{\sum_k F_{lP}^Q(k, \mu - k\Omega_0)}, \quad (3.14)$$

donde

$$\Phi_l(k) = \int_{\mu-k\Omega_0}^{\mu} d\omega \phi_l^Q(k, \omega). \quad (3.15)$$

La condición adiabática (baja frecuencia Ω_0 de los potenciales externos) se introduce mediante la expansión de todos los términos de la Ec. (3.14) en potencias de la frecuencia Ω_0 . Es fácil ver que el primer término del numerador es de segundo orden en Ω_0 :

$$\sum_{k=-1}^1 \Phi_{IP}(k) \approx \frac{1}{2} \Omega_0^2 \sum_{k=-1}^1 k \varphi_{IP}(k, \mu), \quad (3.16)$$

mientras que el segundo término del numerador de la Ec. (3.14) es

$$\sum_{k=-1}^1 F_{IP}(k, \mu) = \sum_{k=-1}^1 \left[\varphi_{IP}(k, \mu) + k \Omega_0 \frac{d\varphi_{IP}}{d\omega}(k, \mu) \right]. \quad (3.17)$$

Expandiendo el denominador de la Ec. (3.14) a segundo orden en Ω_0 obtenemos

$$\sum_{k=-1}^1 F_{IP}^Q(k, \mu - k\Omega_0) = \sum_{k=-1}^1 \left[\varphi_{IP}(k, \mu) - k \frac{d\varphi_{IP}}{d\omega}(k, \mu) \Omega_0 + \frac{1}{2} k^2 \frac{d^2\varphi_{IP}}{d\omega^2}(k, \mu) \Omega_0^2 \right]. \quad (3.18)$$

De este modo, quedándonos a segundo orden en Ω_0 en la Ec. (3.14) para la temperatura local se obtiene

$$(T_{IP})^2 = \frac{3}{\pi^2} \lambda_{IP}^{(0)}(\mu) \Omega_0^2 + T^2 \left(1 + 2\lambda_{IP}^{(1)}(\mu) \Omega_0 - \frac{1}{2} \lambda_{IP}^{(2)}(\mu) \Omega_0^2 \right), \quad (3.19)$$

donde

$$\lambda_l^{(n)}(\omega) = \frac{1}{\sum_{k=-1}^1 \varphi_l(k, \omega)} \sum_{k=-1}^1 (k)^{n+2} \frac{d^n[\varphi_l(k, \omega)]}{d\omega^n}, \quad (3.20)$$

y $\varphi_l(k, \omega)$ está dado en la Ec. (3.11). Este es uno de los principales resultados publicados en la Ref. [61].

El primer término de la Ec. (3.19) es independiente de la temperatura T de los reservorios y corresponde al valor de la temperatura local cuando los reservorios se encuentran a temperatura cero. Es decir que, aún en presencia de un entorno a $T = 0$, la temperatura local de cualquier sitio del sistema es finita. Cabe señalar que este término es siempre positivo, para ello basta observar la definición de $\lambda_l^{(0)}(\omega)$. Por lo tanto este término tiende a aumentar la temperatura local T_{IP} con respecto a la temperatura T de los reservorios. Los restantes términos dan contribuciones que

dependen de la temperatura y tanto el tercero como el cuarto pueden llegar a dar contribuciones negativas, que podrían hacer, en principio, que T_{lP} sea menor que T .

Dos casos de interés pueden ser analizados para encontrar expresiones un poco más simplificadas para la temperatura local T_{lP} . Para una dada temperatura T de los reservorios estos casos corresponden al límite de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) y al límite de altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$). En el primer caso, de la expresión de la temperatura local dada en la Ec. (3.19) sobreviven el segundo y tercer término y dicha expresión se reduce a

$$T_{lP} = T[1 + \lambda_{lP}^{(1)}(\mu)\Omega_0]. \quad (3.21)$$

En este momento resulta apropiado definir la diferencia de temperatura local ΔT_{lP} como

$$\Delta T_{lP} = T_{lP} - T, \quad (3.22)$$

donde T es la temperatura de los reservorios. Con esta definición, para el caso de bajas frecuencias ΔT_{lP} resulta:

$$\Delta T_{lP} = T\lambda_{lP}^{(1)}(\mu)\Omega_0. \quad (3.23)$$

mientras que para el límite de altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$), es el primer término de la Ec. (3.19) el que domina y la expresión de $\Delta T_{lP} = T_{lP} - T$ se reduce a

$$\Delta T_{lP} = \sqrt{\frac{3}{\pi^2}\lambda_{lP}^{(0)}(\mu)\Omega_0} - T, \quad (3.24)$$

donde $\lambda_l^{(n)}(\omega)$ están dados en la Ec. (3.20).

3.2.1. Resultados

Para realizar los cálculos numéricos se utilizó un Hamiltoniano de *tight binding* en una cadena lineal:

$$H_0 = -t \sum_{l,l'} (c_l^\dagger c_{l'} + h.c.), \quad (3.25)$$

donde t es el elemento de matriz de salto entre posiciones vecinas l, l' mientras que el término dependiente del tiempo se tomó como

$$H'(t) = \sum_{j=1}^2 eV_j(t)c_{l_j}^\dagger c_{l_j}, \quad (3.26)$$

con $V_j(t) = E_B + V_0 \cos(\Omega_0 t + \delta_j)$, siendo l_j las posiciones en las que son aplicados los dos potenciales alternos con igual frecuencia pero desfasados. Esto define un modelo simple de un bombeador cuántico, en el cual dos potenciales alternos de compuerta son aplicados en las paredes del punto cuántico [26–35].

Uno podría esperar que los campos alternos aplicados den lugar a disipación de energía desde el sistema hacia los reservorios y eso tenga como consecuencia que la temperatura local en la muestra sea mayor a aquella de los reservorios. Sin embargo, en el régimen de forzado débil, se ha mostrado que es posible que la energía sea transportada en forma coherente a lo largo de la muestra de modo que uno de los campos ac disipe potencia contra el otro, con una baja disipación de calor hacia los reservorios [16]. Para ser más precisos, el mecanismo de intercambio de energía entre los campos se comporta como $\propto \Omega_0$, mientras que el ritmo al cual la energía es disipada como calor es $\propto \Omega_0^2$. Por lo tanto, un comportamiento no trivial de la temperatura local podría tener lugar en este régimen. Esto es lo que se muestra en la Figura 3.2 donde los parámetros fueron elegidos en el régimen de forzado débil y baja temperatura. Notablemente, como función de la posición a la cual el termómetro se encuentra conectado, la temperatura local varía a lo largo de la muestra. La línea punteada indica la condición $\Delta T_{lP} = 0$ que corresponde a la situación en la cual la temperatura local es igual a la temperatura T de los reservorios. Se puede observar que en algunos casos la temperatura local es mayor que T ($\Delta T_{lP} > 0$), que es el comportamiento esperado *a priori* como consecuencia del calentamiento debido a la disipación de potencia de los potenciales externos. Sin embargo, otros sitios presentan una temperatura local menor que T , que se manifiesta a través de un $\Delta T_{lP} < 0$, que corresponde a un enfriamiento local de la muestra. Entre los dos potenciales alternos, la temperatura local muestra oscilaciones con período espacial $\sim 2k_F$. Estas oscilaciones se deben a procesos $\propto V_0^2 \Omega_0 \sin(\delta)$ y tienen un origen similar al de las oscilaciones de Friedel detectadas por puntas de voltaje [63, 64]. En ese sistema, las

oscilaciones son consecuencia de procesos de interferencia en el transporte de carga que tiene lugar entre los dos centros de aplicación de los potenciales alternos, que actúan como impurezas dinámicas locales. Por lo tanto, el comportamiento oscilatorio de T_{lP} observado en este sistema es un indicio inequívoco de la coherencia de por lo menos alguna componente en el transporte de energía a lo largo de la muestra. Esta característica es similar a la observada en estructuras pequeñas en una situación estacionaria [20].

Por otra parte, para observar el comportamiento global del sistema resulta apropiado definir la temperatura media del sistema (T_m) como $T_m = (\sum_{lP=1}^N T_{lP})/N$. En la Figura 3.3 se puede observar el comportamiento de la temperatura media T_m como función de la temperatura T de los reservorios para distintos valores de la amplitud V_0 de los potenciales alternos. Como es de esperarse, para una temperatura fija T , la temperatura media T_m se incrementa a medida que aumenta V_0 . Por el contrario, $T_m - T$ es una función decreciente de la temperatura T de los reservorios. Esto refleja el hecho de que, a altas temperaturas de los reservorios, el efecto de los potenciales alternos se ve opacado y la muestra debe principalmente su calentamiento al contacto con un entorno a alta temperatura. Este es otro de los resultados relevantes publicados en la Ref. [61].

3.3. Definición alternativa de temperatura local

En la Sección 3.2 se definió la temperatura local de un sitio lP del sistema central utilizando una punta de prueba (termómetro) con un potencial químico μ_P igual al de los reservorios ($\mu_P = \mu_L = \mu_R$). En una situación más general, en la que los potenciales químicos de los reservorios sean distintos, este tipo de definición no podría ser aplicada. Una definición alternativa sería, por ejemplo tomar el potencial químico promedio entre los reservorios. Sin embargo, resulta más interesante tener en cuenta que el termómetro puede ser elegido no solo como un reservorio de energía sino también de partículas. Por lo tanto uno podría preguntarse cómo se modificaría la situación si permitimos que la temperatura y el potencial químico de la punta de prueba sean ajustados simultáneamente para definir la temperatura y el potencial químico local. Entonces, en una situación genérica, la punta de prueba intercambia carga y energía con el sistema, pudiendo ser no nulas las corrientes de carga y de calor. Se podría

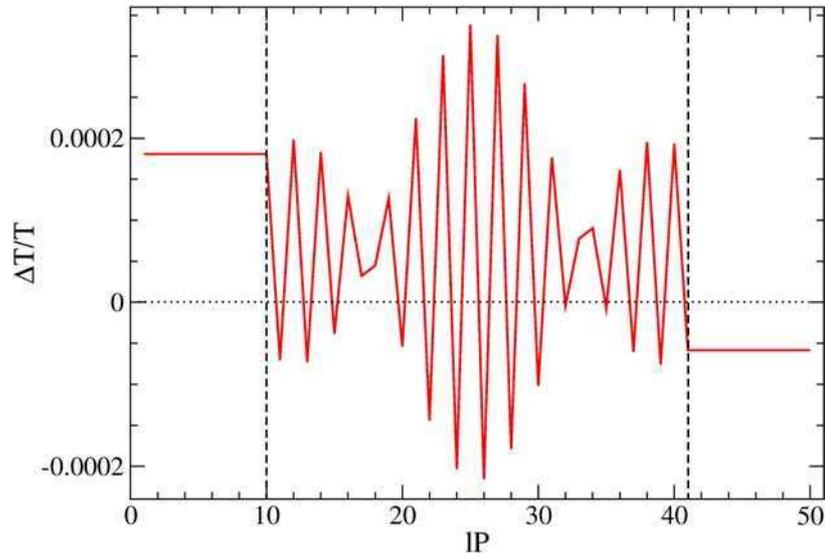


Figura 3.2: Diferencia de temperatura local ΔT_{lP} relativa a la temperatura T de los reservorios como función del sitio lP a lo largo del sistema central. Los potenciales alternos actúan en los sitios indicados con la línea punteada con amplitud $V_0 = 0,05$, frecuencia $\Omega_0 = 0,01$ y un desfase de $\delta = \pi/2$. La temperatura de los reservorios es $T = 0,025$ y su potencial químico es de $\mu = 0,2$.

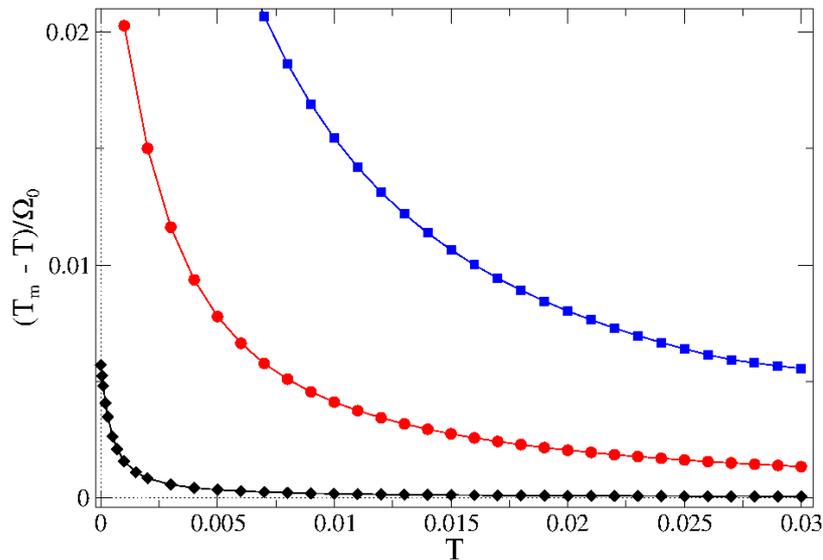


Figura 3.3: Apartamiento de la temperatura media del sistema central respecto de la temperatura T de los reservorios. Los parámetros son $\mu = 0,2$, $\Omega_0 = 0,1$, $\delta = \pi/4$, $V_0 = 0,1$ (cuadrados azules), $V_0 = 0,05$ (círculos rojos), $V_0 = 0,01$ (diamantes negros). Extraída de [61]

pensar que existe una combinación de potencial químico y de temperatura que permite anular en forma simultánea ambas corrientes. En ese caso se podría pensar que el sitio lP al que se encuentra conectada la punta de prueba tiene el mismo “potencial químico” y la misma “temperatura” que la punta. De este modo se motiva una nueva definición de temperatura local T_{lP}^* (donde se utiliza el símbolo $*$ para distinguir de la definición anterior) y de potencial químico local μ_{lP}^* , respectivamente definidos como la temperatura y el potencial químico de la punta de prueba que anulan (en promedio temporal) en forma simultánea las corrientes de carga y de calor entre el sistema y la punta, i.e.

$$\begin{cases} J_P^Q(T_P^*, \mu_P^*) = 0, \\ J_P^e(T_P^*, \mu_P^*) = 0, \end{cases} \quad (3.27)$$

donde la corriente de calor está dada por la Ec. (2.167), mientras que la corriente de carga está dada por la Ec. (2.162). Esta es la definición generalizada que dimos en la Ref. [62].

Para estas corrientes de carga y de calor se pueden hacer las mismas aproximaciones que se hicieron en la Sección 3.2, es decir quedarse con el orden más bajo en teoría de perturbaciones para el acoplamiento t_P entre el sistema y la punta de prueba y considerando que la función espectral $\Gamma_P(\omega)$ es aproximadamente constante (aproximación *wide band*). En estas condiciones, la corriente de calor es la misma que en la Ec. (3.7), mientras que la corriente de carga resulta

$$J_P^e(\mu_P, T_P) = \Gamma_P \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [f_\alpha(\omega) - f_P(\omega_k)] \Gamma_\alpha(\omega) |G_{lP,l\alpha}^R(k, \omega)|^2, \quad (3.28)$$

donde se tomó $e = 1$.

Las ecuaciones simultáneas (3.27), en general deben ser resueltas numéricamente. Sin embargo, se pueden encontrar soluciones explícitas en dos límites de interés que son los mismos que se mencionaron en la Sección 3.2: bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) y altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$). Al igual que en la Sección 3.2 se conservan los términos hasta orden $(V_0)^2$ por tratarse del régimen de forzado débil. En estas condiciones, las corrientes de calor y de energía se pueden escribir de la siguiente manera:

$$J_P^X \propto \sum_{k=-1}^1 \int d\omega \phi_{lP}^X(k, \omega) [f(\omega) - f_P(\omega_k)], \quad (3.29)$$

where $X = Q, e$ and

$$\phi_l^Q(k, \omega) = (w_k - \mu_P)\varphi_l(k, \omega), \quad (3.30)$$

$$\phi_l^e(k, \omega) = \varphi_l(k, \omega), \quad (3.31)$$

donde $\varphi_l(k, \omega)$ está dado en la Ec. (3.11). Basta notar la similitud de la Ec. (3.29) con la Ec. (3.9) para pensar que puede realizarse un procedimiento similar para encontrar T_{lP}^* y μ_{lP}^* . El detalle de este procedimiento se muestra en el Apéndice A. Aquí solo se presentan los resultados para los dos límites de interés. En el límite de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) el sistema de ecuaciones tiene como solución

$$\begin{cases} \Delta\mu_{lP}^* &= \left(\frac{\sum_k k\varphi_{lP}(k, \mu)}{\sum_k \varphi_{lP}(k, \mu)} + O(T)^2 \right) \Omega_0, \\ \Delta T_{lP}^* &= T \left[\frac{d}{d\omega} \left(\frac{\sum_k k\varphi_{lP}(k, \omega)}{\sum_k \varphi_{lP}(k, \omega)} \right)_{\omega=\mu} + O(T)^2 \right] \Omega_0. \end{cases} \quad (3.32)$$

Si consideramos que $\frac{d}{d\omega}\Gamma_\alpha(\omega)|_{\omega=\mu} \sim 0$, que se cumple en la aproximación de *wide band* (válida en general para electrodos metálicos con una banda sin singularidades), entonces T_{lP}^* se convierte en

$$T_{lP}^* = T \left[1 + \lambda_{lP}^{(1)}(\mu)\Omega_0 \right], \quad (3.33)$$

que coincide con el resultado obtenido a partir de la definición anterior de temperatura local, como se muestra en la Ec. (3.21).

En el límite de altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$), la solución del sistema de ecuaciones es

$$\begin{cases} \Delta\mu_{lP}^* &= \frac{\sum_k k\varphi_{lP}(k, \mu)}{\sum_k \varphi_{lP}(k, \mu)} \Omega_0, \\ \Delta T_{lP}^* &= \sqrt{\frac{3}{\pi^2} \lambda_{lP}^{(0)}(\mu)} \Omega_0 - T. \end{cases} \quad (3.34)$$

El valor de ΔT_{lP}^* coincide con el que se obtiene mediante la definición de temperatura local dada en la Sección 3.2, cuyo valor se muestra en la Ec. (3.24). El valor de $\Delta\mu_{lP}^*$ coincide con el obtenido mediante una punta de voltaje para un sistema con reservorios a $T = 0$ [65]. Los resultados que se encuentran en las Ecs. (3.33) y (3.34) son de los principales resultados publicados en la Ref. [62], y muestran que en dichos

límites temperatura local correspondiente a la definición generalizada de esta Sección coincide con la correspondiente a la definición de la Sección 3.2.

Además de los resultados analíticos presentados, se estudió en forma numérica la temperatura local T_{IP}^* en un amplio rango de parámetros y a continuación se muestran dos figuras representativas de lo que se observó. En primer lugar, en la Figura 3.4 se muestra el comportamiento de la diferencia de temperatura local ΔT_{IP}^* a lo largo del sistema central y su comparación con la diferencia de temperatura local ΔT_{IP} definida en la Sección 3.2. Como se puede apreciar, la temperatura local T_{IP}^* muestra las mismas oscilaciones con frecuencia espacial $2k_F$ que se observan en el caso de la temperatura local T_{IP} (ver Figura 3.2). Dichas oscilaciones, como se mencionó en la Sección 3.2.1, tienen el mismo origen que las oscilaciones en el potencial químico local detectadas mediante una punta de voltaje [63, 64] y se deben a la interferencia generada por procesos de dispersión elástica que tienen lugar entre los potenciales alternos. El acuerdo entre las dos temperaturas locales T_{IP}^* y T_{IP} es perfecto a lo largo de toda la muestra.

Por otra parte, en la Figura 3.5 se muestra el comportamiento de diferencia de temperatura local ΔT_{IP}^* como función de la frecuencia Ω_0 y su comparación con la diferencia de temperatura local ΔT_{IP} definida en la Sección 3.2 para una temperatura $T = 0,025$ de los reservorios. Como se puede observar, el acuerdo entre las dos temperaturas locales es perfecto a lo largo de todo el rango de frecuencias y no solo en los límites de bajas ($\Omega_0 \ll T$) y altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$). En todo el espectro de parámetros estudiados se observó que la diferencia entre ambas temperaturas locales se encuentra dentro del error numérico en todo el rango de frecuencias.

3.4. La temperatura local y el flujo de calor

El objetivo de esta sección es el de explorar qué relación existe entre el flujo de calor entre el sistema central y los reservorios L y R y la temperatura local. En particular, nos gustaría explorar la posibilidad de determinar si el flujo de calor hacia el reservorio α , a través del contacto correspondiente, está dado por una relación del tipo ley de Fourier

$$J_\alpha^Q = K_\alpha \Delta T_\alpha, \quad (3.35)$$

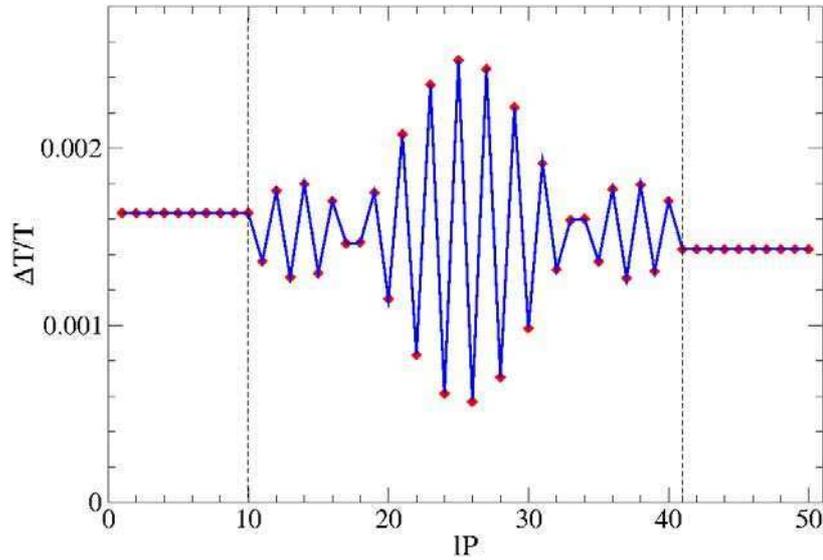


Figura 3.4: Diferencias de temperatura local ΔT_{lP}^* (línea continua azul) y ΔT_{lP} (diamantes rojos) relativas a la temperatura T de los reservorios como función del sitio lP a lo largo del sistema central de $N = 50$ sitios. Los potenciales alternos actúan en los sitios indicados con las líneas punteadas con amplitud $V_0 = 0,05$, frecuencia $\Omega_0 = 0,05$ y un desfase de $\delta = \pi/2$. La temperatura de los reservorios es $T = 0,025$ y su potencial químico es de $\mu = 0,2$.

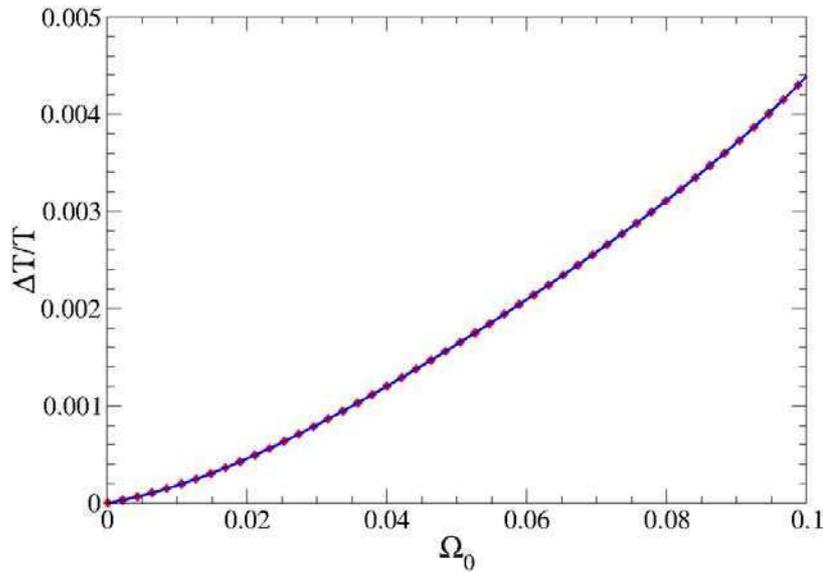


Figura 3.5: Diferencias de temperatura local ΔT_{lP}^* (línea continua azul) y ΔT_{lP} (diamantes rojos) relativas a la temperatura T de los reservorios para el sitio $lP = lL$ (el sitio conectado al reservorio L) como función de la frecuencia Ω_0 . Los parámetros son los mismos que en la Figura 3.4.

como sucede en sistemas en los cuales el flujo de calor es inducido por un gradiente de temperatura explícito. Esta definición original fue introducida en la Ref. [62]. En nuestro caso, el gradiente de temperatura está definido a través de $\Delta T_\alpha = T_{l\alpha} - T_\alpha$, donde $T_{l\alpha}$ es la temperatura local del sitio del sistema central que se halla conectado al reservorio α , mientras que K_α es una conductancia térmica efectiva de contacto *positiva*. Entonces, evaluando la componente dc de las corrientes de calor entre el sistema y cada uno de los reservorios, así como las temperaturas locales de los contactos correspondiente se pueden calcular las mencionadas conductancias efectivas. En esta Sección se mostrarán únicamente resultados numéricos, que constituyen una parte importante de los resultados publicados en la Ref. [62]. Se reserva para la Sección 3.5 la derivación de resultados analíticos en los dos límites de interés mencionados en las Secciones 3.2 y 3.3, también publicados en la misma referencia.

Los resultados para el flujo de calor y los gradientes de temperatura local ΔT_α como funciones de la frecuencia Ω_0 se muestran en la Figura 3.6, para reservorios con la misma temperatura T y el mismo potencial químico μ . Debido a que la corriente de calor dc es $\propto V_0^2$ para valores pequeños de V_0 , como es en este caso, encontramos conveniente mostrar J^Q/V_0^2 en la figura. La convención tomada sobre el signo del flujo de calor es que el mismo se define positivo (negativo) cuando el calor fluye hacia (desde) el reservorio.

El comportamiento del flujo de calor en el reservorio L corresponde a una situación en la cual el calor fluye hacia el reservorio (corriente positiva). Al mismo tiempo, el gradiente de temperatura ΔT_α también es positivo. Esto quiere decir que la temperatura local del sitio del sistema central en contacto con el reservorio es mayor que la temperatura T del reservorio (situación que se observa por ejemplo en la Figura 3.4). Este comportamiento es el que se espera intuitivamente, asociado con la idea de que el calor fluye de la región más caliente (el sistema, pues $\Delta T_\alpha > 0$) a una región más fría (el reservorio).

No obstante, en un régimen de bombeo, se espera encontrar situaciones en las que el calor puede ser extraído de un reservorio hacia el sistema central e inyectado en el otro reservorio. Esta es en efecto la situación para el contacto con el reservorio R en el cual, para bajas frecuencias, la corriente de calor es negativa y por lo tanto el calor fluye del reservorio al sistema. En la misma figura se muestra el gradiente de temperatura del contacto correspondiente, que exhibe un comportamiento perfectamente compatible

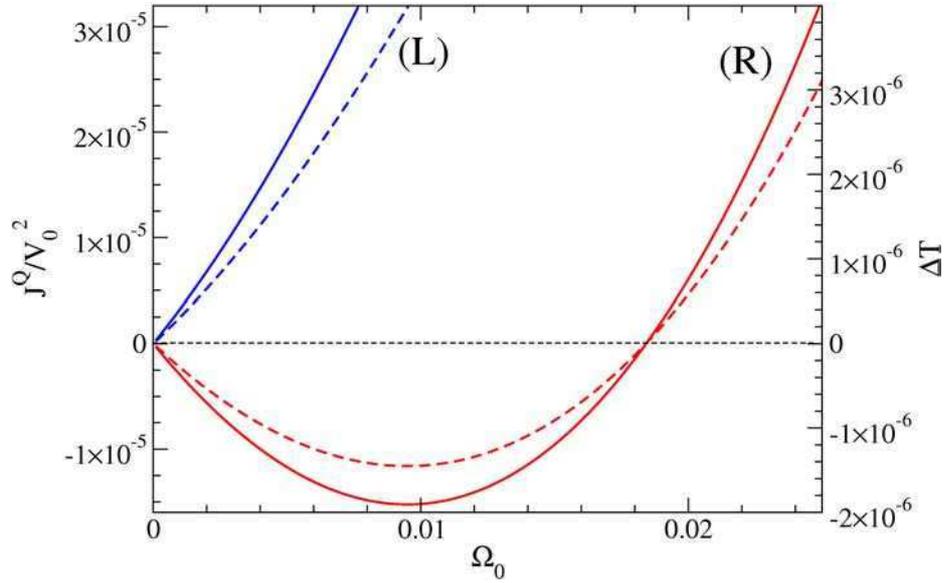


Figura 3.6: Componente dc de la corriente de calor dividida por V_0^2 (línea continua) y diferencia de temperatura local ΔT_{lP}^* (línea discontinua) entre el sistema y el reservorio L (azul) o el reservorio R (rojo) como función de la frecuencia Ω_0 . La diferencia de fase es $\delta = 1,88$ y la amplitud es $V_0 = 0,05$. La temperatura y el potencial químico de los reservorios son respectivamente $T = 0,025$ and $\mu = 0,2$. Extraída de Ref. [62].

con el flujo de calor, es decir que, mientras la corriente de calor es negativa, el gradiente ΔT_α también lo es, y por lo tanto la temperatura local del sitio en contacto con el reservorio R (T_{lR}) es menor que la temperatura T_R de dicho reservorio. Es decir que nuevamente el calor fluye de la región más caliente (reservorio) a la más fría (el sistema).

Para frecuencias mayores, el calor fluye hacia los dos reservorios (ambas corrientes de calor son positivas). En esta situación, los correspondientes gradientes de temperatura también son positivos. Es decir que, nuevamente, el calor fluye de la región más caliente (cada uno de los contactos) hacia la más fría (el reservorio respectivo). Esta es la situación más común, en la cual el sistema central es calentado debido a los potenciales alternos aplicados y el calor generado es disipado hacia los reservorios.

A partir de estas observaciones podemos destacar que el comportamiento del gradiente de temperatura en los contactos permite establecer en forma inequívoca la dirección del flujo de calor hacia los reservorios. En particular hay que notar que, en

la Figura 3.6, J_R^Q y ΔT_R cambian de signo exactamente a la misma frecuencia.

La existencia de un régimen de bombeo requiere un delicado equilibrio entre la frecuencia Ω_0 , la temperatura T de los reservorios y la diferencia de fase δ . Sin embargo, en todos los casos, se encontró que el comportamiento de ΔT_α coincide con el esperado por consideraciones del flujo de calor.

En el panel superior de la Figura 3.7 se muestra el flujo de calor como función de la temperatura T de los reservorios. Como se puede apreciar, para un cierto rango de temperaturas, hay un régimen de bombeo como el antes mencionado, en el cual el calor es extraído del reservorio R (corriente de calor negativa) e inyectado en el reservorio L (corriente de calor positiva). En ese rango de temperaturas, el gradiente de temperatura en el reservorio R es negativo, mientras que en el reservorio L es positivo. Nuevamente el comportamiento es perfectamente compatible con las consideraciones del flujo de calor. Fuera de ese rango, el comportamiento es el esperado en forma intuitiva, en el que el calor fluye hacia los reservorios y ambos gradientes de temperatura son positivos. Nuevamente la corriente de calor y el gradiente de temperatura tienen siempre el mismo signo y, en el caso del reservorio R , cambian de signo exactamente a las mismas temperaturas.

Para ilustrar el comportamiento del sistema en función del desfasaje δ , en el panel inferior de la Figura 3.7 se muestran los flujos de calor y los gradientes de temperatura como función de este parámetro. Como se espera por las simetrías del dispositivo, un cambio de fase $\delta \rightarrow 2\pi - \delta$ conlleva el cambio $L \rightarrow R$. Las corrientes de calor pasan de positivas a negativas a medida que cambia la fase δ y los correspondientes gradientes de temperatura cambian de signo exactamente en los mismos lugares.

En todos los casos, el comportamiento del flujo de calor está en completo acuerdo con la Ec. (3.35) y cabe señalar que no se observa una fuerte dependencia de K_α en Ω_0 ni en δ , pero sí en la temperatura y esto será objeto de estudio en la siguiente Sección.

3.5. Conductancias eléctrica y térmica y la ley de Wiedemann-Franz generalizada

Una propiedad interesante, además de la mencionada en el apartado anterior en relación a la dirección del flujo de calor, que apunta a la identificación de la tempera-

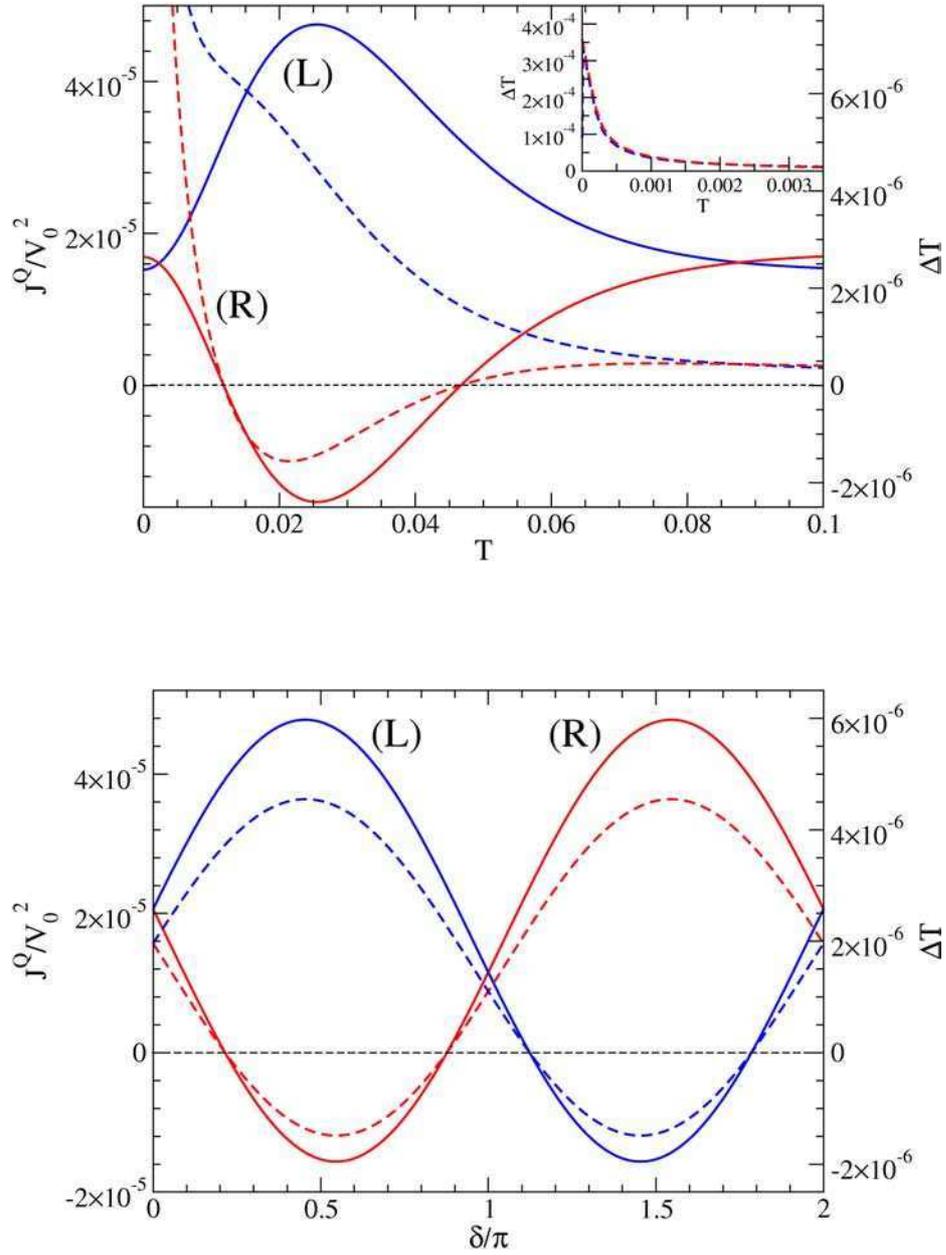


Figura 3.7: Panel superior: Componente dc de la corriente de calor dividida por V_0^2 (línea continua) y diferencia de temperatura local ΔT_{IP}^* (línea discontinua) entre el sistema y el reservorio L (azul) o el reservorio R (rojo) como función de la temperatura T de los reservorios. La diferencia de fase es $\delta = \pi/2$, la frecuencia $\Omega_0 = 0,01$ y la amplitud es $V_0 = 0,05$. El potencial químico de los reservorios es $\mu = 0,2$. Panel inferior: ídem anterior pero como función del desfase δ . Los parámetros son los mismos que en el panel superior. La temperatura de los reservorios es $T = 0,025$. Extraída de [62].

tura local T_{lP} como una temperatura *bona fide*, es la de estudiar la validez de la ley de Wiedemann-Franz en este sistema.

En 1853 Gustav Wiedemann y Rudolph Franz mostraron, mediante experimentos en distintos metales, que el cociente entre la conductividad térmica (κ) y la conductividad eléctrica (σ) a una dada temperatura era aproximadamente el mismo para distintos metales. Unos años más tarde, en 1872, Ludvig Lorentz descubrió que dicho cociente resultaba ser proporcional a la temperatura. A esta constante de proporcionalidad se la denomina constante de Lorentz. Para un sistema de electrones no interactuantes (ver [66, 67]) la constante de Lorentz resulta ser

$$\frac{\kappa_\alpha}{\sigma_\alpha T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \approx 2,44 \times 10^{-8} W\Omega K^{-2}, \quad (3.36)$$

en excelente acuerdo con los valores experimentales (ver por ejemplo [66]).

Además de la conductancia térmica K_α (definida en la Ec. (3.35)) correspondiente al contacto entre el sistema y el reservorio α , se puede definir de manera análoga una conductancia eléctrica efectiva de contacto G_α de la siguiente manera:

$$G_\alpha = \frac{J_\alpha^e}{\Delta\mu_\alpha}, \quad (3.37)$$

donde

$$\Delta\mu_\alpha = \mu_\alpha - \mu_{l\alpha}, \quad (3.38)$$

siendo μ_α el potencial químico del reservorio α y $\mu_{l\alpha}$ el potencial químico local (definido mediante la Ec. (3.27)) del sitio del sistema central conectado al reservorio α .

Como se consideró hasta ahora, $T_\alpha = T$ y $\mu_\alpha = \mu$ para $\alpha = L, R$.

Para calcular K_α se necesita la corriente de calor J_α^Q que fluye al reservorio α y la diferencia de temperatura ΔT_α . Para un termómetro no invasivo, la corriente de calor J_α^Q está dada por

$$J_\alpha^Q = \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} (f(\omega) - f(\omega_k)) (\omega_k - \mu) \tilde{\varphi}_\alpha(k, \omega), \quad (3.39)$$

donde

$$\tilde{\varphi}_\alpha(k, \omega) = \sum_{\beta=L,R} \Gamma_\alpha(\omega_k) |G_{l\alpha,l\beta}^R(k, \omega)|^2 \Gamma_\beta(\omega). \quad (3.40)$$

Si la temperatura de los reservorios es pequeña comparada con la energía de Fermi se puede aplicar la expansión de Sommerfeld, quedándonos con los términos hasta orden T^2 . Se supone que la frecuencia de bombeo es pequeña (aproximación adiabática) y por ello se realiza una expansión de la Ec. (3.39) en potencias de Ω_0 . Bajo estas condiciones, la corriente de calor se puede escribir como

$$J_\alpha^Q = \frac{1}{4\pi} \sum_k \left\{ k^2 \Omega_0^2 \tilde{\varphi}_\alpha(k, \mu) + T^2 \frac{\pi^2}{3} \left[2 \frac{d\tilde{\varphi}_\alpha}{d\omega}(k, \mu) - \frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\varphi}_\alpha}{d\omega^2}(k, \mu) k \Omega_0 \right] k \Omega_0 \right\}. \quad (3.41)$$

El primer término es independiente de la temperatura y es el valor de la corriente de calor a temperatura $T = 0$. Este término es proporcional a Ω_0^2 y se relaciona con la potencia disipada por los potenciales alternos que es no nula aún en presencia de un entorno a temperatura $T = 0$.

Dos límites permiten encontrar expresiones analíticas sencillas y son los mismos mencionados en las Secciones 3.2 y 3.3: el límite de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) y el de altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$). En el límite de bajas frecuencias las expresiones para J_α^Q y ΔT_α son las siguientes:

$$J_\alpha^Q = T^2 \frac{\pi}{6} \sum_k k \frac{d\tilde{\varphi}_\alpha}{d\omega}(k, \mu) \Omega_0, \quad (3.42)$$

$$\Delta T_\alpha = T \lambda_{i_\alpha}^{(1)}(\mu) \Omega_0. \quad (3.43)$$

a orden más bajo en Ω_0 y T .

Mediante las definiciones de $\tilde{\varphi}_\alpha$ y $\lambda_l^{(1)}$ dadas respectivamente en las Ecs. (3.40) y (3.20) es fácil ver que la conductancia térmica en el límite de bajas frecuencias es

$$K_\alpha = \frac{\pi}{6} \tilde{\varphi}_\alpha(\mu) T, \quad (3.44)$$

donde

$$\tilde{\varphi}_\alpha(\mu) = \sum_k \tilde{\varphi}_\alpha(k, \mu). \quad (3.45)$$

Por otra parte, en el límite de alta frecuencia ($\Omega_0 \gg T$), de las Ecs. (3.41) y (3.34),

se extrae que

$$J_\alpha^Q = \frac{1}{4\pi} \sum_k k^2 \Omega_0^2 \tilde{\varphi}_\alpha(k, \mu), \quad (3.46)$$

$$\Delta T_\alpha = \sqrt{\frac{3}{\pi^2} \lambda_{l_\alpha}^{(0)}(\mu) \Omega_0} - T. \quad (3.47)$$

Por lo tanto, la conductancia térmica K_α es

$$K_\alpha = \frac{1}{4\sqrt{3}} \frac{\sum_k k^2 \tilde{\varphi}_\alpha(k, \mu)}{\sqrt{\lambda_{l_\alpha}^{(0)}(\mu)}} \Omega_0 + \frac{\pi}{12} \tilde{\varphi}_\alpha(\mu) T. \quad (3.48)$$

Es importante remarcar que la conductancia térmica es finita aún a temperatura $T = 0$ de los reservorios. Esto se debe a que tanto la corriente de calor J_α^Q como ΔT_α (ver Ec. (3.46)) son finitos en dicha situación. Dicho en otras palabras, aún en contacto con un entorno a $T = 0$ el sistema se encuentra a temperatura finita. Los potenciales alternos disipan potencia hacia los reservorios, lo que se manifiesta a través de corrientes de calor que fluyen hacia los mismos. Dichas corrientes son consistentes con temperaturas locales finitas en los contactos con los reservorios.

Por otro lado, la conductancia eléctrica puede ser calculada de manera análoga. La corriente de carga en presencia de una punta no invasiva puede ser escrita como

$$J_\alpha^e = \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} (f(\omega) - f(\omega_k)) \tilde{\varphi}_\alpha(k, \omega), \quad (3.49)$$

donde $\tilde{\varphi}_\alpha(k, \omega)$ está dado en la Ec. (3.40).

Realizando un procedimiento análogo al que se puso en práctica en el caso de la corriente de calor, es decir aplicando la expansión de Sommerfeld, escribiendo los términos en potencias de Ω_0 y quedándose con el orden más bajo, la corriente de carga se puede escribir como

$$J_\alpha^e = \frac{1}{2\pi} \sum_k k \tilde{\varphi}_\alpha(k, \mu) \Omega_0. \quad (3.50)$$

a orden más bajo en Ω_0 y T .

La expresión para $\Delta\mu_\alpha$ se encuentra en las Ecs. (3.33) para el régimen de bajas

frecuencias y (3.34) para el régimen de altas frecuencias,

$$\Delta\mu_\alpha = \frac{\sum_k k\varphi_{l\alpha}(k, \mu)}{\sum_k \varphi_{l\alpha}(k, \mu)}\Omega_0. \quad (3.51)$$

y es la misma a orden más bajo en Ω_0 y T para los dos regímenes mencionados.

Por lo tanto, la conductancia eléctrica G_α es

$$G_\alpha = \frac{1}{2\pi}\tilde{\varphi}_\alpha(\mu). \quad (3.52)$$

Este resultado es válido para todo el rango de temperaturas debido a que la corriente de carga a orden más bajo en Ω_0 no depende de T y tampoco lo hace $\Delta\mu_\alpha$.

Para analizar la validez de la ley de Wiedemann-Franz en este sistema es necesario calcular el cociente entre K_α y G_α . En el límite de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) el cociente entre la conductancia térmica (Ec. (3.44)) y la eléctrica (Ec. (3.52)) satisface la ley de Wiedemann-Franz (Ec. (3.36))

$$\frac{K_\alpha}{G_\alpha} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T. \quad (3.53)$$

donde las unidades fueron restituidas para dar mayor claridad al resultado.

En la Figura 3.8 se observa el cociente K_α y G_α en función de la temperatura T de los reservorios para un amplio rango de dicha temperatura. El cociente es bien descrito por la ley de Wiedemann-Franz para $T \gg \Omega_0$ pero se evidencia un apartamiento para $T \sim \Omega_0$. Para explicar este apartamiento es necesario calcular el cociente entre la conductancia térmica (Ec. (3.48)) y la eléctrica (Ec. (3.52)) en el régimen de altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$). Dicho cociente a orden más bajo en Ω_0 y T es

$$\frac{K_\alpha}{G_\alpha} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}\sqrt{\tilde{\lambda}_\alpha^{(0)}(\mu)}\Omega_0 + \frac{\pi^2}{6}T, \quad (3.54)$$

donde

$$\tilde{\lambda}_\alpha^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\sum_k \tilde{\varphi}_\alpha(k, \omega)} \sum_k k^2 \tilde{\varphi}_\alpha(k, \omega). \quad (3.55)$$

Usando en valor ΔT_α para $T = 0$ dado en la Ec. (3.24) se puede reescribir la Ec.

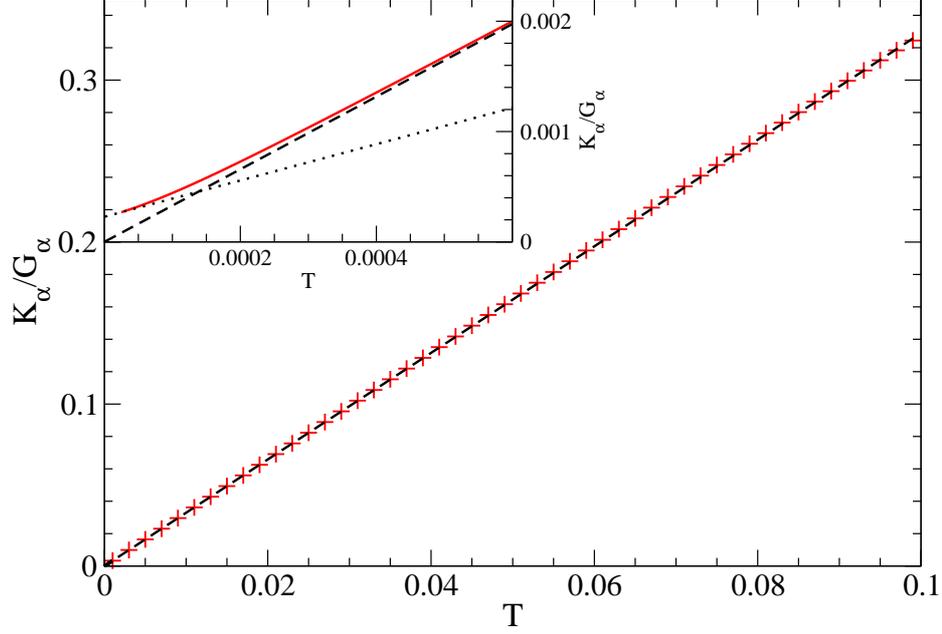


Figura 3.8: Cociente K_α y G_α (cruces rojas) para el contacto entre el sistema y el reservorio derecho (R) como función de la temperatura. La línea discontinua negra representa la ley de Wiedemann-Franz. *Recuadro*: La línea punteada negra representa la predicción (3.54) para el comportamiento a bajas temperaturas del cociente K_α y G_α (línea roja). La diferencia de fase δ es $\pi/2$, la frecuencia de bombeo es $\Omega_0 = 0,005$ y la amplitud es $V_0 = 0,05$. El potencial químico de los reservorios es $\mu = 0,2$. Extraída de [62].

(3.54), con las unidades restituidas, como

$$\frac{K_\alpha}{G_\alpha} = \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 [\Delta T_\alpha|_{T=0} + T]. \quad (3.56)$$

De esta ecuación se puede ver que, a medida que la temperatura T de los reservorios se aproxima a cero, el cociente K_α/G_α se aproxima linealmente a un valor finito. La pendiente de recta es la mitad que aquella de la ley de Wiedemann-Franz (3.36) y su ordenada al origen es proporcional a $\Delta T_\alpha|_{T=0}$ que es la temperatura local del sitio conectado al reservorio α cuando la temperatura de los reservorios es cero. Dicho término corresponde a la Ec. (3.47) con $T = 0$ y claramente se trata de un término de no-equilibrio dado que resulta ser proporcional a la frecuencia Ω_0 de los potenciales externos. La Ec. (3.56) permite explicar el comportamiento observado en la Figura 3.8

a bajas temperaturas. Se trata entonces de una generalización de la ley de Wiedemann-Franz. Para bajas frecuencias es válida en la forma (3.54) mientras que para altas frecuencias la ley adopta la forma (3.56). Este fue otro de los principales resultados publicados en la Ref. [62].

3.6. Conclusiones

Se definió una temperatura local (T_{lP}) para cada sitio de un sistema llevado fuera del equilibrio por el accionar de potenciales alternos. Esta definición se realizó mediante la introducción de un termómetro (reservorio débilmente acoplado al sistema) cuya temperatura T_P se determina por la condición de que el promedio temporal de la corriente de calor entre el sistema y el termómetro es cero. Se observó que el comportamiento general de la temperatura local T_{lP} indica un calentamiento global de la muestra, manifestado en la forma de una temperatura media (T_m) mayor que la de los reservorios. Una característica destacable es la presencia de oscilaciones con período espacial $2k_F$ en la temperatura local, similares a las oscilaciones de Friedel detectadas con puntas de voltaje. Esto es una indicación de interferencia cuántica, es decir que hay propagación coherente de energía a lo largo del sistema. Otra característica para destacar es que, bajo determinadas circunstancias, la temperatura local de algunos sitios del sistema central puede ser menor que la temperatura del entorno (reservorios) lográndose, de este modo, un enfriamiento local de la muestra. Se encontró una expresión analítica para T_{lP} en la condición de forzado débil y en el régimen adiabático. Se encontraron expresiones más sencillas en dos límites de interés: el de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) y el de altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$).

Por otra parte se generalizó la definición de termómetro, teniendo en cuenta el hecho de que la corriente de calor está relacionada con la corriente de carga. Por lo tanto se permitió que el termómetro funcione también como punta de voltaje y de este modo permita determinar, en forma simultánea, la temperatura local T_{lP}^* y el potencial químico local μ_{lP}^* , a partir de la condición que los valores medios de las corrientes de calor y de carga se anulen en forma simultánea. Se comparó esta nueva temperatura local con la anterior y se mostró analíticamente que coinciden en dos límites de interés y numéricamente para otras situaciones.

Se mostró la relación entre la temperatura local en los contactos y la dirección de la corriente de calor entre el sistema y los reservorios, mostrando que, en todos los casos, la corriente de calor fluye de la región más caliente a la más fría, mostrando que resulta adecuado definir la temperatura local de este modo.

Para reforzar más aún esta idea, se estudió la validez de la ley de Wiedemann-Franz en el sistema y para ello se procedió a calcular las conductancias efectivas de contacto (tanto térmicas como eléctricas). Se mostró que su cociente satisface la ley de Wiedemann-Franz para bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) mientras que se observa una desviación con respecto a dicha ley para altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$). Se encontraron expresiones analíticas para explicar ambos comportamientos.

Capítulo 4

Relaciones de fluctuación- disipación y temperatura efectiva

El teorema de fluctuación-disipación (TFD) establece una relación general entre la respuesta de un sistema a una perturbación externa y la fluctuación interna de ese mismo sistema en ausencia de dicha perturbación (en equilibrio térmico). Las fluctuaciones están caracterizadas por una función de correlación de una cantidad física relevante para el problema. Uno de los ejemplos más célebres es la conocida fórmula de Kubo [68] que relaciona la conductancia eléctrica (función respuesta del sistema) con el ruido (correlación corriente-corriente) en equilibrio. Es una de las piedras angulares de la teoría de transporte lineal formulada por R. Kubo en 1957 [68]. La importancia de dicho teorema es que puede ser utilizado de dos maneras: por un lado permite predecir las características de las fluctuaciones de un sistema a partir de una conductancia conocida y por otro puede ser utilizado como fórmula para derivar la conductancia a partir del análisis de las fluctuaciones de equilibrio del sistema. Fue introducido por A. Einstein en 1905 [69], luego estudiado por J. B. Johnson [70] y H. Nyquist [71] en 1928 y finalmente formulado desde la mecánica estadística por R. Kubo en 1957 [68]. Para un reseña sobre teorema de fluctuación-disipación puede consultarse la Ref. [72].

4.1. Motivación

A lo largo de los años, se han llevado a cabo numerosos esfuerzos con el fin de extender los conceptos de la termodinámica a la evolución, fuera del equilibrio, de distintos sistemas. Un concepto muy útil en la caracterización de estados fuera del equilibrio ha sido la definición de “temperaturas efectivas”, es decir un parámetro con las mismas propiedades de la temperatura de un sistema en equilibrio que puede ser utilizado para describir la evolución de un sistema fuera del equilibrio. En sistemas vidriosos (por ejemplo los vidrios de espín), la definición de temperatura efectiva fue introducida por medio de la generalización de las relaciones de fluctuación-disipación de equilibrio [1, 2]. El sentido físico de esta temperatura está basado, entre otras cosas, en que coincidiría con la temperatura indicada por un “termómetro” conectado al sistema [3, 4]. El concepto de temperatura efectiva puede ser extendido a sistemas cuánticos fuera del equilibrio tal como fue discutido inicialmente en el contexto de sistemas vidriosos en [12, 13]. Posteriormente, la existencia de temperaturas efectivas fue explorada en el contexto de sistemas electrónicos [14].

En los últimos años, el estudio del transporte de calor en dispositivos electrónicos ha capturado una creciente atención [16, 18, 20, 73, 74] no solo debido a su importancia desde el punto de vista de posibles aplicaciones tecnológicas sino también por su relevancia como marco para poner a prueba conceptos fundamentales de la termodinámica y la mecánica estadística en sistemas fuera del equilibrio. En particular, consideramos que este tipo de sistemas ofrece un contexto ideal para explorar un tema fundamental como puede ser la definición de temperatura efectiva para un sistema cuántico fuera del equilibrio.

4.2. Temperatura efectiva a partir de funciones de Green de una partícula

Para sistemas en equilibrio, el teorema de fluctuación-disipación (TFD) establece una relación entre la función de Green de *Keldysh* (correlación) y la función de Green *retardada*. En efecto, para un sistema como el estudiado en este trabajo, pero sin los potenciales dependientes del tiempo, se puede mostrar que la relación entre las

fluctuaciones locales del sistema ($iG_{l,l}^K(\omega)$) y el término de disipación del reservorio ($\Gamma_\alpha(\omega)$) es [12–14]

$$iG_{l,l}^{0,K}(\omega) = \tanh \left[\frac{\beta(\omega - \mu)}{2} \right] \varphi_l^0(\omega), \quad (4.1)$$

donde se define

$$\varphi_l^0(\omega) = -2 \operatorname{Im}[G_{l,l}^{0,R}(\omega)]. \quad (4.2)$$

El lado derecho de la Ec. (4.2) se puede obtener fácilmente si se considera que, para el caso de no tener campos dependientes del tiempo, solo sobreviven los términos de $k = 0$ en la Ec. (2.150),

$$\varphi_l^0(\omega) = \sum_{\alpha=L,R} |G_{l,l\alpha}^{0,R}(\omega)|^2 \Gamma_\alpha(\omega), \quad (4.3)$$

donde el superíndice 0 indica que se está considerando el sistema en equilibrio, es decir que $H'(t) = 0$ y que todos los reservorios se encuentran a la misma temperatura $T = 1/\beta$ y potencial químico μ .

En presencia de potenciales dependientes del tiempo, usando la definición de función de Green de Keldysh (2.30) y el resultado de la Ec. (2.152), se puede mostrar que

$$iG_{l,l}^K(0, \omega) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \tanh \left[\frac{\beta(\omega - k - \mu)}{2} \right] \varphi_l(k, \omega - k), \quad (4.4)$$

donde se definió

$$\varphi_l(k, \omega) = \sum_{\alpha=L,R} |G_{l,l\alpha}^R(k, \omega)|^2 \Gamma_\alpha(\omega), \quad (4.5)$$

y se usó que $\Gamma_\gamma^>(\omega) + \Gamma_\gamma^<(\omega) = i(2f(\omega) - 1)\Gamma_\gamma(\omega) = -i \tanh[\beta(\omega - \mu)/2]\Gamma_\gamma(\omega)$.

Como mostraremos más adelante, en el régimen de forzado débil (cuando V_0 es pequeño), y en la aproximación adiabática, es decir cuando la frecuencia de los potenciales alternos (Ω_0) es menor que el tiempo de permanencia de los electrones en el sistema central [31, 32], es posible definir una temperatura efectiva $T_l^{eff} = 1/\beta_l^{eff}$ a través de la siguiente relación de fluctuación-disipación (RFD) generalizada para la situación fuera del equilibrio,

$$iG_{l,l}^K(0, \omega) - iG_{l,l}^K(0, \mu) = \tanh \left[\frac{\beta_l^{eff}(\omega - \mu)}{2} \right] \overline{\varphi}_l(\omega), \quad (4.6)$$

donde en esta oportunidad se definió

$$\overline{\varphi}_l(\omega) = -2 \operatorname{Im}[G_{l,l}^R(0, \omega)] = \sum_k \varphi_l(k, \omega_{-k}). \quad (4.7)$$

en analogía a la definición de la Ec. (4.5) para el caso sin dependencia temporal.

En general, la Ec. (4.6) define una temperatura efectiva que podría depender de ω por lo tanto, en la definición, se toma el límite $\omega \rightarrow \mu$. Este procedimiento está sustentado en el hecho de que para el régimen de forzado débil, las energías electrónicas ω relevantes son aquellas tales que $|\omega - \mu| \lesssim \max(T, \Omega_0)$. Por otra parte, un término extra es añadido en el lado izquierdo de la Ec. (4.6) respecto de la Ec. (4.1) debido a que el lado derecho es siempre cero para $\omega = \mu$ pero $G_{l,l}^K(0, \mu)$ no necesariamente lo es en una situación arbitraria fuera del equilibrio. Cabe notar que este término extra siempre es cero en equilibrio.

La temperatura efectiva definida en la Ec. (4.6) debe ser obtenida, en general, en forma numérica a través de la derivada del cociente $(iG_{l,l}^K(0, \omega) - iG_{l,l}^K(0, \mu))/\overline{\varphi}_l(\omega)$ en $\omega = \mu$.

4.3. Temperatura efectiva y temperatura local

Si bien se mencionó que, en general, la temperatura efectiva se obtiene a partir de la Ec. (4.6) en forma numérica, bajo ciertas condiciones se puede encontrar una solución analítica. Dichas condiciones son las mismas que las presentadas en las Secciones 3.2 y 3.3, es decir en el régimen de forzado débil y dentro de la aproximación adiabática. Adicionalmente, el resultado analítico presentado en esta Sección es válido para el régimen de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$). Desarrollando a primer orden alrededor de $\omega = \mu$ se obtiene

$$iG_{l,l}^K(0, \mu) + i \left. \frac{dG_{l,l}^K(0, \omega)}{d\omega} \right|_{\omega=\mu} (\omega - \mu) - iG_{l,l}^K(0, \mu) = \frac{\beta_l^{eff}}{2} (\omega - \mu) \overline{\varphi}_l(\mu). \quad (4.8)$$

Primero se cancelan los términos $iG_{l,l}^K(0, \mu)$ de la izquierda y luego los factores $(\omega - \mu)$ a cada lado de la igualdad. Una vez hecho esto el límite $\omega \rightarrow \mu$ resulta trivial. Por lo

tanto la temperatura efectiva se puede despejar de la Ec. (4.8) dando como resultado

$$T_l^{eff} = \frac{1}{2} \left(\frac{\overline{\varphi}_l(\mu)}{i \frac{dG_{l,l}^K(0,\omega)}{d\omega} \Big|_{\omega=\mu}} \right). \quad (4.9)$$

La condición de forzado débil es introducida, al igual que en Secciones anteriores conservando sólo aquellas componentes de Floquet-Fourier con $k = -1, 0, 1$. Esto significa conservar sólo tres términos en las sumatorias de las Ecs. (4.4) y (4.7). Calculemos el denominador dentro de esta aproximación derivando la Ec. (4.4):

$$i \frac{dG_{l,l}^K(0,\omega)}{d\omega} = \sum_{k=-1}^1 \left\{ \frac{\beta}{2} \varphi_l(k, \omega_{-k}) + \tanh \left[\frac{\beta(\omega_{-k} - \mu)}{2} \right] \frac{d\varphi_l(k, \omega_{-k})}{d\omega} \right\}. \quad (4.10)$$

En el límite de baja frecuencia ($\Omega_0 \ll T$) equivale a la condición $\beta \Omega_0 \ll 1$, por lo tanto, al evaluar la expresión (4.10) en $\omega = \mu$ se obtiene

$$i \frac{dG_{l,l}^K(0,\omega)}{d\omega} = \frac{\beta}{2} \left\{ \overline{\varphi}_l(\mu) - \sum_{k=-1}^1 k \Omega_0 \frac{d\varphi_l(k, \omega_{-k})}{d\omega} \Big|_{\omega=\mu} \right\}, \quad (4.11)$$

donde se usó que $\tanh(x) \approx x$ para $x \ll 1$.

Reemplazando la Ec. (4.11) en la Ec. (4.9) se obtiene

$$T_l^{eff} = T \left(\frac{1}{1 - A \Omega_0} \right) \approx T(1 + A \Omega_0), \quad (4.12)$$

para Ω_0 pequeño, donde

$$A = \frac{1}{\overline{\varphi}_l(\mu)} \sum_{k=-1}^1 k \frac{d\varphi_l(k, \omega_{-k})}{d\omega} \Big|_{\omega=\mu}. \quad (4.13)$$

Para desarrollar la Ec. (4.12) a primer orden en Ω_0 es necesario quedarse solo con el orden 0 de (4.13). Esto corresponde a

$$A = \frac{1}{\sum_{k=-1}^1 \varphi_l(k, \mu)} \sum_{k=-1}^1 k \frac{d\varphi_l(k, \omega)}{d\omega} \Big|_{\omega=\mu}. \quad (4.14)$$

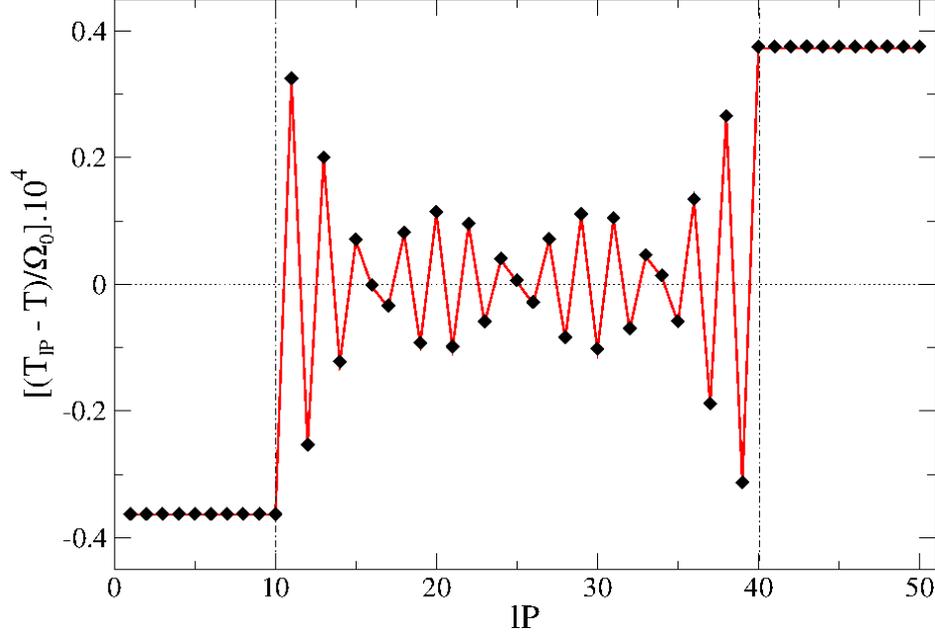


Figura 4.1: Temperatura local (línea roja) y temperatura efectiva (diamantes negros) a lo largo de un sistema unidimensional de $N = 50$ sitios con dos campos ac con una diferencia de fase $\delta = \pi/2$ en las posiciones indicadas con las líneas punteadas. El potencial químico de los reservorios es $\mu = 0,2$ y su temperatura, $T = 0,001$. La frecuencia de los potenciales ac es $\Omega_0 = 10^{-6}$ y su amplitud, $V_0 = 0,05$. Extraída de [61].

A partir de la definición dada en la Ec. (3.20) se puede ver que $A = \lambda_l^{(1)}(\mu)$ con lo cual se llega al resultado

$$T_l^{eff} = T \left[1 + \lambda_l^{(1)}(\mu) \Omega_0 \right]. \quad (4.15)$$

Este resultado coincide con lo obtenido para la temperatura local T_{lP} en la Ec. (3.21) y para la temperatura local T_{lP}^* en la Ec. (3.33). Este representa uno de los resultados centrales publicados en la Ref. [61].

En la Figura 4.1 se muestra la comparación entre la temperatura efectiva T_l^{eff} de la Ec. (4.6) y la temperatura local T_{lP} para un modelo unidimensional de $N = 50$ sitios. Como se puede apreciar, la temperatura local y la temperatura efectiva coinciden a lo largo de toda la muestra.

4.4. Conclusiones

Se definió una temperatura efectiva T^{eff} a partir de una relación de fluctuación-disipación (RFD) local para funciones de Green de una partícula. Se mostró que, para la condición de forzado débil, en el régimen adiabático y en la situación de interés de baja frecuencia ($\Omega_0 \ll T$), T^{eff} coincide con la temperatura local, es decir aquella que es definida mediante un termómetro (ver Capítulo 3). Una equivalencia como esta había sido establecida solamente para sistemas de espines clásicos [3, 4]. El hecho de que una equivalencia tal sea válida para un sistema cuántico fermiónico es un tema conceptual importante y merece investigación futura en otros sistemas. Cabe destacar que la RFD definida en este Capítulo está basada en la función de Green de una partícula que no es un observable físico, por lo tanto el resultado es importante desde el punto de vista conceptual pero no resulta aplicable desde el punto de vista experimental. La definición de una RFD fuera del equilibrio para observables físicos será objeto de estudio del próximo Capítulo.

Capítulo 5

Funciones de correlación y temperatura efectiva

5.1. Motivación

El objetivo de esta parte del trabajo era el de analizar el rol de las temperaturas efectivas en el contexto de una relación de fluctuación-disipación (RFD) para funciones de correlación corriente-corriente. La motivación obedece a dos razones principales. Por un lado, estamos interesados en corroborar la robustez de la definición de una temperatura efectiva a partir de una RFD, a nivel de una función de correlación diferente a aquella considerada en el Capítulo 4. Por otra parte, las funciones de correlación corriente-corriente son cantidades particularmente interesantes en sí mismas pues están relacionadas al ruido, que puede ser medido experimentalmente y contienen información valiosa sobre la naturaleza de las partículas elementales que toman parte en el proceso de transporte. El ruido de frecuencia cero es a menudo utilizado para caracterizar las correlaciones entre partículas en sistemas mesoscópicos [75]. Además, en bombeadores cuánticos, el ruido está relacionado a la posibilidad de tener bombeo cuantizado [76] y contiene información que no puede ser extraída del valor medio temporal de la corriente [32]. Las correlaciones de corriente en conductores mesoscópicos coherentes fueron descritas por primera vez por M. Büttiker en la Ref. [77] y desde entonces, una gran cantidad de trabajos sobre el ruido en sistemas mesoscópicos, analizados dentro del formalismo de matriz de dispersión (*scattering*

matrix) ha sido desarrollado [32, 78–81]. Para sistemas no interactuantes el formalismo de Keldysh, utilizado en este trabajo, y el formalismo de matriz de dispersión coinciden a nivel de la descripción de corrientes para situaciones estacionarias [82] y para potenciales dependientes armónicamente del tiempo [33–35]. Parte del objetivo de este trabajo es mostrar que este también es el caso para las correlaciones de las fluctuaciones de corriente. Sin embargo, el principal objetivo es el de mostrar que la temperatura efectiva obtenida a partir de una relación de fluctuación-disipación para las funciones de correlación corriente-corriente coincide con la temperatura local definida en el Capítulo 3 y que, por lo tanto, verifica las mismas propiedades termodinámicas que esta última.

5.2. Funciones de Green de operadores corriente

El operador corriente en el reservorio α fue determinado en la Sección 2.2.2 para un problema general de transporte (ver Ec. (2.84)). Para el caso particular en que el reservorio se acople a un único sitio $l\alpha$ del sistema central y que el elemento de matriz de salto no dependa de los grados de libertad $k\alpha$ del reservorio, el operador corriente que ingresa al reservorio α a tiempo t es

$$\hat{J}_\alpha(t) = i t_\alpha \sum_{k\alpha} \left(\hat{c}_{k\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{l\alpha}(t) - \hat{c}_{l\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{k\alpha}(t) \right), \quad (5.1)$$

que obedece reglas de conmutación bosónicas.

Para trabajar con funciones de correlación corriente-corriente en la Ref. [83] definimos el propagador conexo ordenado sobre el contorno para las corrientes:

$$iC_{\alpha\beta}(t, t') = \langle T_{\mathcal{C}}[\hat{J}_\alpha(t) \hat{J}_\beta(t')] \rangle - \langle \hat{J}_\alpha(t) \rangle \langle \hat{J}_\beta(t') \rangle. \quad (5.2)$$

Con esta definición, las componentes *menor*, *mayor* and *retardada* de la función de Green $C_{\alpha\beta}$ son

$$\begin{aligned} iC_{\alpha\beta}^<(t, t') &= \langle \hat{J}_\beta(t') \hat{J}_\alpha(t) \rangle - \langle \hat{J}_\alpha(t) \rangle \langle \hat{J}_\beta(t') \rangle, \\ iC_{\alpha\beta}^>(t, t') &= \langle \hat{J}_\alpha(t) \hat{J}_\beta(t') \rangle - \langle \hat{J}_\alpha(t) \rangle \langle \hat{J}_\beta(t') \rangle, \\ iC_{\alpha\beta}^R(t, t') &= \Theta(t - t') \langle [\hat{J}_\alpha(t), \hat{J}_\beta(t')] \rangle, \end{aligned} \quad (5.3)$$

donde $[,]$ denota el conmutador de las corrientes. Nótese que no hay diferencia de signo entre la componente *menor* y la *mayor* como se observa en las Ecs. (2.25) y (2.26) para las funciones de Green de operadores fermiónicos. Esto se debe precisamente a la estadística bosónica de los operadores de corriente.

Debido a que son funciones de dos tiempos (t y t') y el problema tiene dependencia periódica en el tiempo, estas funciones de Green tienen componentes de Floquet-Fourier de acuerdo a la Ec. (2.147). En particular resultarán útiles las componentes de Floquet-Fourier de las funciones de Green de *Keldysh* y *retardada* que, a partir de sus respectivas definiciones en las Ecs. (2.30) y (2.28) y de la definición de componente de Floquet-Fourier de la Ec. (2.147) es fácil ver que resultan:

$$C_{\alpha\beta}^K(k, \omega) = C_{\alpha\beta}^>(k, \omega) + C_{\alpha\beta}^<(k, \omega), \quad (5.4)$$

$$C_{\alpha\beta}^R(k, \omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{C_{\alpha\beta}^>(k, \omega') - C_{\alpha\beta}^<(k, \omega')}{\omega - \omega' + i0^+}. \quad (5.5)$$

5.3. Funciones de correlación corriente-corriente y ruido

Si consideramos dos reservorios (α y β) y dos tiempos (un tiempo absoluto t y uno relativo τ) se puede definir la función de correlación (simetrizada) de las corrientes como

$$P_{\alpha\beta}(t, t - \tau) = \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{J}_\alpha(t) \Delta \hat{J}_\beta(t - \tau) + \Delta \hat{J}_\beta(t - \tau) \Delta \hat{J}_\alpha(t) \rangle, \quad (5.6)$$

donde $\Delta \hat{J}_\alpha(t) = \hat{J}_\alpha(t) - \langle \hat{J}_\alpha(t) \rangle$.

Con la definición de las funciones de correlación corriente-corriente ordenadas sobre el contorno de Keldysh dadas en la Ec. (5.2), la función de correlación de las corrientes se puede expresar como

$$P_{\alpha\beta}(t, t - \tau) = \frac{i}{2} (C_{\alpha\beta}^>(t, t - \tau) + C_{\alpha\beta}^<(t, t - \tau)) = \frac{i}{2} C_{\alpha\beta}^K(t, t - \tau). \quad (5.7)$$

Cabe destacar que si uno no está interesado en la correlación corriente-corriente simetrizada (Ec. (5.6)) sino en la correlación sin simetrizar del tipo

$$P_{\alpha\beta}^{ns}(t, t - \tau) = \langle \Delta \hat{J}_\alpha(t) \Delta \hat{J}_\beta(t - \tau) \rangle, \quad (5.8)$$

la correlación se convierte en

$$P_{\alpha\beta}^{ns}(t, t - \tau) = iC_{\alpha\beta}^>(t, t - \tau) = iC_{\beta\alpha}^<(t - \tau, t). \quad (5.9)$$

Los resultados que se muestran son para la correlación simetrizada, pero es trivial obtener los resultados para la no simetrizada a partir de los expuestos.

Dado que experimentalmente el espectro del ruido es promediado en el tiempo absoluto t , la cantidad relevante es el espectro del ruido

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}(\omega) = 2 \int d\tau \langle P_{\alpha\beta}(t, t - \tau) \rangle_t e^{i\omega\tau}, \quad (5.10)$$

donde $\langle \dots \rangle_t$ indica el promedio temporal en t . A partir de la definición de las componentes de Floquet-Fourier dadas en la Ec. (2.147) es fácil mostrar que

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}(\omega) = iC_{\alpha\beta}^K(0, \omega). \quad (5.11)$$

Por lo tanto, la única componente relevante desde el punto de vista experimental es aquella con $k = 0$.

5.4. Temperatura efectiva a partir de funciones de correlación

La idea es analizar el rol de temperaturas efectivas (T^{eff*}) en el contexto una relación de fluctuación-disipación para funciones de correlación de dos partículas. Nos restringimos a funciones de correlación corriente-corriente porque son más fácilmente accesibles desde el punto de vista experimental. En particular, estamos interesados en una relación local, es decir que ambas corrientes son evaluadas en el mismo reservorio.

Como se mostró en la Ec. (5.11) de la Sección 5.3, la única componente de Floquet-Fourier relevante desde el punto de vista experimental es la componente con $k = 0$, es decir la componente dc. Esto coincide con lo realizado para la relación de fluctuación-disipación de una partícula analizada en la sección 4.2 en la cual solo se consideró la componente con $k = 0$ de la función de Green de una partícula. En este caso se

supone la validez de una relación de fluctuación-disipación similar a la de equilibrio con $\beta^{eff*} = 1/T^{eff*}$ jugando el rol de la inversa de la temperatura,

$$C_{\alpha\alpha}^R(0, \omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{C_{\alpha\alpha}^K(0, \omega')}{\omega - \omega' + i0^+} \tanh \left[\frac{\beta_{l\alpha}^{eff*} \omega'}{2} \right]. \quad (5.12)$$

Una expresión equivalente para la relación de fluctuación-disipación de la Ec. (5.12) se obtiene considerando solamente la parte imaginaria, que lleva a

$$iC_{\alpha\alpha}^K(0, \omega) = \coth \left[\frac{\beta_{l\alpha}^{eff*} \omega}{2} \right] \bar{\varphi}_{\alpha}^*(\omega), \quad (5.13)$$

donde $\bar{\varphi}_{\alpha}^*(\omega) = -2 \text{Im} [C_{\alpha\alpha}^R(0, \omega)]$. (Notar que la parte real simplemente se deriva por medio de las relaciones de Kramers-Kronig.) Al igual que en el caso de la relación de fluctuación-disipación de una partícula de la Ec. (4.6), la Ec. (5.13) define una temperatura efectiva que podría depender de ω , por lo tanto, de toma el límite $\omega \rightarrow 0$.

Es importante remarcar la similitud entre esta expresión y la que se muestra en la Ec. (4.6) para funciones de Green de una partícula (operadores fermiónicos). En este caso, la tangente hiperbólica es reemplazada por una cotangente hiperbólica debido a la estadística bosónica de los operadores de corriente.

5.5. Cálculo de las funciones de correlación

El propagador ordenado sobre el contorno de Keldysh dado en la Ec. (5.2) se puede escribir de manera explícita, en término de los operadores electrónicos como

$$iC_{\alpha\beta}(t, t') = -t_{\alpha}t_{\beta} \sum_{k\alpha, k\beta} \left(D_{k\alpha, l\alpha, k\beta, l\beta}(t, t') - D_{k\alpha, l\alpha, l\beta, k\beta}(t, t') - D_{l\alpha, k\alpha, k\beta, l\beta}(t, t') + D_{l\alpha, k\alpha, l\beta, k\beta}(t, t') \right), \quad (5.14)$$

donde

$$D_{i,j,k,l}(t, t') = \langle T_C [\hat{c}_i^{\dagger}(t) \hat{c}_j(t) \hat{c}_k^{\dagger}(t') \hat{c}_l(t')] \rangle - \langle \hat{c}_i^{\dagger}(t) \hat{c}_j(t) \rangle \langle \hat{c}_k^{\dagger}(t') \hat{c}_l(t') \rangle. \quad (5.15)$$

Debido a que estamos considerando electrones no interactuantes la Ec. (5.15) puede ser evaluada de manera exacta en términos de los propagadores de una partícula (2.22) mediante la aplicación del teorema de Wick. Esto nos lleva a

$$D_{i,j,k,l}(t,t') = G_{l,i}(t',t)G_{j,k}(t,t'). \quad (5.16)$$

Reemplazando con la Ec. (5.16) en la Ec. (5.14) da como resultado

$$\begin{aligned} iC_{\alpha\beta}(t,t') = & -t_{\alpha\beta} \sum_{k\alpha,k\beta} \left\{ G_{l\beta,k\alpha}(t',t)G_{l\alpha,k\beta}(t,t') - G_{k\beta,k\alpha}(t',t)G_{l\alpha,l\beta}(t,t') \right. \\ & \left. - G_{l\beta,l\alpha}(t',t)G_{k\alpha,k\beta}(t,t') + G_{k\beta,l\alpha}(t',t)G_{k\alpha,l\beta}(t,t') \right\}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

En el Apéndice B se encuentra el cálculo detallado que lleva desde esta expresión a las componentes de Floquet-Fourier $C_{\alpha\beta}^{\gtrless}(k=0, \omega)$. Aquí solo se reproducen los resultados particulares para dos casos de interés particular. El primer caso es el límite de frecuencia cero de $C_{\alpha\beta}^K(0, \omega)$ que, como se mencionó en la Sección 5.1, es utilizado para caracterizar las correlaciones entre partículas en sistemas mesoscópicos [75] y de allí su relevancia como caso particular,

$$P_{\alpha\beta} \equiv \frac{i}{2} C_{\alpha\beta}^K(k=0, \omega=0) = \delta_{\alpha\beta} P_{\alpha} + P_{\alpha\neq\beta}, \quad (5.18)$$

donde

$$\begin{aligned} P_{\alpha} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \Gamma_{\alpha}(\omega') \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma}(\omega'_k) f_{\alpha\gamma}(\omega', \omega'_k) |G_{l\alpha,l\gamma}^R(-k, \omega'_k)|^2, \\ P_{\alpha\neq\beta} &= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \Gamma_{\alpha}(\omega') \sum_{k=-\infty}^{\infty} \Gamma_{\beta}(\omega'_k) \left\{ f_{\alpha\beta}(\omega', \omega'_k) \text{Re} \left[G_{l\beta,l\alpha}^R(k, \omega') G_{l\alpha,l\beta}^R(-k, \omega'_k) \right] \right. \\ &\quad - 2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma}(\omega'_{k'}) f_{\alpha\gamma}(\omega', \omega'_{k'}) \text{Im} \left[G_{l\beta,l\alpha}^R(k, \omega') G_{l\alpha,l\gamma}^R(-k', \omega'_{k'}) \right. \\ &\quad \left. \left. \times G_{l\beta,l\gamma}^R(k-k', \omega'_{k'})^* \right] + G_{l\beta,l\alpha}^{\gtrless}(k, \omega') G_{l\beta,l\alpha}^{\lessgtr}(k, \omega')^* \right\} + [\alpha \leftrightarrow \beta], \end{aligned} \quad (5.19)$$

siendo que $[\alpha \leftrightarrow \beta]$ significa repetir lo mismo intercambiando α con β y

$$f_{\alpha\beta}(\omega, \omega') = f_{\alpha}(\omega)(1 - f_{\beta}(\omega')) + f_{\beta}(\omega')(1 - f_{\alpha}(\omega)). \quad (5.20)$$

Es importante destacar que este se trata de un resultado general para un sistema cuántico multiterminal con campos alternos aplicados y que la suma sobre γ se extiende sobre todos los reservorios a los que se encuentra conectado el sistema central. Este es uno de los resultados centrales publicados en la Ref. [83].

A esta altura es interesante comparar con resultados previos obtenidos con el formalismo de matriz de dispersión (ver Ref. [81]). Para hacer eso, es necesario asumir que todos los reservorios se encuentran a la misma temperatura y potencial químico y separar el ruido de frecuencia cero en dos contribuciones

$$P_{\alpha\beta} \equiv P_{\alpha\beta}^{(th)} + P_{\alpha\beta}^{(sh)}, \quad (5.21)$$

donde el primer término,

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}^{(th)} = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} f(\omega')(1-f(\omega'))\Gamma(\omega') \sum_{k=-\infty}^{\infty} \Gamma(\omega'_k) \left\{ \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma} \left(|G_{l\alpha,l\gamma}^R(k,\omega')|^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + |G_{l\alpha,l\gamma}^R(-k,\omega'_k)|^2 \right) - |G_{l\alpha,l\beta}^R(k,\omega')|^2 - |G_{l\beta,l\alpha}^R(k,\omega')|^2 \right\}, \quad (5.22) \end{aligned}$$

corresponde al ruido térmico o de Nyquist-Johnson, mientras que el segundo,

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}^{(sh)} = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \Gamma(\omega') \sum_{k=-\infty}^{\infty} \Gamma(\omega'_k) \left\{ \delta_{\alpha\beta} (f(\omega') - f(\omega'_k))^2 |G_{l\alpha,l\gamma}^R(k,\omega')|^2 \right. \\ & - f(\omega')^2 \left(|G_{l\alpha,l\beta}^R(k,\omega')|^2 + |G_{l\beta,l\alpha}^R(k,\omega')|^2 \right) + 2f(\omega')f(\omega'_k) \\ & \times \text{Re} \left[G_{l\beta,l\alpha}^R(k,\omega') G_{l\alpha,l\beta}^R(-k,\omega'_k) \right] - 2\text{Re} \left[\left(f(\omega') G_{l\beta,l\alpha}^R(k,\omega') \right. \right. \\ & \left. \left. - f(\omega'_k) G_{l\alpha,l\beta}^R(-k,\omega'_k)^* \right) G_{l\beta,l\alpha}^<(k,\omega')^* \right] - |G_{l\beta,l\alpha}^<(k,\omega')|^2 \right\}, \quad (5.23) \end{aligned}$$

es el ruido de disparo (*shot noise*), asociado a la cuantización de la carga. Usando la relación entre la matriz de dispersión de Floquet y las funciones de Green [33–35]

$$S_{F,\alpha\beta}(\omega_m, \omega_n) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{n,m} - i \sqrt{\Gamma(\omega_m) \Gamma(\omega_n)} G_{l\alpha,l\beta}^R(m-n, \omega_n), \quad (5.24)$$

es fácil mostrar que el resultado dado en la Ec. (5.22) coincide con lo obtenido usando el formalismo de matriz de dispersión en la Ref. [81]. Este resultado, publicado en

la Ref. [83], permite mostrar que el formalismo de Keldysh coincide con el de matriz de dispersión no solo a nivel de corrientes [33–35, 82] sino también a nivel de las correlaciones de fluctuaciones de corriente.

El segundo caso de interés es aquel en el cual $\alpha = \beta = P$, es decir que nos concentramos en las fluctuaciones de corriente de la punta de prueba. Usando el hecho de que la punta es no invasiva, nos quedamos con los términos a orden más bajo en el acoplamiento t_P entre el sistema y el termómetro,

$$iC_{PP}^K(0, \omega) = \Gamma_P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma=L,R} \Gamma_{\gamma}(\omega') \left\{ f_{\gamma}(\omega') [2 - f_P(\omega'_k + \omega) - f_P(\omega'_k - \omega)] \right. \\ \left. + [f_P(\omega'_k + \omega) + f_P(\omega'_k - \omega)] (1 - f_{\gamma}(\omega')) \right\} |G_{IP,l\gamma}^R(k, \omega')|^2. \quad (5.25)$$

Por otra parte, para calcular la temperatura efectiva (ver Ec. (5.13)) necesitamos $\bar{\varphi}_P^*(\omega)$, que es

$$\bar{\varphi}_P^*(\omega) = \Gamma_P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma=L,R} \Gamma_{\gamma}(\omega') [f_P(\omega'_k - \omega) - f_P(\omega'_k + \omega)] |G_{IP,l\gamma}^R(k, \omega')|^2. \quad (5.26)$$

El detalle de cómo llegar a estas expresiones se encuentra en el Apéndice B.

5.6. Comparación de la temperatura efectiva con la local

Las funciones de correlación dadas en las Ecs. (5.25) y (5.26) dependen de la temperatura T_P y el potencial químico μ_P de la punta a través de la función de Fermi f_P . Por lo tanto, la temperatura efectiva T^{eff*} calculada a partir de estas funciones de correlación (mediante la Ec. (5.13)) también depende de T_P y μ_P . Hay muchas posibles elecciones razonables para estas cantidades. Por el momento solo nos concentraremos en una de las posibles elecciones y dejaremos el análisis de otras posibilidades para la parte final de esta Sección. Por tanto, ahora elegimos μ_P igual al potencial químico μ de los reservorios y T_P igual a la temperatura local T_{IP} , es decir aquella que permite anular el flujo de calor entre el sistema y la punta.

En la Figura 5.1 se muestra un gráfico típico para $iC_{PP}^K(0, \omega)$, $\bar{\varphi}_P^*(\omega)$ y su cociente como función de ω . De acuerdo a la definición de temperatura efectiva dada en la Ec. (5.13), la derivada de este cociente en $\omega = 0$ corresponde a $\beta^{eff*}/2$. Esta derivada es calculada numéricamente. En la misma figura se muestra el gráfico de $\tanh[\beta^{eff*}\omega/2]$ y se puede observar que el cociente $\bar{\varphi}_P^*(\omega)/iC_{PP}^K(0, \omega)$ resulta bien ajustado por una relación tipo RFD para un intervalo de frecuencias razonablemente amplio.

En la Figura 5.2 se muestra la comparación entre la diferencia de temperatura local ΔT_{lP} y la diferencia de temperatura efectiva ΔT^{eff*} , ambas relativas a la temperatura T de los reservorios, para cada punto de una cadena lineal de $N = 30$ sitios. Como se puede apreciar, la temperatura efectiva tiene el mismo comportamiento oscilatorio con frecuencia espacial $2k_F$ exhibido por la temperatura local y existe un buen acuerdo entre las dos temperaturas a lo largo de toda la estructura, sobre todo en las región izquierda, que se encuentra entre el reservorio L y el primer potencial externo (*left region* en la Figura 3.1) y la región derecha, ubicada entre el segundo potencial alterno y el reservorio R (*right region* en la misma figura). Estas regiones son las que determinan el flujo de calor entre el sistema y cada uno de los reservorios (ver Sección 3.4 o Refs. [62, 84]).

En la Figura 5.3 se muestran los comportamientos de la temperatura efectiva T^{eff*} y de la temperatura local T_{lP} , calculadas para el sitio conectado al reservorio L como función de la frecuencia Ω_0 para dos temperaturas T de los reservorios diferentes. Este análisis puede ser realizado en cualquier sitio del sistema central, pero se elije este sitio en particular porque su temperatura local determina la corriente de calor que fluye hacia el reservorio L , como se mostró en la Sección 3.4. Los resultados para cualquier otro sitio del sistema central son similares. En el panel superior de la Figura 5.3 la temperatura es $T = 0,016$ mientras que en el panel inferior corresponde a $T = 0,005$. Como se puede apreciar, las dos formas de definir la temperatura coinciden a bajas frecuencias. Esto refuerza la idea de que, para una dada temperatura T de los reservorios, T^{eff*} es una temperatura *bona fide* dentro del régimen de frecuencia Ω_0 baja. De la Figura 5.3 se desprende que mientras más alta es la temperatura T de los reservorios, más amplia es la región de frecuencias Ω_0 en la cual las dos definiciones de temperatura coinciden. Este fue otro de los resultados importantes publicados en la Ref. [83].

Como se mencionó anteriormente en esta Sección, la temperatura efectiva T^{eff*}

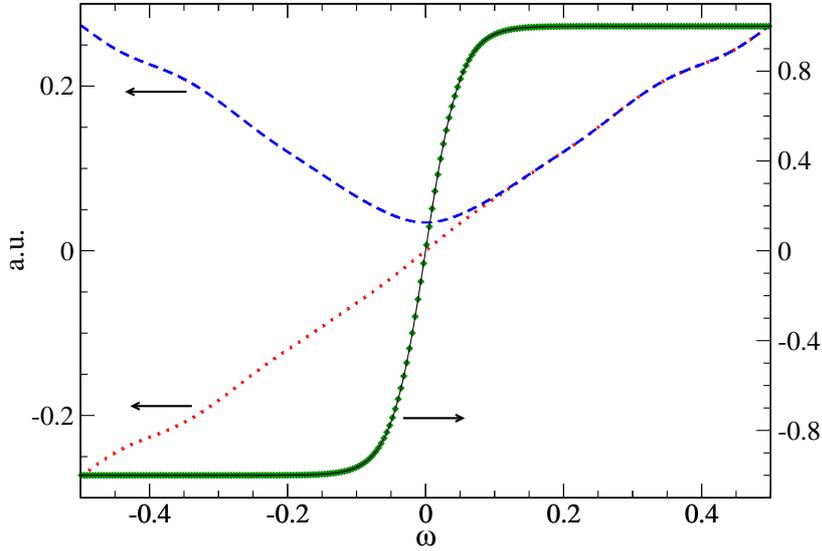


Figura 5.1: Funciones de correlación corriente-corriente $\overline{\varphi}_P^*(\omega)$ (línea punteada roja), $iC_{PP}^K(0, \omega)$ (línea discontinua azul), su cociente (diamantes verdes), y $\tanh[\beta^{eff*}\omega/2]$ (línea negra sólida) como función de ω . Los reservorios tienen potencial químico $\mu = 0,2$ y temperatura $T = 0,025$. La frecuencia del potencial alterno es $\Omega_0 = 0,01$, la amplitud es $V_0 = 0,05$ y $E_B = 0,2$. Extraída de [62].

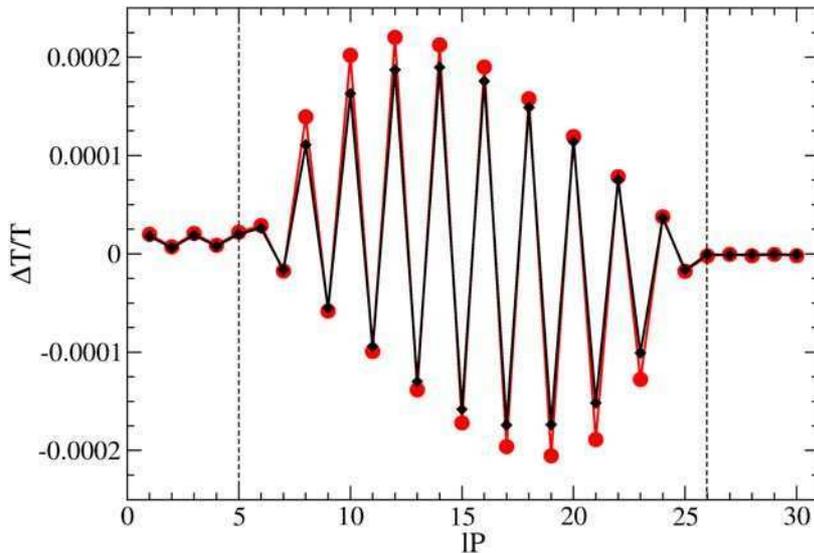


Figura 5.2: Diferencias de temperatura efectiva ΔT^{eff*} (círculos rojos) y local ΔT_{lP} relativas a la temperatura T de los reservorios como función del sitio lP a lo largo del sistema central de $N = 30$ sitios. Los potenciales alternos actúan en los sitios indicados con las líneas punteadas con amplitud $V_0 = 0,05$, frecuencia $\Omega_0 = 0,001$, desfase $\delta = \pi/2$ y $E_B = 0,2$. La temperatura de los reservorios es $T = 0,02$ y su potencial químico $\mu = 0,2$. Extraída de [62].

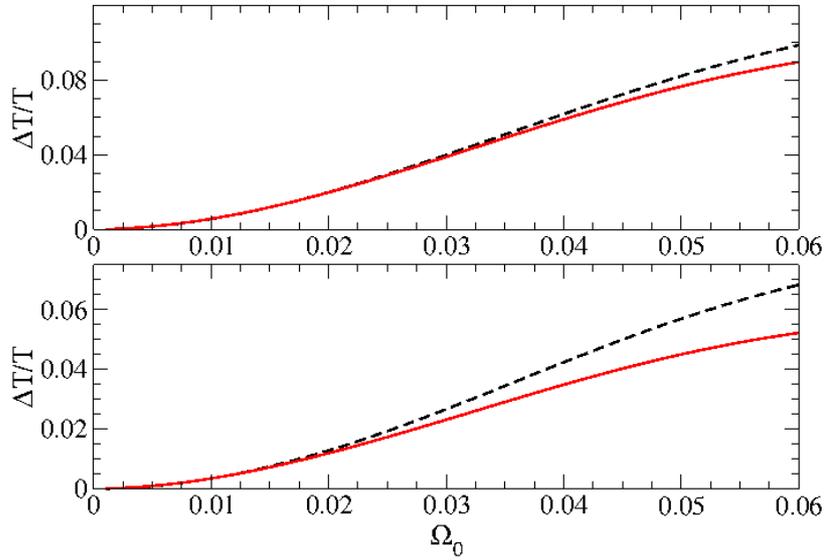


Figura 5.3: Diferencia de temperatura local ΔT_{lP} (línea discontinua negra) y diferencia de temperatura efectiva ΔT_{lP}^{eff*} (continua roja) para el sitio $lP = lL$ (el sitio conectado al reservorio L) como función de la frecuencia Ω_0 . Los reservorios tienen potencial químico $\mu = 0,2$. El panel superior corresponde a $T = 0,016$, mientras que el inferior, a $T = 0,005$. Extraída de [62].

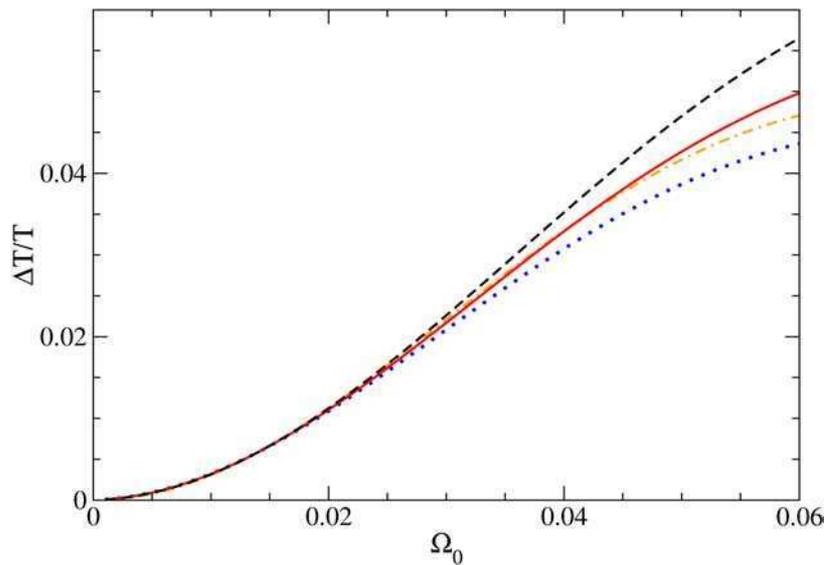


Figura 5.4: Diferencia de temperatura local ΔT_{lP} (línea discontinua negra) y diferencia de temperatura efectiva ΔT_{lP}^{eff*} para el Caso I (línea roja continua), Caso II (punteada azul) y Caso III (punteada y discontinua naranja), relativas a la temperatura T de los reservorios para el sitio $lP = lL$ como función de la frecuencia Ω_0 . Los reservorios tienen potencial químico $\mu = 0,2$ y temperatura $T = 0,01$. Extraída de [62].

depende de los valores de T_P y μ_P (respectivamente la temperatura y el potencial químico de la punta de prueba). La elección analizada al comienzo de esta Sección fue aquella en que μ_P es igual al potencial químico μ de los reservorios y T_P igual a la temperatura local T_{lP} (aquella que anula la corriente de calor para dicho potencial químico). Llamaremos a esta elección Caso I. Otra elección posible (que denominaremos Caso II) podría ser elegir $\mu_P = \mu$, al igual que en el caso anterior, pero T_P tal que $T^{eff*} = T_P$. Una tercera posibilidad (Caso III) podría ser elegir T_P tal que $T^{eff*} = T_P$ pero al mismo tiempo que $\mu_P = \mu_{lP}$ (el potencial químico local) para que la corriente de carga entre el sistema y la punta se anule a dicha temperatura. En este trabajo solo estudiaremos estas tres posibilidades.

En la Figura 5.4 mostramos las tres temperaturas efectivas correspondientes a las definiciones anteriores (Casos I-III) referidos a la temperatura T de los reservorios, es decir que graficamos ΔT_{lP}^{eff*} para cada uno de los mencionados casos junto con la diferencia de temperatura local ΔT_{lP} , todas relativas a la temperatura T de los reservorios, como función de la frecuencia Ω_0 de los potenciales alternos para una dada temperatura T de los reservorios. Como se puede ver, los tres casos dan una buena estimación de la temperatura local en el régimen de interés, es decir en el régimen de baja frecuencia Ω_0 . Este comportamiento da soporte a que la definición de temperatura local a partir de una RFD es robusta.

5.7. Conclusiones

Se calcularon las funciones de correlación corriente-corriente para un sistema cuántico llevado fuera del equilibrio mediante la aplicación de potenciales alternos, encontrando una expresión explícita para el ruido de frecuencia cero dentro del formalismo de Schwinger-Keldysh, mostrando que coincide con lo obtenido con el formalismo de matriz de dispersión. Para sistemas no interactuantes ambos formalismos son equivalentes, mientras que las funciones de Green tienen la ventaja de proveer un marco sistemático para el estudio de sistemas interactuantes.

Por otra parte, se definió una temperatura efectiva a partir de una relación de fluctuación-disipación (RFD) para estas funciones de correlación corriente-corriente y se mostró que, para bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$), coincide con la temperatura local definida mediante termómetros (Secciones 3.2 y 3.3) y con una temperatura efectiva

definida a partir de una RFD a nivel de propagadores de una partícula. Este resultado abre la posibilidad de usar correlaciones corriente-corriente en experimentos reales para definir la temperatura local de una muestra.

Capítulo 6

Conclusiones

A lo largo de este trabajo de Tesis hemos estudiado los conceptos de *temperatura local* y *temperatura efectiva* en sistemas mesoscópicos dependientes del tiempo. En particular, el dispositivo elegido para estudiar dichos conceptos consistió en un punto cuántico en cuyas paredes se aplican potenciales con dependencia armónica en el tiempo. Una realización experimental de un sistema con estas características fue lograda por M. Switkes y colaboradores y se encuentra descrito en la Ref. [27].

En el Capítulo 3 se introdujo el concepto de *temperatura local* en este tipo de sistemas y se estudió su comportamiento. Dicha temperatura se definió a través de la inclusión, en la descripción microscópica del sistema, de una punta de prueba que actuaba como termómetro. Se propuso que dicha punta de prueba debía ser un reservorio débilmente acoplado al sistema (una punta no invasiva que no introduzca modificaciones en los procesos de transporte del sistema) que no intercambia calor con el mismo. En esas condiciones se definió la temperatura local T_{IP} del sitio IP del sistema central como la temperatura que debería tener la punta de prueba conectada a dicho sitio para que el promedio temporal de la corriente de calor sea nulo. Se estudió el comportamiento de dicha temperatura local y se observó la existencia de oscilaciones espaciales de frecuencia $2k_F$ que tienen un origen similar a las oscilaciones de Friedel observadas al introducir puntas de voltaje. Estas oscilaciones se deben a procesos de interferencia en el transporte de carga que tiene lugar entre los centros de aplicación de los potenciales alternos. Por lo tanto dicho comportamiento oscilatorio es un indicio inequívoco de la coherencia de por lo menos alguna componente en el

transporte de energía a lo largo de la muestra. Estas oscilaciones son similares a las observadas en otros sistemas mesoscópicos pero en una situación estacionaria [20].

Siguiendo en el mismo sentido, se generalizó la definición de termómetro, teniendo en cuenta el hecho de que la corriente de calor está relacionada con la corriente de carga. Por lo tanto se permitió que el termómetro funcione también como punta de voltaje y de este modo permita determinar, en forma simultánea, la temperatura local T_{IP}^* y el potencial químico local μ_{IP}^* , a partir de la condición que los promedios temporales de las corrientes de calor y de carga se anulen en forma simultánea. Se comparó esta nueva temperatura local (T_{IP}^*) con la anterior (T_{IP}) y se mostró analíticamente que coinciden en dos límites de interés y numéricamente para las restantes situaciones.

Además se mostró que existe una relación entre la temperatura local en los contactos y la dirección de la corriente de calor entre el sistema y los reservorios, mostrando que, en todos los casos, la corriente de calor fluye de la región más caliente a la más fría, dando sustento a la idea de que esta definición de temperatura local es adecuada.

Para reforzar más aún esta idea, se estudió la validez de la ley de Wiedemann-Franz en el sistema y para ello se procedió a calcular las conductancias efectivas de contacto (tanto térmicas como eléctricas). Se mostró que su cociente satisface la ley de Wiedemann-Franz para bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$) mientras que se observa una desviación con respecto a dicha ley para altas frecuencias ($\Omega_0 \gg T$), lo que llevó a una generalización de dicha ley para este tipo de sistemas. Se encontraron expresiones analíticas para explicar ambos comportamientos.

En el Capítulo 4 se exploró la posibilidad de definir una *temperatura efectiva* a partir de una relación de fluctuación-disipación (RFD) local para funciones de Green de una partícula. Se mostró analíticamente que, para bajas amplitudes de los potenciales alternos, en el régimen adiabático y en para frecuencias bajas ($\Omega_0 \ll T$), coincide con la temperatura local T_{IP} , aquella que es definida mediante un termómetro (que se estudió en el Capítulo 3). Previamente, una equivalencia como esta había sido establecida solamente para sistemas de espines clásicos [3, 4].

En el Capítulo 5 se continuó explorando la posibilidad de definir una temperatura efectiva a partir de una RFD pero a nivel de funciones de correlación de orden superior a la estudiada en el Capítulo 4. Se eligió la correlación corriente-corriente debido a que está relacionada con el ruido, que puede ser medido experimentalmente y contiene

información sobre la naturaleza de las partículas elementales que toman parte en el proceso de transporte y que no puede ser obtenida a partir de las corrientes. Se comenzó por calcular las funciones de correlación corriente-corriente y se encontraron expresiones para el espectro del ruido dentro del formalismo de funciones de Green de Keldysh. Se comparó el valor a frecuencia cero con el obtenido mediante el formalismo de matriz de dispersión (*scattering matrix*) y se comprobó analíticamente que las expresiones coinciden en forma exacta. Una vez obtenidas las funciones de correlación se procedió a definir una RFD para estas funciones y mediante ella se definió una temperatura efectiva T^{eff*} . Se estudió su comportamiento y se observaron las mismas oscilaciones con frecuencia espacial $2k_F$ descritas para las temperaturas locales T_{lP} y T_{lP}^* definidas en el Capítulo 3 mediante termómetros. Se comparó numéricamente la temperatura efectiva T^{eff*} con la temperatura local T_{lP} y se encontró que coinciden en el régimen de bajas frecuencias ($\Omega_0 \ll T$), régimen en el que además se mostró que T_{lP} coincide con la temperatura efectiva T^{eff} obtenida a partir de una RFD a nivel de propagadores de una partícula. Es decir que en el régimen de bajas frecuencias todas las formas estudiadas de definir la temperatura coinciden. Este resultado abre la posibilidad de usar correlaciones corriente-corriente en experimentos reales para definir la temperatura local de una muestra.

Apéndice A

Cálculo de la temperatura local variando T_P y μ_P

Al igual que en la Sección 3.2 se supone que la temperatura T de los reservorios es mucho menor que el potencial químico y por lo tanto la expansión de Sommerfeld puede ser aplicada. Nuevamente conservamos los términos hasta orden T^2 y definiendo $\mu_{lP}^* \equiv \mu + \Delta\mu_{lP}^*$, la Ec. (3.29) se puede reescribir como

$$J_P^X \propto \sum_{k=-1}^1 \left\{ \int_{\mu-k\Omega_0+\Delta\mu_{lP}^*}^{\mu} d\omega \phi_{lP}^X(k, \omega) + \frac{\pi^2}{6} T^2 F_{lP}^X(k, \mu) - \frac{\pi^2}{6} (T_{lP}^*)^2 F_{lP}^X(k, \mu - k\Omega_0 + \Delta\mu_{lP}^*) \right\}, \quad (\text{A.1})$$

donde

$$F_l^X(k, \omega) = \frac{d}{d\omega} \phi_l^X(\omega). \quad (\text{A.2})$$

Se espera que $\Delta\mu_{lP}^*$ sea por lo menos de orden Ω_0 . Expandiendo el primer término de la Ec. (A.1) a segundo orden en Ω_0 obtenemos:

$$\int_{\mu-k\Omega_0+\Delta\mu_{lP}^*}^{\mu} d\omega \phi_{lP}^X(k, \omega) = -\phi_{lP}^X(k, \mu)(\Delta\mu_{lP}^* - k\Omega_0) - \frac{1}{2} F_{lP}^X(k, \mu)(\Delta\mu_{lP}^* - k\Omega_0)^2. \quad (\text{A.3})$$

En el caso de temperatura finita T de los reservorios se define $T_{lP}^* \equiv T + \Delta T_{lP}^*$ y se espera que ΔT_{lP}^* sea por lo menos de orden Ω_0 . Por lo tanto, al orden más bajo en

Ω_0 , J^e y J^Q se convierten en

$$\begin{cases} J_P^e(T_{IP}^*, \mu_{IP}^*) & \propto -a\Delta\mu_{IP}^* - b\Delta T_{IP}^* + \alpha\Omega_0, \\ J_P^Q(T_{IP}^*, \mu_{IP}^*) & \propto -c\Delta\mu_{IP}^* - d\Delta T_{IP}^* + \beta\Omega_0, \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

donde

$$a = \sum_{k=-1}^1 \left[\varphi_{IP}(k, \mu) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \frac{d^2 \varphi_{IP}}{d\omega^2}(k, \mu) \right], \quad (\text{A.5})$$

$$b = \frac{\pi^2}{3} T \sum_{k=-1}^1 \frac{d\varphi_{IP}}{d\omega}(k, \mu), \quad (\text{A.6})$$

$$c = T \sum_{k=-1}^1 \frac{d\varphi_{IP}}{d\omega}(k, \mu), \quad (\text{A.7})$$

$$d = \sum_{k=-1}^1 \varphi_{IP}(k, \mu), \quad (\text{A.8})$$

$$\alpha = \sum_{k=-1}^1 k \left[\varphi_{IP}(k, \mu) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \frac{d^2 \varphi_{IP}}{d\omega^2}(k, \mu) \right], \quad (\text{A.9})$$

$$\beta = T \sum_{k=-1}^1 k \frac{d\varphi}{d\omega}(k, \mu). \quad (\text{A.10})$$

Dentro de las aproximaciones, la solución del sistema de ecuaciones (A.4) es

$$\begin{cases} \Delta\mu_{IP}^* & = \frac{1}{\Delta}(d\alpha - b\beta)\Omega_0, \\ \Delta T_{IP}^* & = \frac{1}{\Delta}(a\beta - c\alpha)\Omega_0, \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

donde

$$\Delta = ad - bc = \left(\sum_k \varphi_{IP}(k, \mu) \right)^2 + O(T)^2. \quad (\text{A.12})$$

Por lo tanto,

$$\begin{cases} \Delta\mu_{IP}^* & = \left(\frac{\sum_k k\varphi_{IP}(k, \mu)}{\sum_k \varphi_{IP}(k, \mu)} + O(T)^2 \right) \Omega_0, \\ \Delta T_{IP}^* & = T \left[\frac{d}{d\omega} \left(\frac{\sum_k k\varphi_{IP}(k, \omega)}{\sum_k \varphi_{IP}(k, \omega)} \right)_{\omega=\mu} + O(T)^2 \right] \Omega_0. \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Considerando que $\frac{d}{d\omega}\Gamma_\alpha(\omega)|_{\omega=\mu} \sim 0$, entonces T_{lP}^* se convierte en

$$T_{lP}^* = T \left[1 + \lambda_{lP}^{(1)}(\mu)\Omega_0 \right], \quad (\text{A.14})$$

que coincide con la Ec. (3.21).

Para el caso de alta frecuencia ($\Omega_0 \gg T$), se propone una solución para $\Delta\mu_{lP}^*$ y ΔT_{lP}^* de la forma:

$$\begin{cases} \Delta\mu_{lP}^* &= \Delta\mu_0 + k_1 T, \\ \Delta T_{lP}^* &= \Delta T_0 + k_2 T. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Se introducen en la Ec. (A.1) los valores de $\Delta\mu_{lP}^*$ y ΔT_{lP}^* dados en la Ec. (A.15). El resultado de esto son expresiones de las corrientes J_α^e y J_α^Q en potencias de T . Conservando términos a primer orden en T , las corrientes se pueden escribir como

$$J_\alpha^e = J_\alpha^{e,(0)} + J_\alpha^{e,(1)}T, \quad (\text{A.16})$$

$$J_\alpha^Q = J_\alpha^{Q,(0)} + J_\alpha^{Q,(1)}T. \quad (\text{A.17})$$

Las ecuaciones a ser satisfechas son cuatro:

$$J^{X,(n)} = 0, \quad (\text{A.18})$$

donde $X = e, Q$ y $n = 0, 1$. Las ecuaciones con $n = 0$ llevan a valores para $\Delta\mu_0$ y ΔT_0 , mientras que las ecuaciones con $n = 1$ llevan a $k_1 = 0$ y $k_2 = -1$. Por lo tanto $\Delta\mu_{lP}^*$ y ΔT_{lP}^* pueden escribirse como

$$\begin{cases} \Delta\mu_{lP}^* &= \frac{\sum_k k \varphi_{lP}(k, \mu)}{\sum_k \varphi_{lP}(k, \mu)} \Omega_0, \\ \Delta T_{lP}^* &= \sqrt{\frac{3}{\pi^2} \lambda_{lP}^{(0)}(\mu)} \Omega_0 - T. \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

El valor obtenido para ΔT_{lP}^* en el régimen de altas frecuencias coincide con el obtenido a través de la definición de temperatura local de la Sección 3.2 (ver Ec. (3.24)).

Apéndice B

Cálculo de funciones de correlación corriente-corriente

Para calcular la componente *menor* de la función de Green $C_{\alpha\beta}(t, t')$ es necesario calcular la respectiva componente de la Ec. (5.16). La función $D_{i,j,k,l}(t, t')$ es un producto de la forma (2.66) por lo tanto su componente *menor* es

$$D_{i,j,k,l}^<(t, t') = G_{l,i}^>(t', t)G_{j,k}^<(t, t'), \quad (\text{B.1})$$

de acuerdo a la Ec. (2.67).

Usando la Ec. (B.1) se puede escribir la componente *menor* de la función de Green $C_{\alpha\beta}(t, t')$ dada en la Ec. (5.17) como

$$\begin{aligned} iC_{\alpha\beta}^<(t, t') &= t_\alpha t_\beta \sum_{k\alpha, k\beta} \{ (G_{k\alpha, l\beta}^>(t, t')^* G_{l\alpha, k\beta}^<(t, t')) - (G_{k\alpha, k\beta}^>(t, t')^* G_{l\alpha, l\beta}^<(t, t')) \\ &\quad - (G_{l\alpha, l\beta}^>(t, t')^* G_{k\alpha, k\beta}^<(t, t')) + (G_{l\alpha, k\beta}^>(t, t')^* G_{k\alpha, l\beta}^<(t, t')) \}, \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

donde se usó la propiedad $G_{j,j'}^<,>(t, t') = -G_{j',j}^<,>(t', t)^*$. Notar que el último término es igual al primero cambiando “<” con “>” y conjugando. Lo mismo ocurre con el segundo y el tercer término. El resultado para la componente *mayor* se obtiene simplemente cambiando “>” con “<” en la Ec. (B.2).

Como se mencionó con anterioridad, estamos interesados en las componentes de Floquet-Fourier de estas funciones de Green, por lo tanto de acuerdo a la Ec. (2.147)

es necesario calcular

$$C_{\alpha\beta}^<(t, t') = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i[k\Omega_0 t + \omega(t-t')]} C_{\alpha\beta}^<(k, \omega). \quad (\text{B.3})$$

Substituyendo con los desarrollos de Floquet-Fourier de las funciones de Green $G_{j,j'}(t, t')$ (ver Eq. (2.147)) en la Ec. (B.2) y rescribiendo en la forma de la Ec. (B.3) se puede obtener la componente de Floquet-Fourier con $k = 0$ que resulta ser

$$C_{\alpha\beta}^<(0, \omega) = i [\mathcal{A}_{\alpha\beta}^<(\omega) + \mathcal{A}_{\alpha\beta}^>(-\omega)^* + \mathcal{B}_{\alpha\beta}^<(\omega) + \mathcal{B}_{\alpha\beta}^>(-\omega)^*], \quad (\text{B.4})$$

donde

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}^<(\omega) = \sum_k \int \frac{d\omega'}{2\pi} \left(t_\alpha \sum_{k\alpha} G_{l\beta, k\alpha}^>(-k, \omega'_k) \right) \left(t_\beta \sum_{k\beta} G_{l\alpha, k\beta}^<(k, \omega' + \omega) \right), \quad (\text{B.5})$$

$$\mathcal{B}_{\alpha\beta}^<(\omega) = \sum_k \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_{l\alpha, l\beta}^>(k, \omega')^* \left(t_\alpha t_\beta \sum_{k\alpha, k\beta} G_{k\alpha, k\beta}^<(k, \omega' + \omega) \right), \quad (\text{B.6})$$

y $\mathcal{X}^>$ se obtiene a partir de $\mathcal{X}^<$ intercambiando “<” con “>” ($\mathcal{X} = \mathcal{A}, \mathcal{B}$).

Los términos que se encuentran entre paréntesis en la Ec. (B.5) corresponden a las componentes de Floquet-Fourier encontradas en la Ec. (2.157), mientras que el término que se encuentra entre paréntesis en la Ec. (B.6) corresponde a las componentes de Floquet-Fourier encontradas en la Ec. (2.170). De este modo todo queda expresado en términos de las componentes de Floquet-Fourier de las funciones de Green con índices en el sistema central, que son aquellas que se encuentran mediante el método descrito en la Sección 2.2.4.

Debido a que la función de Green *mayor* se obtiene a partir de la Ec. (B.2) mediante el intercambio de “<” con “>”, su respectiva componente de Floquet-Fourier se puede escribir directamente a partir de la Ec. (B.4) intercambiando “<” con “>”

$$C_{\alpha\beta}^>(0, \omega) = i [\mathcal{A}_{\alpha\beta}^>(\omega) + \mathcal{A}_{\alpha\beta}^<(-\omega)^* + \mathcal{B}_{\alpha\beta}^>(\omega) + \mathcal{B}_{\alpha\beta}^<(-\omega)^*]. \quad (\text{B.7})$$

En particular, estamos interesados en el caso en que $\alpha = \beta = P$, es decir que estamos interesados en fluctuaciones en la corriente que fluye a través de la punta de prueba. Debido a que estamos tratando con una punta no invasiva, solo nos quedamos

con los términos de orden más bajo en el acoplamiento con dicha punta (t_P). Dado que, como se muestra en la Ec. (2.117), $\Gamma_\alpha, \Sigma_\alpha \propto |t_\alpha|^2$ es fácil ver que

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{PP}^<(\omega) &= O(|t_P|^4), \\ \mathcal{B}_{PP}^<(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G_{lP,lP}^>(0, \omega')^* \lambda_P^<(\omega' + \omega) \Gamma_P(\omega' + \omega) + O(|t_P|^4). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

De este modo $\mathcal{B}_{PP}^<(\omega)$ y $\mathcal{B}_{PP}^>(\omega)$ son los únicos términos con contribuciones de orden $|t_P|^2$. Usando las Ecs. (2.110) y (2.152) podemos escribir a este orden

$$\begin{aligned} C_{PP}^K(0, \omega) &= -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_k \sum_{\gamma=L,R} |G_{lP,l\gamma}^R(-n, \omega'_n)|^2 \Gamma_\gamma(\omega'_n) \\ &\quad \times \left\{ f_{\gamma P}(\omega'_n, \omega' + \omega) \Gamma_P(\omega' + \omega) + f_{\gamma P}(\omega'_n, \omega' - \omega) \Gamma_P(\omega' - \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Para obtener la expresión para $\bar{\varphi}_P^*(\omega)$ se puede utilizar la siguiente identidad que puede ser deducida fácilmente de la Ec. (5.4),

$$\bar{\varphi}_P^*(\omega) \equiv -2\text{Im}[C_{PP}^R(0, \omega)] = i(C_{PP}^>(0, \omega) - C_{PP}^<(0, \omega)), \quad (\text{B.10})$$

que lleva a

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_P^*(\omega) &= \int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_k \sum_{\gamma=L,R} \Gamma_\gamma(\omega'_n) |G_{lP,l\gamma}^R(-n, \omega'_n)|^2 \\ &\quad \times \left\{ \left[f_\gamma(\omega'_n) - f_P(\omega' + \omega) \right] \Gamma_P(\omega' + \omega) - \left[f_\gamma(\omega'_n) - f_P(\omega' - \omega) \right] \Gamma_P(\omega' - \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Si además se considera la aproximación de *wide band* a través de una densidad de estados constante en la punta de prueba se llega a las expresiones dadas en las Ecs. (5.25) y (5.26).

Agradecimientos

Quisiera agradecer. . .

a Gustavo por haberme guiado a lo largo de estos años, por su apoyo y dedicación.

a Lili por sus innumerables aportes y por sugerir permanentemente problemas interesantes para estudiar.

al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires y a todos sus miembros por crear un ambiente de trabajo propicio para el desarrollo de mi investigación.

al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas por financiar mis estudios.

a mis padres por su eterno apoyo. A mis amigos de toda la vida. A mis amigos y compañeros de la facultad.

en especial a Nini por estar siempre a mi lado.

Lista de Trabajos Publicados

Los estudios que componen los capítulos de esta tesis dieron origen a las siguientes publicaciones:

- A. Caso, L. Arrachea, G. S. Lozano, *Defining the effective temperature of a quantum driven system from current-current correlation functions*, The European Physical Journal B **85**, 266 (2012).
- A. Caso, L. Arrachea, G. S. Lozano, *Relation between local temperature gradients and the direction of heat flow in quantum driven systems*, Physica B: Condensed Matter **407**, 3172-3174 (2012).
- A. Caso, L. Arrachea, G. S. Lozano, *Local temperatures and heat flow in quantum driven systems*, Physical Review B **83**, 165419 (2011).
- A. Caso, L. Arrachea, G. S. Lozano, *Local and effective temperatures of quantum driven systems*, Physical Review B **81**, 041301(R) (2010).

Seleccionado para el *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology* **21**, Issue 3 (2010).

Bibliografía

- [1] L. F. Cugliandolo and J. Kurchan, Phys. Rev. Lett. **71**, 173 (1993).
- [2] L. F. Cugliandolo and J. Kurchan, Philos. Mag. B **71**, 501 (1995).
- [3] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, and L. Peliti, Phys. Rev E **55**, 3898 (1997).
- [4] L. F. Cugliandolo and J. Kurchan, Physica A **263**, 242 (1999).
- [5] H. Makse and J. Kurchan, Nature (London) **415**, 614 (2002).
- [6] A. B. Kolton, R. Exartier, L. F. Cugliandolo, D. Dominguez, and N. Gronbech-Jensen, Phys. Rev. Lett. **89**, 227001 (2002).
- [7] F. Zamponi, G. Ruocco, and L. Angelani, Phys. Rev. E **71**, 020101(R) (2005).
- [8] L. Berthier and J.-L. Barrat, Phys. Rev. Lett. **89**, 95702 (2002).
- [9] D. Segal, D. R. Reichman, and Andrew J. Millis, Phys. Rev. B **76**, 195316 (2007).
- [10] R. A. Duine, Phys. Rev. B **77**, 014409 (2008).
- [11] C. Aron, G. Biroli, and L. F. Cugliandolo, Phys. Rev. Lett. **102**, 050404 (2009).
- [12] L. F. Cugliandolo and G. S. Lozano, Phys. Rev. Lett. **80**, 4979 (1998).
- [13] L. F. Cugliandolo and G. S. Lozano, Phys. Rev. B **59**, 915 (1999).
- [14] L. Arrachea and L. F. Cugliandolo, Europhys. Lett. **70**, 642 (2005).
- [15] L. W. Molenkamp, Th. Gravier, H. van Houten, O. J. A. Buijk, M. A. A. Mabe-soone and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. **68**, 3765 (1992).

-
- [16] L. Arrachea, M. Moskalets, and L. Martin-Moreno, Phys. Rev. B **75**, 245420 (2007).
- [17] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **80**, 081302 (2009).
- [18] F. Giazotto, T. T. Heikkilä, A. Luukanen, A. M. Savin and J. P. Pekola, Rev. Mod. Phys. **78**, 217 (2006).
- [19] J. P. Pekola and F. W. J. Hekking, Phys. Rev. Lett. **98**, 210604 (2007).
- [20] Y. Dubi and M. Di Ventra, Nano Lett. **9**, 97 (2009);
- [21] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar and A. Zettl, Science **314**, 1121 (2006).
- [22] A. Dhar, Adv. in Phys. **57**, 457 (2008).
- [23] D. Segal, Phys. Rev. Lett **101**, 260601 (2008).
- [24] C. Chamon, E. Mucciolo, L. Arrachea and R. Capaz, Phys. Rev. Lett. **106**, 135504 (2011).
- [25] T. Ojanen and A-P Jauho, Phys. Rev. Lett. **100**, 155902 (2008).
- [26] L. J. Geerligs, V. F. Anderegg, P. A. M. Holweg, J. E. Mooij, H. Pothier, D. Esteve, C. Urbina, and M. H. Devoret, Phys. Rev. Lett. **64**, 2691 (1990).
- [27] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman and A. C. Gossard, Science **283**, 1905 (1999).
- [28] M. Switkes, *Decoherence and Adiabatic Transport in Semiconductor Quantum Dots*, PhD Thesis, 1999.
- [29] S. K. Watson, R. M. Potok, C. M. Marcus, and V. Umansky, Phys. Rev. Lett. **91**, 258301 (2003).
- [30] M. D. Blumenthal, B. Kaestner, L. Li, S. Giblin, T. J. B. M. Hanssen, M. Pepper, D. Anderson, G. Jones, and D. A. Ritchie, Nat. Phys. **3**, 343 (2007).
- [31] P.W. Brouwer, Phys. Rev. B **58**, R10135 (1998);

-
- [32] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **66**, 035306 (2002).
- [33] L. Arrachea, Phys. Rev. B **72**, 125349 (2005);
- [34] L. Arrachea, Phys. Rev. B **75**, 035319 (2007);
- [35] L. Arrachea and M. Moskalets, Phys. Rev. B **74**, 245322 (2006).
- [36] Y. V. Nazarov and Y. M. Blanter, *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [37] D. J. Thouless, Phys. Rev. B **27**, 6083 (1983).
- [38] B. Spivak, F. Zhou, and M. T. Beal Monod, Phys. Rev. B **51**, 13226 (1995).
- [39] F. Zhou, B. Spivak, and B. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **82**, 608 (1999).
- [40] L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, Benjamin, New York, 1962.
- [41] L. V. Keldysh, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1515 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965)].
- [42] J. Schwinger, J. Math. Phys. **2**, 407 (1961).
- [43] P. M. Bakshi and K. T. Mahanthappa, J. Math. Phys. **4**, 1 (1963).
- [44] P. M. Bakshi and K. T. Mahanthappa, J. Math. Phys. **4**, 12 (1963).
- [45] H. Pastawski, Phys. Rev. B **44**, 6329 (1991).
- [46] H. Pastawski, Phys. Rev. B **46**, 4053 (1992).
- [47] J. Rammer and H. Smith, Rev. of Mod. Phys. **58**, 323-359 (1986).
- [48] A. P. Jauho, N. Wingreen, and Y. Meir, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).
- [49] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer, Berlin, 2008. pp 63-74.

-
- [50] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2000.
- [51] R. P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 749 (1949).
- [52] R. P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 769 (1949).
- [53] T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. **14**, 351 (1955).
- [54] S. Fujita, J. Math. Phys. **6**, 1877 (1965).
- [55] S. Fujita, Phys. Rev. A **4**, 1114 (1971).
- [56] A. G. Hall, J. Phys. A **8**, 214 (1975).
- [57] Yu. A. Kukharev and S. G. Tikhodeev, Zh. Eksp. Teor. Fiz **83**, 1444 (1982) [Sov. Phys. JETP **56**, 831 (1982)].
- [58] R. W. Landauer, IBM J. rev. Dev. **1**, 233 (1957).
- [59] M. Buttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [60] H. L. Engquist and P. W. Anderson, Phys. Rev. B **24**, 1151 (1981).
- [61] A. Caso, L. Arrachea, and G. S. Lozano, Phys. Rev. B **81**, 041301(R) (2010).
- [62] A. Caso, L. Arrachea, and G. S. Lozano, Phys. Rev. B **83**, 165419 (2011).
- [63] T. Gramspacher and M. Büttiker, Phys. Rev. B **56**, 13026 (1997).
- [64] L. Arrachea, C. Naón and M. Salvay, Phys. Rev. B **77**, 233105 (2008).
- [65] F. Foieri, L. Arrachea, and M. J. Sanchez Phys. Rev. B **79**, 085430 (2009);
- [66] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia, 1976.
- [67] M. P. Marder, *Condensed Matter Physics*, Wiley, New York, 2000.
- [68] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **12**, 570 (1957).
- [69] A. Einstein, Ann. Phys. Lpz. **17**, 549 (1905).

-
- [70] J. B. Johnson, Phys. Rev. **32**, 97 (1928).
- [71] H. Nyquist, Phys. Rev. **32**, 110 (1928).
- [72] R. Kubo, Rep. Prog. Phys. **29**, 255 (1966).
- [73] M. Rey, M. Strass, S. Kohler, P. Hänggi, and F. Sols, Phys. Rev. B **76** 085337 (2007).
- [74] B. Wang and J. Wang, Phys. Rev. B **66**: 125310 (2002).
- [75] P. Samuelsson and M. Büttiker, Phys. Rev. B **73**, 041305(R) (2006).
- [76] A. Andreev and A. Kamenev, Phys. Rev. Lett. **85**, 1294-1297 (2000).
- [77] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **65**, 2901 (1990).
- [78] M. Büttiker, Phys. Rev. B **46**, 12485 (1992).
- [79] Ya. M. Blanter and M. Büttiker, Phys. Rep. **336**, 1-166 (2000).
- [80] Th. Martin, in *Nanophysics: Coherence and Transport*, les Houches Session LXX-XI, edited by H. Bouchiat *et al.* (Elsevier, 2005), pp. 283-359.
- [81] M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **70**, 245305 (2004).
- [82] D. S. Fisher and P. A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [83] A. Caso, L. Arrachea, and G. S. Lozano, Eur. Phys. J. B **85**, 266 (2012).
- [84] A. Caso, L. Arrachea, and G. S. Lozano, Phys. B: Cond. Mat. **407**, 3172 (2012).