



**Universitat de les
Illes Balears**

Facultat de Ciències

Memòria del Treball de Fi de Grau

Transporte termoeléctrico en puntos cuánticos acoplados a contactos normales y superconductores

Nicolás Baleani-Springolo Serra

Grau de Física

Any acadèmic 2016-17

DNI de l'alumne: 43203047P

Treball tutelat per Rosa López Gonzalo
Departament de Física

S'autoritza la Universitat a incloure aquest treball en el Repositori Institucional per a la seva consulta en accés obert i difusió en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació	Autor		Tutor	
	Sí	No	Sí	No
	X		X	

Paraules clau del treball:

Transporte, superconductor, punto cuántico, densidad de estados

Índice

1. Descripción general.....	1
2. Introducción	2
2.1 Estadística de Fermi-Dirac	2
2.2 El estado superconductor	3
2.3 Punto cuántico	4
2.4 Marco de trabajo.....	6
3. Formalismo.....	7
3.1 Corrientes de carga y calor.....	9
4. Transporte en sistemas metálicos e híbridos	10
4.1 Sistema Metal-Punto cuántico-Metal	10
4.1.1 Característica I-V	12
4.1.2 Característica I- ϵ_d	15
4.1.3 Aplicación de un gradiente térmico	16
4.2 Sistema Superconductor-Punto cuántico-Metal	19
4.2.1 Característica I-V	20
4.2.2 Característica I- ϵ_d	21
4.2.3 I- Δ	23
5. Conclusiones	24
Apéndice.....	25
Bibliografía.....	26

1. Descripción general

En éste trabajo vamos a investigar el transporte en un sistema formado por un punto cuántico, que está acoplado a barreras túnel y estas a su vez a contactos metálicos y o superconductores.

Estudiaremos concretamente, el transporte cuántico de carga y calor a través de éstos sistemas, calculando la corriente de carga I , y la corriente de calor J , al aplicar una diferencia de potencial entre ambos contactos de valor V , o una diferencia de temperatura θ . Para una realización numérica y conceptual más sencilla, se realizarán suposiciones y se impondrán ciertas condiciones que explicaremos antes de entrar a hacer los cálculos.

2. Introducción

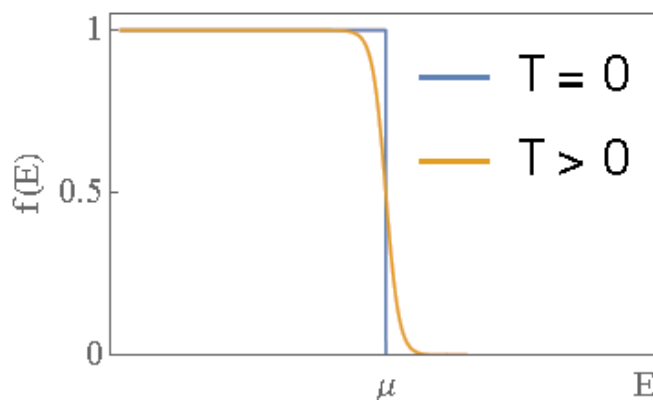
2.1 Estadística de Fermi-Dirac

En mecánica cuántica, existen dos posibles maneras en las cuales pueden distribuirse un sistema de partículas indistinguibles en un conjunto de estados energéticos, una de ellas es la siguiendo la estadística de Bose-Einstein, y la otra es siguiendo la estadística de Fermi-Dirac.

Ésta última, describe correctamente el comportamiento de aquellas partículas que obedecen el restrictivo principio de exclusión de Pauli. Esas partículas tienen valores semienteros de espín, son los denominados fermiones, dentro de los cuales se encuentran los electrones.

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/k_B T}} \in [0,1]$$

$f(E)$ indica la probabilidad de tener un fermión (concretamente un electrón) en el estado con energía E . En el cero absoluto, un electrón tendrá probabilidad nula de encontrarse con una energía superior al nivel de Fermi μ ($T = 0$) $\equiv E_F$, y probabilidad uno, de encontrarse con una energía inferior. Al elevar la temperatura, los electrones más cercanos a la zona de transición, adquirirán energía térmica suficiente para poder ocupar estados de superior energía [1].



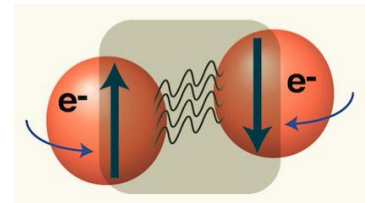
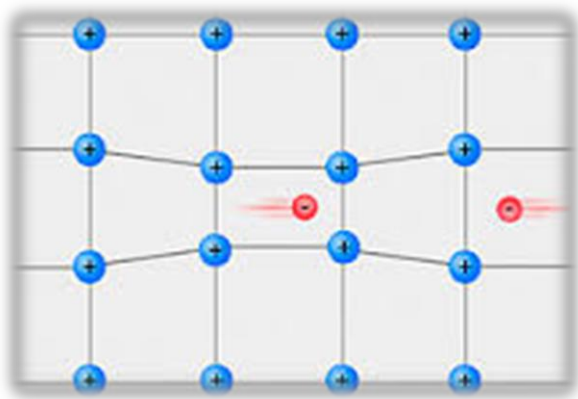
El ancho de energías para los cuales existen diferencias entre $f(E,T)$ y $f(E,T = 0)$, es del orden de la energía térmica $k_B T$.

La densidad de estados de un metal, es prácticamente constante en el rango de energías de interés, entonces, el número de electrones o equivalentemente, de estados ocupados, en función de la energía, seguirá teniendo una forma análoga a la gráfica anterior.

Antes de entrar en como se distribuyen los electrones en un material al alcanzar el estado superconductor, vamos a introducir de que se trata dicho estado.

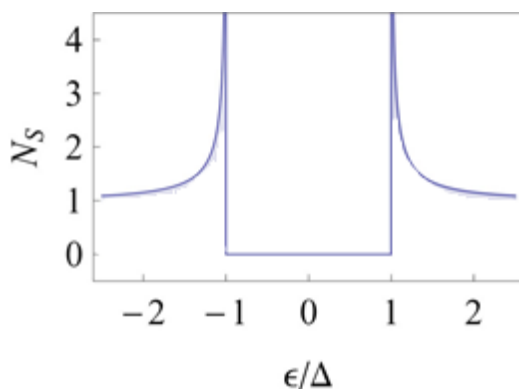
2.2 El estado superconductor

La superconductividad es un estado que presenta resistencia nula al flujo de corriente eléctrica [2], es decir, el proceso de conducción de carga se produce sin disipación de energía. Al enfriar un metal por debajo de una cierta temperatura crítica, este alcanza el estado superconductor. Las vibraciones de la red cristalina de átomos que componen el material, consiguen que la fuerza de repulsión electrostática entre los electrones, se convierta de manera efectiva en una repulsión atractiva, de tal manera que electrones de espines contrarios y momentos opuestos, se ligan en un estado llamado par de Cooper



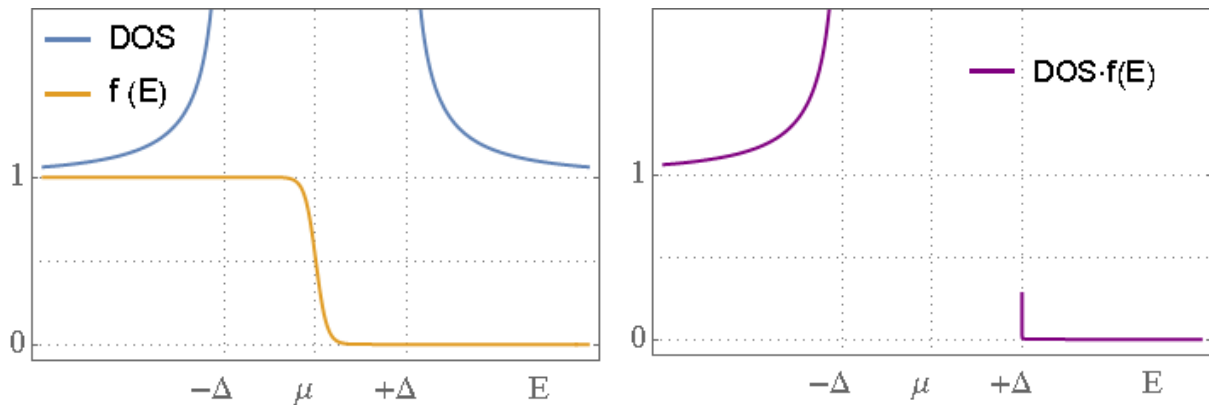
En las imágenes, vemos en la izquierda la distorsión de la red atómica que produce una atracción entre los electrones de conducción, y en la derecha, el mencionado par de Cooper

La energía de ligadura de dicho par, es lo que se denomina comúnmente *gap* del superconductor. Los pares de Cooper se comportan como bosones, que a temperaturas suficientemente bajas, condensan formando un estado cuántico coherente, es entonces cuando configuran un superconductor. Excitaciones por encima del *gap* superconductor consiguen romper los pares de Cooper y “generar” así electrones y huecos. La densidad de estados electrónica para un superconductor refleja precisamente la física anteriormente mencionada. En una región de energías comprendida dentro del *gap* superconductor, la densidad electrónica es nula y el estado fundamental corresponde a un condensado de pares de Cooper. Por encima (parte electrones) y por debajo del *gap* (parte de huecos), la densidad de estados es finita.



En la imagen se representa la forma funcional de la densidad de estados de un superconductor, cuando la descripción que se utiliza es la de campo medio o aproximación BCS[3].

A partir de la densidad de estados del superconductor, y de la vista función de distribución de Fermi-Dirac, multiplicando ambas expresiones obtenemos el número de electrones o estados ocupados según el valor de la energía para un metal, una vez alcanzado dicho estado superconductor.

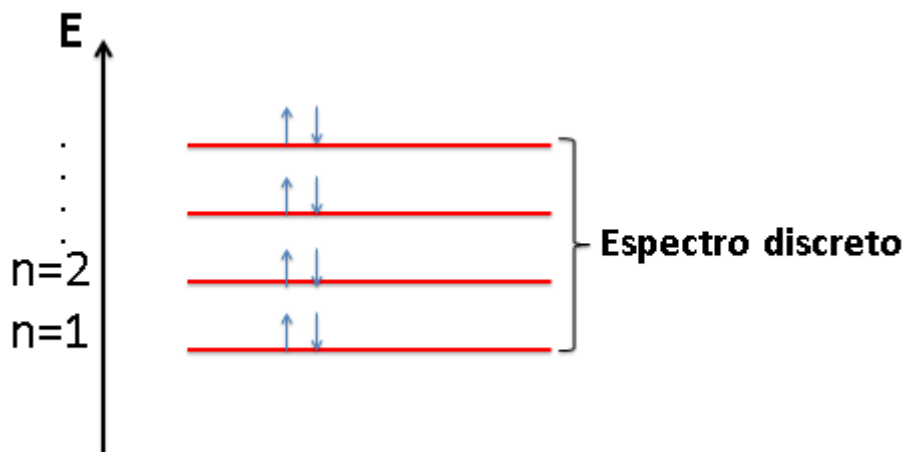


Realmente la densidad de estados, no tiende a 1, sino al valor constante de la densidad de estados del propio metal fuera del estado superconductor. Pero ese valor constante irá absorbido en un parámetro (Γ) que se introducirá más adelante, y por eso se ha tomado de tal forma.

Si nos encontramos a $T = 0K$, solo existirán estados ocupados con $E < -\Delta$, mientras que al ir aumentando la temperatura, va aumentando la posibilidad de encontrar estados ocupados más allá del gap ($E > +\Delta$), pero nunca en $E \in [-\Delta, +\Delta]$. Por el contrario aunque en la imagen no se aprecia significativamente, ese aumento, va acompañado obviamente, de una disminución de estados ocupados en $E \lesssim -\Delta$, en la misma cantidad.

2.3 Punto cuántico

El punto cuántico se trata de un sistema 0-dimensional, donde se hallan electrones confinados en las tres dimensiones espaciales. Los electrones se disponen en niveles discretos de energía, y cada nivel se llena con un máximo de dos electrones (con diferente espín).



Por esta analogía con lo que ocurre en los átomos, al punto cuántico, se le denomina también, átomo artificial. Podemos pensar en un punto cuántico como un átomo con una carga nuclear efectiva controlada por electrodos [10].

El punto cuántico lo entenderemos entonces, como una isla metálica, con un espectro discreto de energía. Los efectos de interacción de los electrones en el punto cuántico, entre ellos, y con los elementos externos a los cuales lo acoplamos, pueden ser modelados como efectos capacitativos [4,5].

Actualmente existen muchos tipos de puntos cuánticos, dependiendo del método a partir del cual se consigue el confinamiento electrónico, o el tipo de sistema en los cuales se encuentran. Distintos ejemplos de ellos son los puntos cuánticos verticales, los laterales, los novedosamente creados en nanotubos de carbono... [5]

Una consecuencia del confinamiento y del tamaño reducido de los puntos cuánticos, es la importancia de la interacción electrón-electrón dentro del mismo y la aparición de efectos de carga [5].

Nos centraremos en el transporte a través de un punto cuántico que pueda albergar un solo electrón capaz de conducir, conectado a dos reservorios electrónicos (L , R) mediante acoplamientos capacitativos (C_L, C_R), esta configuración se denomina SET (single-electron transistor).

Cogiendo esta configuración (SET), y quitando los contactos, tendremos una isla metálica con N electrones y una carga cuantizada $e \cdot N$ ($e \equiv$ carga de electrón). Al añadir los contactos permitiendo el transporte de partículas, habrá un ajuste del número de partículas en la isla metálica para minimizar la energía del circuito [11,12].

Cuando una partícula abandona o entra en la isla metálica, la carga de ésta, cambia en e , y entonces, el potencial electrostático es modificado por la energía de carga $E_C = e^2/2C$, ($C \equiv$ capacitancia total del punto cuántico) .La energía de carga será relevante si es mayor que la energía de agitación térmica $k_B T$.

Para que la carga esté bien cuantizada, es necesario que los electrones estén bien localizados, lo cual impone una condición sobre la resistencia túnel del punto cuántico R_t , que define un tiempo típico de descarga del punto cuántico $\Delta t = R_t \cdot C$. También es necesario que la incerteza en la energía ΔE , sea más pequeña que la energía de carga. Por el principio de incertidumbre de Heisenberg se tiene que satisfacer que $\Delta E \cdot \Delta t > h$, que añadiéndole las condiciones anteriores ($\Delta E < E_C$ y $\Delta t = R_t \cdot C$), nos lleva a la siguiente expresión $E_C \cdot \Delta t > h$

$$E_C \cdot \Delta t > h \rightarrow \frac{e^2}{2C} \cdot R_t C > h \rightarrow R_t > \frac{2h}{e^2} \rightarrow R_t > \frac{h}{e^2}$$

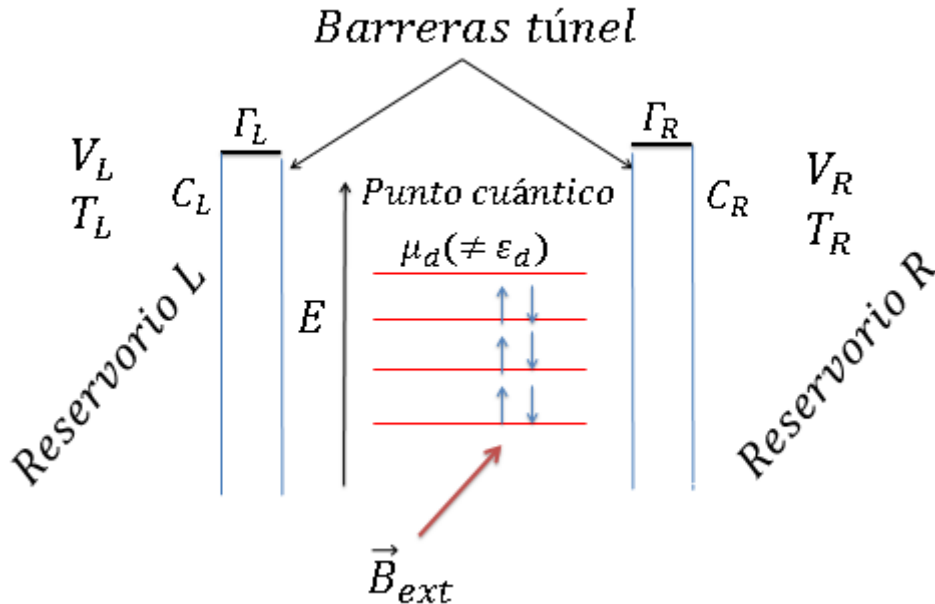
Resumiendo, los efectos de carga, serán importantes si se cumplen las siguientes condiciones:

$$\boxed{\begin{array}{l} \frac{e^2}{2C} > k_B T \\ R_t > \frac{h}{e^2} \end{array}}$$

Estas condiciones, se consiguen acoplando débilmente el punto cuántico a los reservorios, y reduciendo suficientemente el tamaño del punto cuántico. Si los efectos de carga se vuelven suficientemente notorios, el transporte puede quedar “bloqueado” y se dice entonces que el punto cuántico se halla en el régimen de bloqueo coulombiano, cuyo interés reside en que en este régimen, los electrones son transferidos uno por uno.

2.4 Marco de trabajo

El sistema que describimos durante el trabajo es el de la figura, en el que un punto cuántico está acoplado a dos reservorios (Left y Right), que serán materiales metálicos o superconductores.



Sobre este marco general, estableceremos ciertas hipótesis para facilitar el trato numérico, durante el trabajo, se exponen las limitaciones de tomar algunas de ellas. Las suposiciones y condiciones impuestas son las siguientes:

- El punto cuántico posee solo un nivel activo para la conducción.
- No consideramos el espín de los electrones, que no juega papel al no ser aplicados campos magnéticos sobre el punto cuántico.
- La repulsión electrostática entre electrones dentro del punto cuántico es tan elevada, que no puede haber dos electrones en el mismo nivel, entonces, en el punto cuántico, podrá haber disponible para el transporte, un electrón o ninguno. La ocupación del punto cuántico será 1 o 0 respectivamente. Que sea 1(\uparrow) o 1(\downarrow) es indiferente por la hipótesis anterior.
- El contacto de la izquierda (L) se encuentra a un potencial V_L , y el de la derecha (R), a un potencial V_R . La diferencia entre ambos contactos, es $V_L - V_R = V$
- Los contactos se encuentran a temperaturas T_L y T_R dónde $T_L = T_R + \theta$
- El ritmo al cuál tunelean los electrones entre el punto cuántico y los reservorios son respectivamente Γ_L y Γ_R
- Las dos barreras tienen capacitancias C_L y C_R respectivamente. El potencial electroquímico del punto cuántico viene dado por la siguiente expresión:

$$\mu_d = \epsilon_d + e \frac{C_L V_L + C_R V_R}{C_L + C_R} + \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} \quad (\text{Demostrada en el apéndice})$$

Donde el primer término es la energía del nivel no interactuante. El segundo, es debido a la interacción del electrón del nivel activo del punto cuántico con los reservorios, denominado término de polarización. Por último, el tercer término es debido a la interacción entre el electrón del nivel activo del punto cuántico con el resto de electrones del punto cuántico.

- El material que actúa de reservorio, tanto en la izquierda como en la derecha suele ser el mismo, por tanto $E_{F_L} = E_{F_R}$, por simplicidad tomamos ambos igual a 0.
- El potencial electroquímico de cada reservorio es entonces

$$\mu_i = E_{F_i} + eV_i = eV_i \quad i = L, R$$

- La distribución electrónica cada contacto viene dada por:

$$f_i(E, \mu, T) = \frac{1}{1 + e^{(E - \mu_i)/k_B T_i}} = f_i(E, V, T) \quad i = L, R$$

3. Formalismo

Vamos a adentrarnos en el formalismo que va a ser utilizado, el de la ecuación maestra, o “*Master equation*”, el cual resulta muy útil cuando el transporte de electrones se da uno por uno, como en el caso del régimen de bloqueo coulombiano. Dicho formalismo consiste en calcular las probabilidades de ocupación del punto cuántico. En la situación de un solo nivel y un solo electrón, las ocupaciones, como hemos dicho son 1 (si el nivel está ocupado) o 0 (si el nivel está desocupado). Las probabilidades de que se den estas ocupaciones las denotamos por p_1 y p_0 respectivamente [7].

Veamos ahora las probabilidades de transición:

$W_{j \leftarrow k}^i \equiv$ Probabilidad por unidad de tiempo, de que el punto cuántico estando inicialmente en el estado k , pase al estado j a través de la barrera i . Las distintas posibilidades existentes en nuestro caso son

$$\left\{ \begin{array}{l} i = L \quad \left\{ \begin{array}{l} j = 0, k = 1 \\ k = 1, j = 0 \end{array} \right. \\ i = R \quad \left\{ \begin{array}{l} j = 0, k = 1 \\ k = 1, j = 0 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

	Punto cuántico inicialmente	pasa a estar	transición realizada a través de la barrera
$W_{0 \leftarrow 1}^L$	ocupado	desocupado	izquierda
$W_{1 \leftarrow 0}^L$	desocupado	ocupado	izquierda
$W_{0 \leftarrow 1}^R$	ocupado	desocupado	derecha
$W_{1 \leftarrow 0}^R$	desocupado	ocupado	derecha

Calculemos ahora como cambian p_1 y p_0

$$\begin{aligned}\frac{dp_1}{dt} &= (W_{1\leftarrow 0}^L + W_{1\leftarrow 0}^R) \cdot p_0 - (W_{0\leftarrow 1}^L + W_{0\leftarrow 1}^R) \cdot p_1 \\ \frac{dp_0}{dt} &= (W_{0\leftarrow 1}^L + W_{0\leftarrow 1}^R) \cdot p_1 - (W_{1\leftarrow 0}^L + W_{1\leftarrow 0}^R) \cdot p_0\end{aligned}$$

En el límite estacionario:

$$\frac{dp_1}{dt} = \frac{dp_0}{dt} = 0$$

Lo que nos conduce a estas ecuaciones (que son la misma):

$$\begin{aligned}(W_{0\leftarrow 1}^L + W_{0\leftarrow 1}^R)p_1 - (W_{1\leftarrow 0}^L + W_{1\leftarrow 0}^R)p_0 &= 0 \\ (W_{1\leftarrow 0}^L + W_{1\leftarrow 0}^R)p_0 - (W_{0\leftarrow 1}^L + W_{0\leftarrow 1}^R)p_1 &= 0\end{aligned}$$

Introducimos esta notación* a fin de agilizar la lectura:

$$\begin{aligned}W_{0\leftarrow 1}^L + W_{0\leftarrow 1}^R &\equiv W_{0\leftarrow 1} \\ W_{1\leftarrow 0}^L + W_{1\leftarrow 0}^R &\equiv W_{1\leftarrow 0} \\ W_{1\leftarrow 0} + W_{0\leftarrow 1} &\equiv W\end{aligned}$$

Con la notación* abreviada, la condición de estado estacionario es la siguiente:

$$W_{0\leftarrow 1}p_1 - W_{1\leftarrow 0}p_0 = 0$$

Además, como el nivel está siempre ocupado o desocupado se cumple que:

$$p_1 + p_0 = 1 \quad \forall t$$

Tenemos entonces, las siguientes ecuaciones a resolver

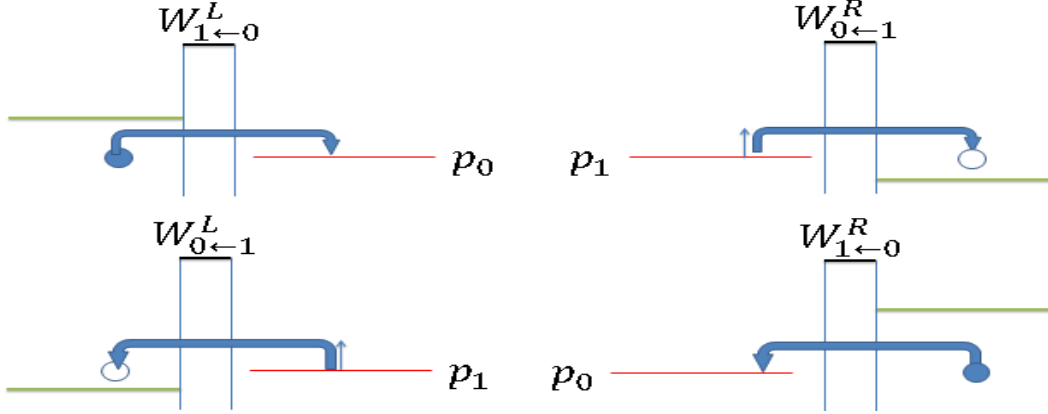
$$\begin{cases} W_{0\leftarrow 1}p_1 - W_{1\leftarrow 0}p_0 = 0 \\ p_1 + p_0 = 1 \end{cases}$$

Cuyas soluciones son:

$$\begin{aligned}p_1 &= \frac{W_{1\leftarrow 0}}{W_{0\leftarrow 1} + W_{1\leftarrow 0}} = \frac{W_{1\leftarrow 0}}{W} \\ p_0 &= \frac{W_{0\leftarrow 1}}{W_{0\leftarrow 1} + W_{1\leftarrow 0}} = \frac{W_{0\leftarrow 1}}{W}\end{aligned}$$

3.1 Corrientes de carga y calor

Ya conocidas estas probabilidades de ocupación podemos calcular las corrientes de carga y calor, de manera general.



Criterio de signos: I_L e $I_R > 0$ si el electrón entra en el punto cuántico, mientras que I_L e $I_R < 0$, si sale del mismo.

Notar que $I_L = -I_R (\equiv I)$ ya que la carga no se acumula en el punto cuántico y la corriente que fluye, ha de ser igual en ambas barreras.

$$I_L = I = e \cdot (W_{1\leftarrow 0}^L p_0 - W_{0\leftarrow 1}^L p_1)$$

Que junto con las expresiones obtenidas para p_0 y p_1 llegamos a:

$$I = e \cdot \frac{W_{1\leftarrow 0}^L W_{0\leftarrow 1}^R - W_{0\leftarrow 1}^L W_{1\leftarrow 0}^R}{W}$$

Para la corriente de energía, solo hay que modificar la expresión de la corriente para tener en cuenta que ahora se transporta energía en vez de carga eléctrica [9]. Ahora la corriente no es igual por ambas barreras, sino que existe un cambio de corriente de energía o calor que se queda en el punto cuántico. Se puede decir entonces, que el punto cuántico actúa como un elemento disipativo de energía.

$$J_L = (\mu_L - \mu_d) \cdot (W_{1\leftarrow 0}^L p_0 - W_{0\leftarrow 1}^L p_1) = \frac{(\mu_L - \mu_d)}{e} I_L = + \frac{(\mu_L - \mu_d)}{e} I$$

$$J_R = (\mu_R - \mu_d) \cdot (W_{0\leftarrow 1}^R p_1 - W_{1\leftarrow 0}^R p_0) = \frac{(\mu_R - \mu_d)}{e} (-I_R) = \frac{(\mu_R - \mu_d)}{e} I$$

$$J_L - J_R = + \frac{(\mu_L - \mu_d)}{e} I - \frac{(\mu_R - \mu_d)}{e} I = \frac{(\mu_L - \mu_R)}{e} I = \frac{(eV_L - eV_R)}{e} I = V \cdot I$$

$$J_L - J_R = I \cdot V \leftarrow \text{Efecto Joule}$$

En este caso los dos reservorios son metales, y tenemos los siguientes resultados para las probabilidades de transición:

Sistema METAL-PC-METAL
$W_{0 \leftarrow 1}^L = \Gamma_L(1 - f_L(\mu_d, V_L, T_L))$
$W_{1 \leftarrow 0}^L = \Gamma_L f_L(\mu_d, V_L, T_L)$
$W_{0 \leftarrow 1}^R = \Gamma_R(1 - f_R(\mu_d, V_R, T_R))$
$W_{1 \leftarrow 0}^R = \Gamma_R f_R(\mu_d, V_R, T_R)$

$f_i(\mu_d, V_i, T_i) \equiv$ Probabilidad que en el reservorio i , a un potencial V_i y temperatura T_i haya un electrón con energía μ_d

$1 - f_i(\mu_d, V_i, T_i) \equiv$ Probabilidad que en el reservorio i , con potencial V_i y temperatura T_i no haya un electrón con energía μ_d , o equivalentemente, si haya un hueco con energía μ_d ,

Aplicando estas particularidades a las definiciones generales obtenidas para la corriente de carga y energía (en 3.1) obtenemos los siguientes resultados:

$$I = e \cdot \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} (f_L(\mu_d, V_L, T_L) - f_R(\mu_d, V_R, T_R))$$

$$J_L = \frac{(\mu_L - \mu_d)}{e} I_L = \frac{(\mu_L - \mu_d)}{e} I$$

$$J_R = \frac{(\mu_R - \mu_d)}{e} (-I_R) = \frac{(\mu_R - \mu_d)}{e} I$$

No confundir ε_d con μ_d , el primero es el nivel de energía del nivel sin interacción. Al considerar la interacción, μ_d varía según la expresión demostrada, mientras que ε_d queda fija. Este concepto es muy importante de cara a la comprensión de los siguientes apartados. Nótese que $\mu_d = \mu_d(V)$, ya que al cambiar V , μ_d variará para minimizar la energía del sistema.

Por consiguiente, al cambiar el voltaje cambiamos tanto μ_R y μ_L , como μ_d

Calcularemos ahora las cantidades de las que dependen las magnitudes que queremos medir, la diferencia entre el potencial electroquímico del punto cuántico con cada uno de los reservorios.

$$\mu_L - \mu_d = eV_L - \varepsilon_d - e \frac{C_L \cdot V_L + C_R \cdot V_R}{C_L + C_R} - \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} =$$

$$= eV_L - \varepsilon_d - e \frac{V_L + V_R}{2} - 6.25h\Gamma = \frac{eV}{2} - \varepsilon_d - 6.25h\Gamma$$

$$\mu_R - \mu_d = eV_R - \varepsilon_d - e \frac{C_L \cdot V_L + C_R \cdot V_R}{C_L + C_R} - \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} =$$

$$= eV_R - \varepsilon_d - e \frac{V_L + V_R}{2} - 6.25h\Gamma = -\frac{eV}{2} - \varepsilon_d - 6.25h\Gamma$$

$$I = \frac{e \cdot \Gamma}{2} (f_L(\mu_d, V_L, T_L) - f_R(\mu_d, V_R, T_R)) \in \left(-\frac{e \cdot \Gamma}{2}, +\frac{e \cdot \Gamma}{2} \right)$$

$$J_L = \frac{\Gamma}{2} \left(\pm \frac{eV}{2} - \varepsilon_d - 6.25h\Gamma \right) (f_L(\mu_d, V_L, T_L) - f_R(\mu_d, V_R, T_R))$$

$$\text{Con } f_i(\mu_d, V_i, T_i) = \frac{1}{1 + e^{\left(\pm \frac{eV}{2} - \varepsilon_d - 6.25h\Gamma \right) / k_B T_i}} \quad i = L(+), R(-)$$

4.1.1 Característica I-V

Vamos a estudiar la característica I-V al variar la posición del nivel del punto cuantico (ϵ_d) Consideramos una temperatura tal, que la energía térmica asociada es de $0.1h\Gamma$.

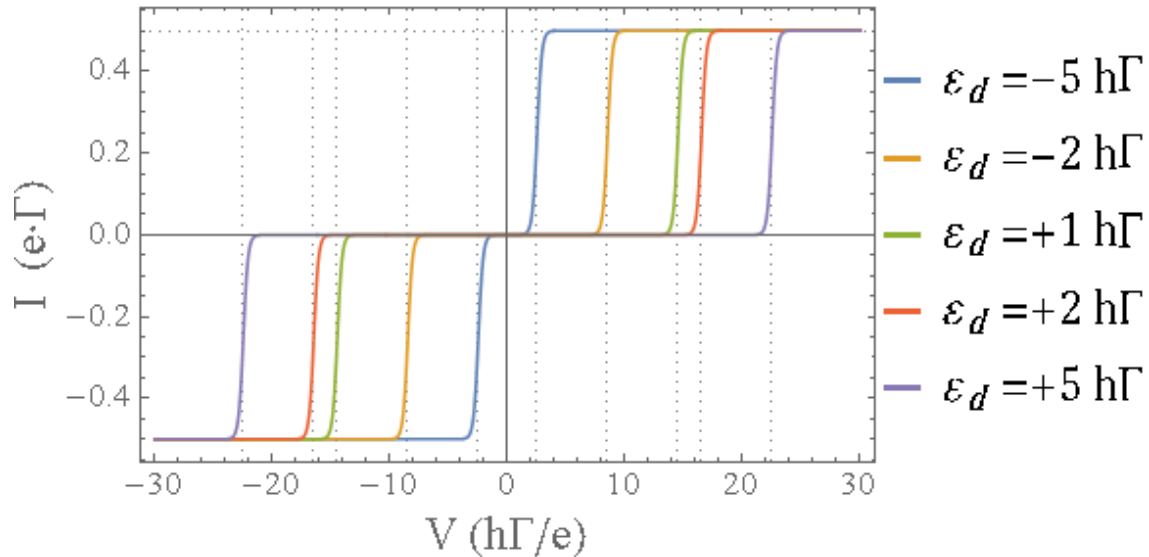


Figura 1. Corriente de carga (I) en función del voltaje (V), para diferentes valores ϵ_d .
Parámetros $k_B T = 0.1h\Gamma$, $\theta = 0$

Inicialmente, comprobamos que el signo de la intensidad de corriente coincide al del voltaje aplicado V (recordemos $V = V_L - V_R$), de acuerdo con el criterio de signos establecido en el apartado 3.1, ya que el transporte será de izquierda a derecha, $I > 0$, si $V_L > V_R$, y será de derecha a izquierda, $I < 0$, si $V_L < V_R$.

Al tener una baja energía térmica, ambos reservorios, en este caso metales, presentan una distribución electrónica muy abrupta, donde se pasa de una región donde existen estados energéticos (hasta el potencial electroquímico del reservorio) con altísima probabilidad de estar ocupados, a otra región, donde los estados con energía mayor tienen prácticamente probabilidad nula de estar ocupados.

Este comportamiento abrupto de las distribuciones electrónicas, es el causante de la conducta de la gráfica, donde pasamos inmediatamente de tener una intensidad de corriente nula, a tenerla máxima (más abrupta será la transición cuanto más baja sea la temperatura)

*Si $V > 0$, para que haya transporte se tiene que cumplir $\rightarrow \mu_R \leq \mu_d \leq \mu_L$ (Para $T = 0$). Como ya comentaremos, a $T \neq 0$ esta condición se relaja.

$$eV_R \leq \epsilon_d + e \frac{C_L \cdot V_L + C_R \cdot V_R}{C_L + C_R} + \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} \leq eV_L$$

$$eV_R \leq \epsilon_d + e \frac{V_L + V_R}{2} + 6.25h\Gamma \leq eV_L$$

$$(ya\ que\ C_L = C_R = C \sim \frac{1}{25} \frac{e^2}{h\Gamma} \rightarrow \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} = E_C = 6.25h\Gamma)$$

Tratando las dos desigualdades por separado

$$\begin{aligned}
 1) \quad eV_R &\leq \varepsilon_d + e \frac{V_R + V_L}{2} + 6.25h\Gamma \\
 \rightarrow eV_R &\leq +e \frac{2V_R + V}{2} + 6.25h\Gamma \rightarrow -\frac{eV}{2} \leq \varepsilon_d + 6.25h\Gamma \\
 2) \quad \varepsilon_d + e \frac{V_R + V_L}{2} + 6.25h\Gamma &\leq eV_L \\
 \rightarrow \varepsilon_d + e \frac{2V_L - V}{2} + 6.25h\Gamma &\leq eV_L \rightarrow \varepsilon_d + 6.25h\Gamma \leq +\frac{eV}{2}
 \end{aligned}$$

Finalmente, el transporte queda restringido a aquella región en la que se cumple:

$$-\frac{eV}{2} \leq \varepsilon_d + 6.25h\Gamma \leq +\frac{eV}{2}$$

O equivalentemente: $|V| \geq \frac{2}{e}(\varepsilon_d + 6.25h\Gamma)$

Mostrando que, nuestra descripción del sistema, no depende de los potenciales en cuestión (V_L, V_R) si no de la diferencia entre ambos (V), que es lo que se conoce como una descripción invariante Gauge.

La ecuación anterior muestra que, al aumentar el nivel del punto cuántico, es necesario aplicar un voltaje más alto para apreciar corriente de carga, debido a que nuestro nivel efectivo para la conducción se sitúa en un lugar donde ni a izquierda ni a derecha hay una probabilidad apreciable de encontrar un electrón o estado ocupado. La ecuación es estrictamente válida a $T = 0K$, al aumentar la temperatura se va relajando la condición ya que en los reservorios, no tenemos ese cambio abrupto entre una región donde todos los estados están ocupados y otra donde no hay ninguno ocupado, sino que tenemos una suavización de la función de distribución de Fermi-Dirac, y “surgen” nuevos electrones en un reservorio por encima de su potencial químico hábiles para conducir, y por otro lado, huecos, o estados electrónicos vacíos en el otro reservorio, por debajo de su potencial químico.

*Se llega obviamente al mismo resultado, suponiendo $V < 0$, con el que la condición de transporte pasa a ser $\mu_L \leq \mu_d \leq \mu_R$.

Comprobamos ahora, que los resultados extraídos de forma analítica, coinciden con los resultados de la gráfica:

ε_d	Existe transporte para	Ancho de la ventana de transporte
$-5h\Gamma$	$V \in (-2.5, 2.5)h\Gamma/e$	$5 h\Gamma/e$
$-2h\Gamma$	$V \in (-8.5, 8.5)h\Gamma/e$	$17 h\Gamma/e$
$+1h\Gamma$	$V \in (-14.5, 14.5)h\Gamma/e$	$29 h\Gamma/e$
$+2h\Gamma$	$V \in (-16.5, 16.5)h\Gamma/e$	$33 h\Gamma/e$
$+5h\Gamma$	$V \in (-22.5, 22.5)h\Gamma/e$	$45 h\Gamma/e$

Si aumentamos la temperatura en exceso, podemos llegar a violar una de las condiciones de cuantización de carga, dejar de tener el electrón bien localizado y pasar al régimen lineal, más conocido como la clásica ley de Ohm.

La condición mencionada era $k_B T < e^2/2C$, por tanto al llegar a una temperatura tal que la energía térmica $k_B T \sim e^2/2C$, estaremos llegando a ese cambio de marco, el valor de esa energía térmica sería del orden de $12.5 h\Gamma$

$$\frac{e^2}{2\left(\frac{1}{25} h\Gamma\right)} \sim 12.5 h\Gamma$$

Apreciamos en la gráfica siguiente ($I-V$ para $k_B T = 12.5 h\Gamma$), el abandono del régimen bloqueo coulombiano en el que la carga pasa de una en una por el punto cuántico, a la clásica ley de Ohm $I \propto V$. La pendiente de la recta es R^{-1} , independientemente del nivel ϵ_d . A mayor temperatura mayor solapamiento entre las rectas.

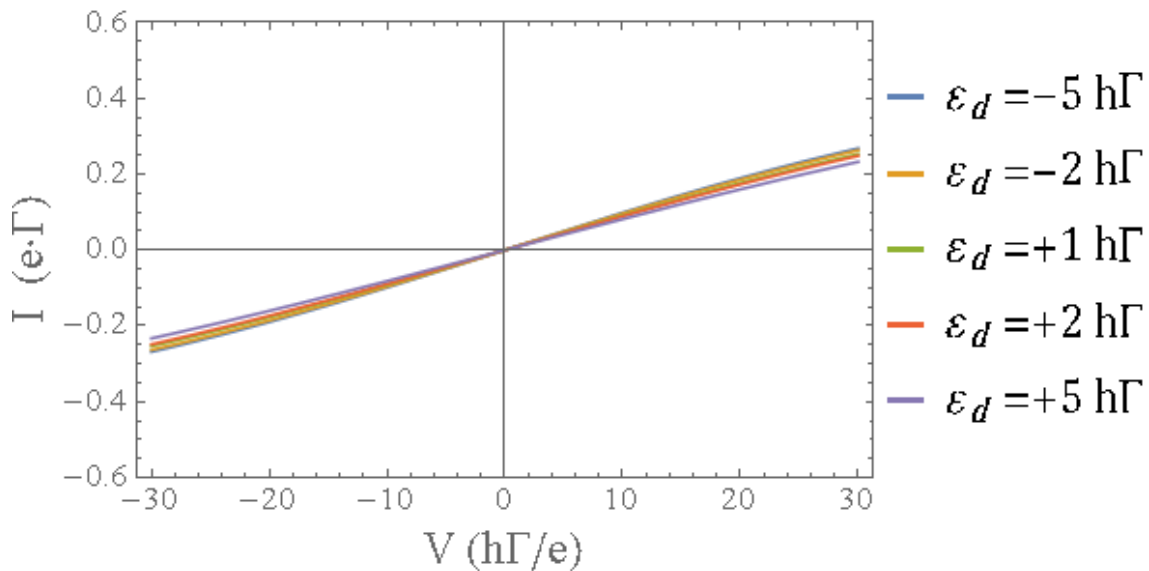


Figura 2. Corriente de carga (I) en función del voltaje (V), para diferentes valores ϵ_d . Parámetros $k_B T = 12.5 h\Gamma$, $\theta = 0$

$I \approx R^{-1}V$ ($\exists I \neq 0 \forall V \neq 0$) → Diferencia principal con el caso anterior. Esta intensidad llega a saturar en $I = \pm 0.5 e\Gamma$, por tanto la ley de Ohm se cumple solo hasta llegar a un cierto valor de V . Ya no tenemos cuantización de la carga, y podemos tratar el caso clásicamente con la conocida ley de Ohm.

4.1.2 Característica $I - \varepsilon_d$

Representamos la corriente de carga en frente del nivel del punto cuántico, con una diferencia de voltaje fija entre ambos contactos de $+2 h\Gamma/e$, a diferentes temperaturas.

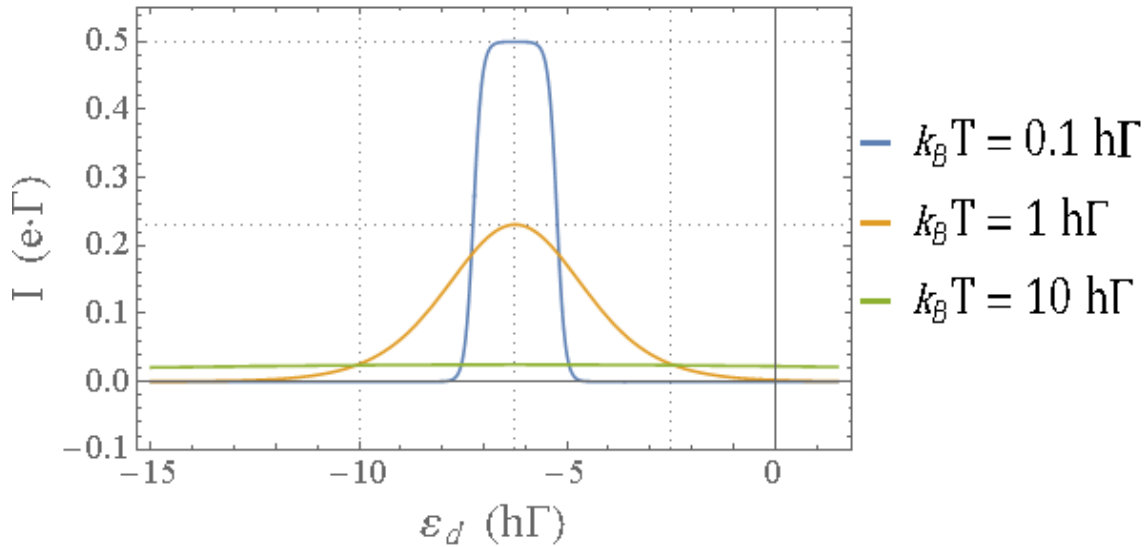


Figura 3. Corriente de carga (I) en función del nivel del punto cuántico ε_d para diferentes valores de la temperatura. Parámetros $V = +2h\Gamma/e$, $\theta = 0$

Al aumentar la temperatura, los electrones en los contactos tienen un margen de movimiento mucho mayor, debido a la energía térmica adquirida. Existe posibilidad de transporte a muchas más energías del punto cuántico (se ha relajado la condición del apartado anterior, $\mu_R \leq \mu_d \leq \mu_L$)

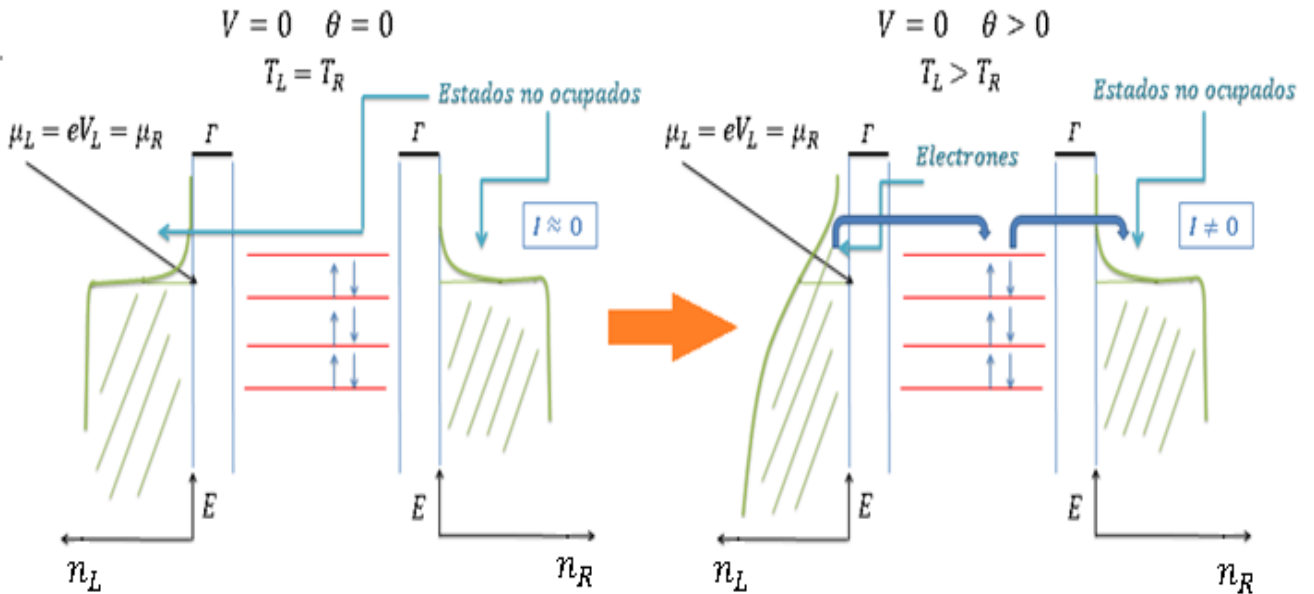
Si $V > 0$ habrá valores de μ_d por debajo de μ_R y por encima de μ_L y viceversa si $V < 0$), para los cuales haya transporte.

Esta probabilidad se reparte un intervalo de energías mucho más ancho, es por eso que la intensidad máxima conseguida, va disminuyendo en valor al aumentar la temperatura.

Para obtener el valor de ε_d que maximiza la corriente de carga que atraviesa el punto cuántico, derivamos e igualamos a cero la expresión de I . Éste valor es $\varepsilon_d = -6.25h\Gamma$.

4.1.3 Aplicación de un gradiente térmico

A continuación se muestra como incluso ausencia de voltaje, un gradiente térmico aplicado entre ambos contactos puede dar lugar a corriente [8].



En general, la corriente de energía que atraviesa la barrera izquierda no es igual a la que pasa que la derecha, como ocurre con la corriente de carga. De hecho, la diferencia entre ambas energías calienta nuestro sistema, por efecto Joule.

Para la corriente de calor, la descripción del sistema, no es invariante gauge, la dependencia no será con la diferencia de temperaturas entre los contactos θ , sino de las temperaturas de cada reservorio en concreto, ya que éstas, dictaminarán las distribuciones electrónicas

Vamos a considerar el contacto derecho a una temperatura tal que $k_B T_R = 0.1 h\Gamma$, y el izquierdo una tal que $k_B T_L = 1.1 h\Gamma$.

$$k_B \theta = k_B (T_L - T_R) = h\Gamma$$

Tomamos ambos contactos al potencial que sea, pero el mismo, de forma que $V = 0$. Nótese que al considerar $V = 0 \rightarrow J_L = J_R$ ya que, el punto cuántico no disipará energía (recordar $J_L - J_R = I \cdot V$). Además si $V = 0 \rightarrow \mu_d = \varepsilon_d + E_C$

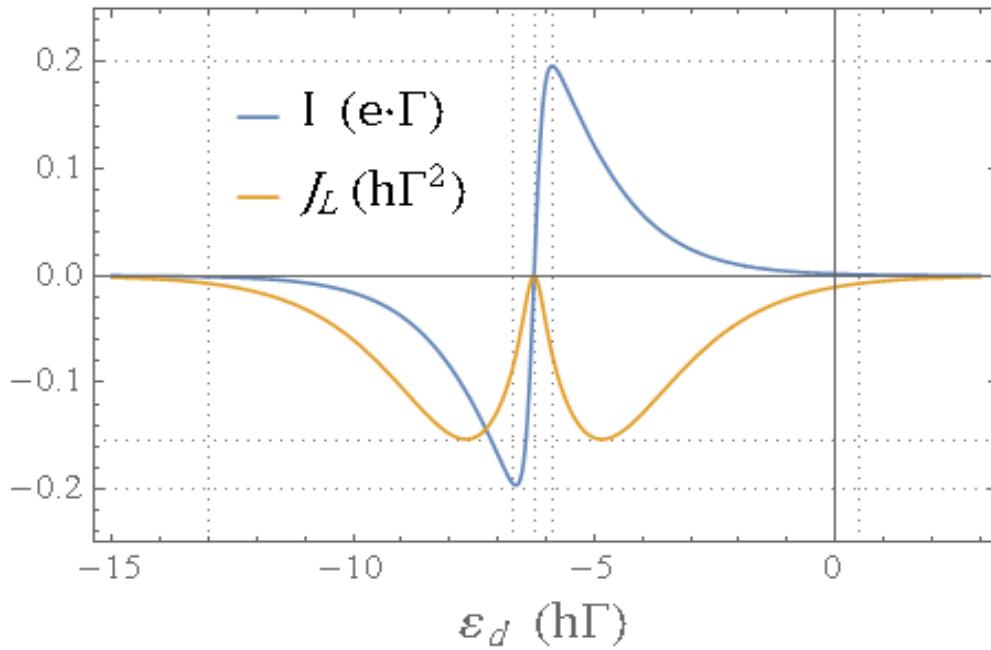
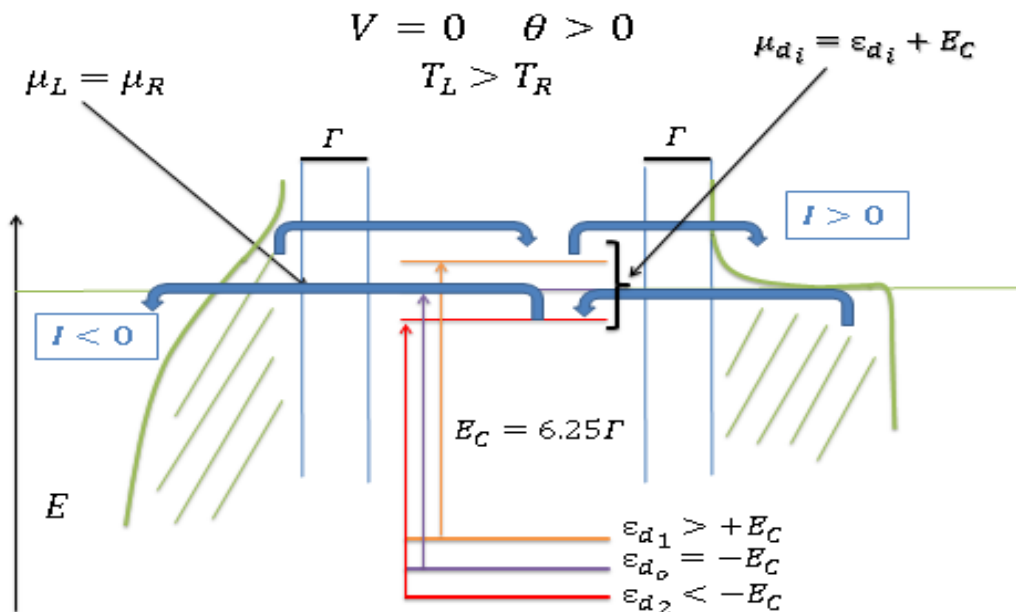


Figura 4. Corriente de carga (I) y corriente de calor (J_L), en función del nivel del punto cuántico ε_d .
 Parámetros $V = 0$, $k_B T_L = 1.1h\Gamma$, $k_B T_R = 0.1h\Gamma$, $k_B \theta = 1h\Gamma$

$\varepsilon_d = -E_C = -6.25 h\Gamma$ actúa de eje de simetría, impar para la corriente de carga, y par para la corriente de calor.

La corriente de calor, obviamente, fluirá de izquierda a derecha sea cual sea el valor de ε_d , ya que el contacto caliente es el izquierdo. Es por ello, que se observa que la corriente de calor tiene siempre el mismo signo.

En cambio para la corriente de carga, tenemos que según aumentemos ε_d o lo disminuyamos desde el valor e simetría, fluirá en un sentido o en el otro. Para explicar éste fenómeno no ayudaremos con la imagen de la siguiente:



Se puede observar que según donde esté el nivel ε_d , podremos tener corriente de carga en un sentido o en otro.

Si el nivel se haya en $\varepsilon_d = -E_C$, la intensidad es nula, pero no porque haya transporte de ningún electrón de un lado al otro, si no por compensación de los electrones del reservorio izquierdo que ocupan estados desocupados del reservorio derecho, como de los del reservorio derecho que ocupan estados desocupados del izquierdo.

Para $\varepsilon_d > -E_C$, la corriente será mayoritariamente (no únicamente) de electrones del reservorio izquierdo hacia el derecho, de ahí el signo, llegando el valor máximo en $\varepsilon_d = \varepsilon_{d1}$, a partir de ahí, comienza a disminuir hasta llegar a cero. Tenemos el mismo comportamiento a la inversa cuando $\varepsilon_d < -E_C$, donde la corriente será mayoritariamente (no únicamente) de electrones del reservorio derecho hacia el izquierdo, de ahí el signo, llegando al valor máximo en $\varepsilon_d = \varepsilon_{d2}$, también a partir de ahí comenzará a disminuir en valor absoluto, hasta llegar a una intensidad de corriente nula.

$$V = 0 \rightarrow \mu_d = \varepsilon_d + E_C \rightarrow I(\mu_d) = I(\varepsilon_d)$$

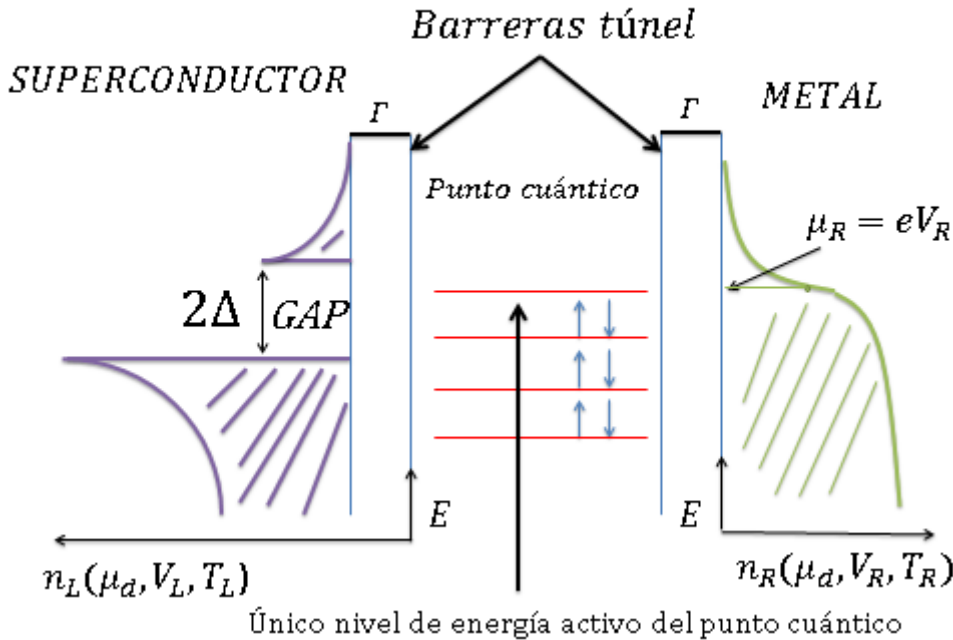
$$I(\varepsilon_d)|_{\varepsilon_d=\varepsilon_{d0}} = 0$$

$$I(\varepsilon_d)|_{\varepsilon_d=\varepsilon_{d1}} = I_{m\acute{a}x} > 0$$

$$I(\varepsilon_d)|_{\varepsilon_d=\varepsilon_{d2}} = -I_{m\acute{a}x} < 0$$

ε_{d1} corresponde al nivel, para el cual μ_d se sitúa allá donde la corriente de carga es máxima, , mientras que ε_{d2} , corresponde al nivel para el que μ_d se sitúa allá donde es máxima, pero en sentido opuesto.

4.2 Sistema Superconductor-Punto cuántico-Metal



En nuestro problema el superconductor entra dentro de los ritmos de transición como una densidad de estados que depende de la energía. Por tanto podemos seguir empleando el mismo formalismo de ecuación maestra solamente que ahora los ritmos de transición tienen en cuenta que las probabilidades de cambio de 0 a 1 electrones en el punto cuántico (o viceversa) han de calcularse teniendo en cuenta la densidad de estados del superconductor. En el caso del metal dicha densidad de estados es constante, pero en el caso superconductor la dependencia de la energía es bastante fuerte. En nuestra descripción del transporte hemos omitido el posible transporte por pares de Cooper dentro del gap ya que la corriente que da lugar es muy pequeña comparada con la corriente que se genera por excitaciones electrónicas. Además, por simplicidad hemos considerado que el gap no depende de la temperatura. Dicha aproximación será realista en tanto en cuanto las temperaturas empleadas no estén cerca de la temperatura crítica, por ejemplo para el caso del Niobio, dicha temperatura crítica es de aproximadamente 10K que le corresponde una energía de aproximadamente 1 meV. Teniendo en cuenta que el ritmo de túnel típico (Γ) de un punto cuántico es del orden de 0.1 meV, entonces las temperaturas que se pueden utilizar estarán en torno a 1-5 veces la energía asociada al túnel, de tal manera que la aproximación de transporte secuencial siga siendo válida y el contacto superconductor no deje de serlo.

La densidad de estados del superconductor y las probabilidades de transición se muestran a continuación:

$$D_s(E) = \begin{cases} |E|/\sqrt{|E|^2 - |\Delta|^2} & \text{si } |E| > \Delta \\ 0 & \text{si } |E| \leq \Delta \end{cases}$$

Sistema SC-PC-METAL	
$W_{0 \leftarrow 1}^L$	$= \Gamma_L D_s(\mu_d) \cdot (1 - f_L(\mu_d, V_L, T_L))$
$W_{1 \leftarrow 0}^L$	$= \Gamma_L D_s(\mu_d) \cdot [f_L(\mu_d, V_L, T_L)]$
$W_{0 \leftarrow 1}^R$	$= \Gamma_R (1 - f_R(\mu_d, V_R, T_R))$
$W_{1 \leftarrow 0}^R$	$= \Gamma_R f_R(\mu_d, V_R, T_R)$

Si reducimos el gap a cero, la densidad de estados $D_s(E) = 1 \forall E$ y recuperamos el caso anterior tal y como esperamos.

En este caso para tener invariancia Gauge con los voltajes, consideramos $V_L = -V_R = V/2$.

$$\begin{aligned}\mu_d &= \varepsilon_d + e \frac{C_L \cdot V_L + C_R \cdot V_R}{C_L + C_R} + \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} = \\ &= \varepsilon_d + \frac{e^2}{2 \cdot (C_L + C_R)} = \varepsilon_d + 6.25h\Gamma\end{aligned}$$

Por tanto necesitamos que $|\varepsilon_d + 6.25h\Gamma| > \Delta$ para poder tener transporte.

Con todo esto, los resultados para la corriente de carga y calor se obtienen procediendo exactamente igual que en el caso del sistema Metal-PC-Metal.

$$I = e \cdot \frac{D_s(\mu_d) \cdot \Gamma_L \Gamma_R}{D_s(\mu_d) \cdot \Gamma_L + \Gamma_R} (f_L(\mu_d, V_L, T_L) - f_R(\mu_d, V_R, T_R))$$

$$J_L = \frac{(\mu_L - \mu_d)}{e} I \quad J_R = -\frac{(\mu_R - \mu_d)}{e} I$$

Nótese que la ventana de transporte es la misma que en el caso anterior, siempre y cuando la densidad de estados no sea nula, es decir, siempre y cuando no nos encontremos en el gap, donde la intensidad será nula sea cual sea el voltaje aplicado.

4.2.1 Característica I - V

Consideramos una temperatura tal, que la energía térmica asociada es de $0.1h\Gamma$ y un gap de valor $4h\Gamma$ (es decir $\Delta = 2h\Gamma$)

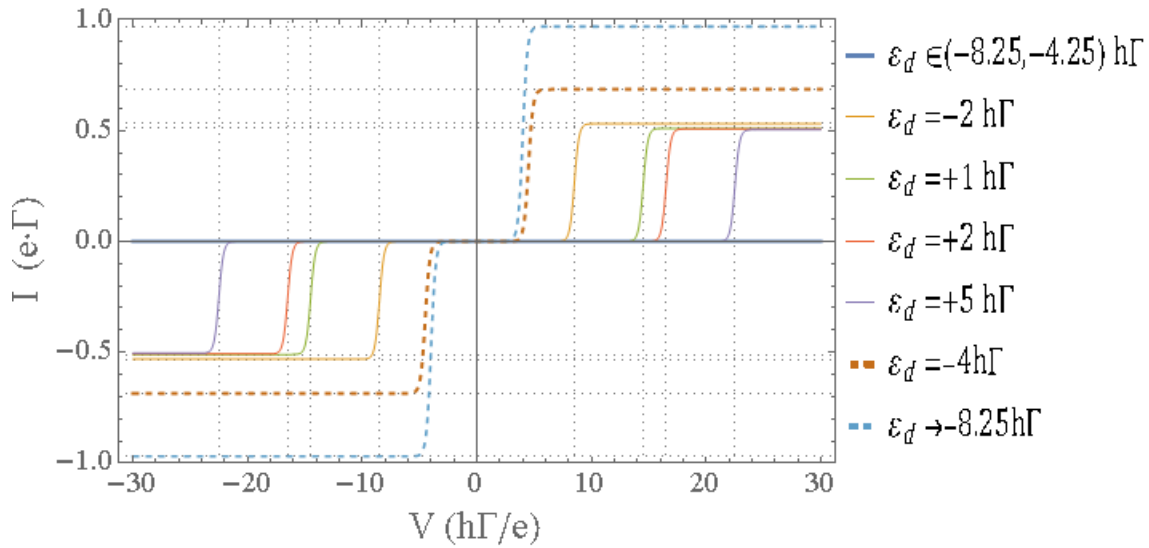


Figura 6. Corriente de carga (I) en función del voltaje (V), para diferentes valores ε_d . Parámetros $k_B T = 0.1h\Gamma$, $\theta = 0$, $2\Delta = 4h\Gamma$

Existen varios cambios significativos respecto al caso anterior. El primero de ellos es el aumento del valor máximo alcanzado de la corriente de carga. En el caso normal teníamos un prefactor $\frac{1}{2}$ sea cual fuera la energía del punto cuántico, tenemos un prefactor $D_s(\mu_d)/(D_s(\mu_d) + 1)$ que tiene un valor comprendido entre $\frac{1}{2}$ y 1 siempre y cuando no nos hallemos en el interior del gap en cuyo caso ese prefactor es 0.

Para niveles con que $|\varepsilon_d + 6.25h\Gamma| < |\Delta| = 2$ (*en nuestro caso*) no hay intensidad independientemente del voltaje aplicado. Es decir con esta energía del nivel, el nivel “efectivo” μ_d se coloca en la región prohibida, o gap del superconductor.

Podemos observar un cambio en el comportamiento “similar” al comentado en el primer apartado referente al caso metal-metal, al aumentar la temperatura. Esta vez no hay que subir en exceso la temperatura para asegurar que no se pierda el estado superconductor.

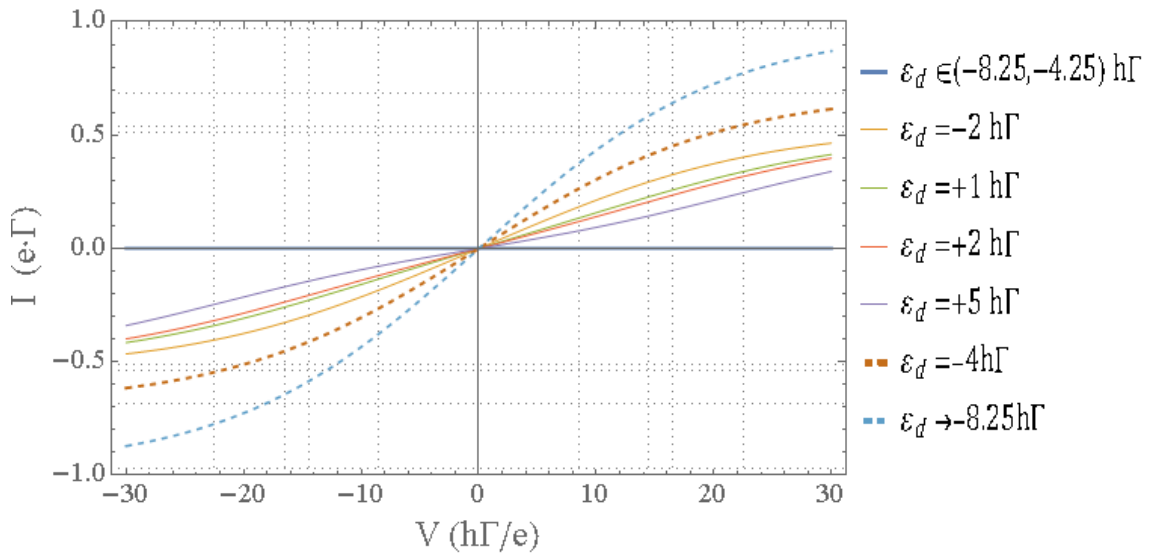


Figura 7. Corriente de carga (I) en función del voltaje (V), para diferentes valores ε_d . Parámetros $k_B T = 5h\Gamma$, $\theta = 0$, $2\Delta = 4h\Gamma$

4.2.2 Característica $I - \varepsilon_d$

En la siguiente página vamos a observar la característica $I - \varepsilon_d$ a distintas temperaturas $0.1h\Gamma$ (azul), $1h\Gamma$ (anaranjado), $5h\Gamma$ (verde), para distintos valores de Δ . En concreto se representan las características mencionadas para los siguientes valores de Δ , junto a una imagen auxiliar en la que en escala horizontal de los mismos manteniendo la escala vertical, para apreciar el efecto de añadir el superconductor.

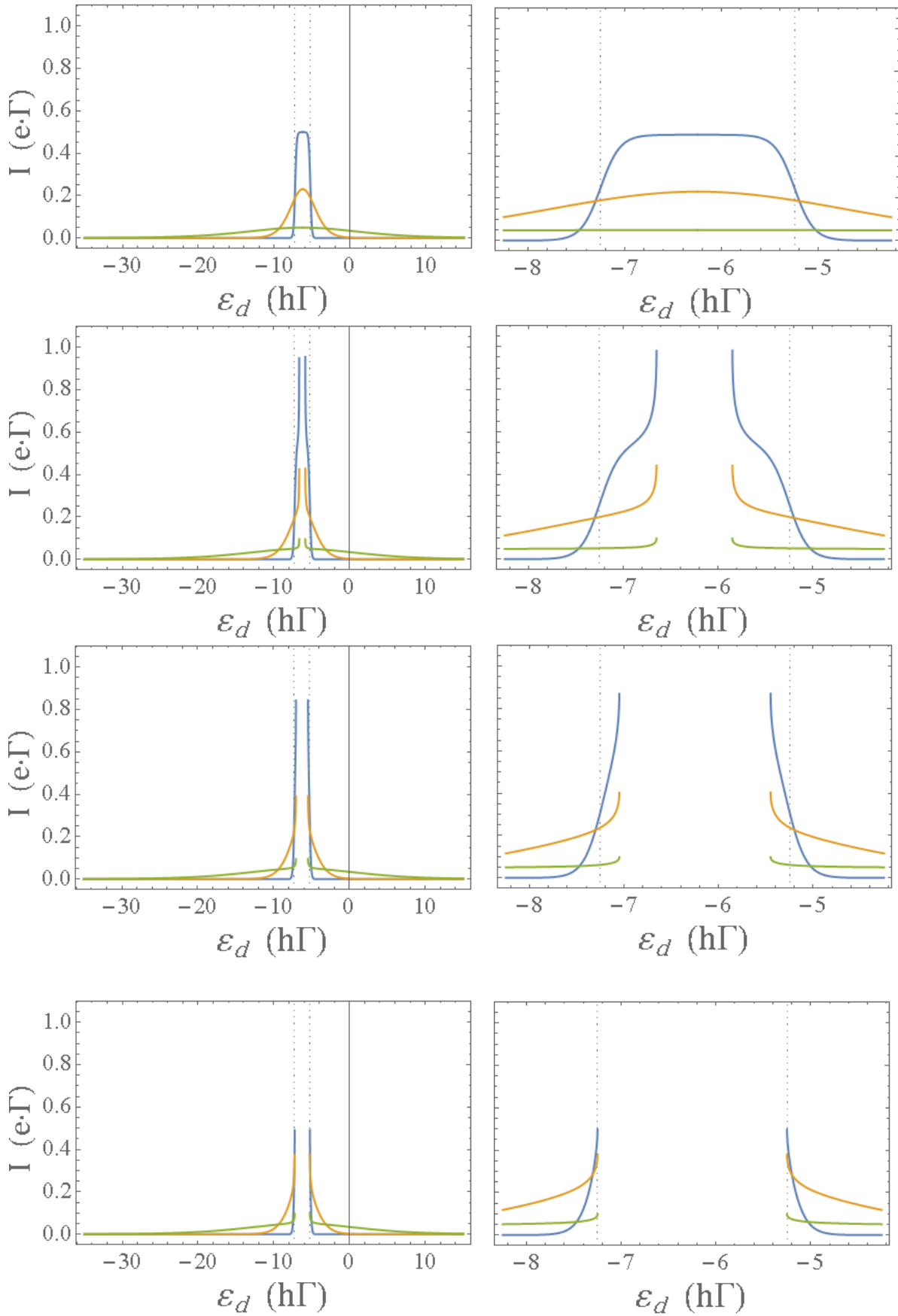
$\Delta = 0.0h\Gamma \rightarrow$ Recuperaremos obviamente el resultado del sistema normal (4.1.2)

$\Delta = 0.4h\Gamma$

$\Delta = 0.8h\Gamma$

$\Delta = 1.0h\Gamma$

- $k_B T = 0.1 h\Gamma$ - $k_B T = 1 h\Gamma$ - $k_B T = 5 h\Gamma$ $V = +2h\Gamma/e$



Observamos como al añadir el superconductor, $\Delta \neq 0$ se adquieren intensidades inalcanzables con un sistema formado únicamente por metales. Al ir aumentando Δ , aumenta la región energética para la cual en el reservorio izquierdo no habrá estados posibles y por tanto no habrá transporte. No solo eso, sino que ahí donde si hay transporte, éste será en menor cantidad, ya que donde haya estados posibles en el superconductor, habrá menos estados desocupados en el metal de la derecha, y es por eso que se va reduciendo al ir aumentando en exceso el gap.

Este último aspecto lo apreciaremos mejor en la siguiente y última gráfica.

4.2.3 I – Δ

$$V = +2h\Gamma/e$$

$$k_B T = h\Gamma$$

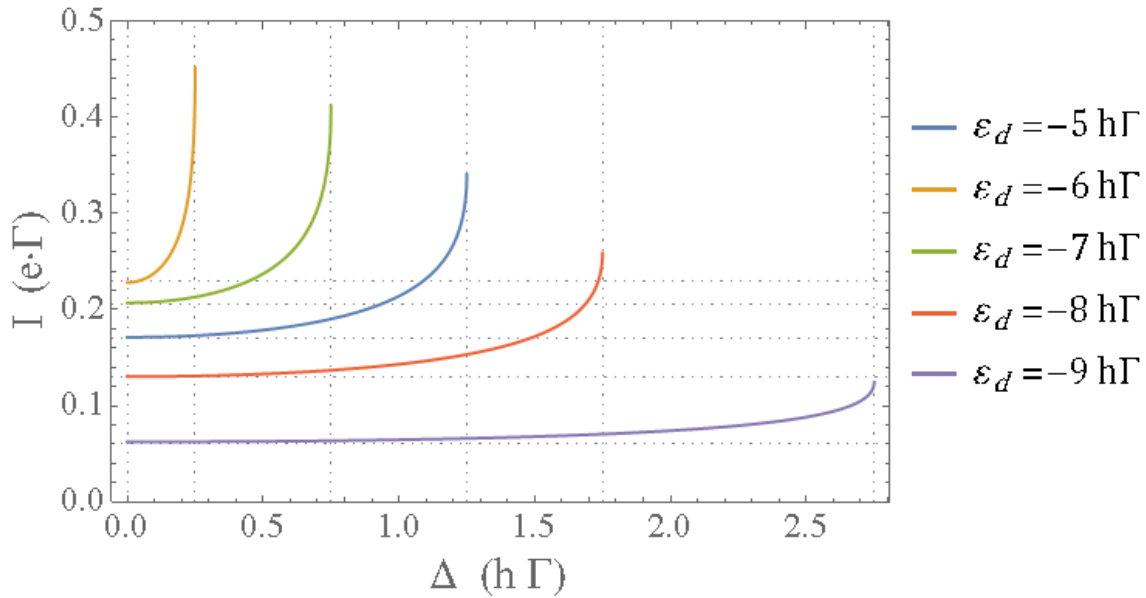


Figura 8. Corriente de carga (I) en función de la magnitud del gap (Δ) del superconductor para diferentes valores de ε_d .

Parámetros $V = +2h\Gamma/e$, $\theta = 0$, $k_B T = h\Gamma$

En esta última gráfica se pretende mostrar como la magnitud del gap del superconductor influye en la ventana de transporte para distintos niveles del punto cuántico. Al ir aumentando su magnitud, ocurre que la intensidad es de cada vez menor sea cual sea el nivel, debido a que la región de energías fuera del gap, es menos viable para el transporte (es decir existe un menor ratio estados ocupados-no ocupados entre un reservorio y el otro). Al ir aumentando el gap vemos también como algunos niveles, ya ni siquiera proporcionan intensidad ya que sitúan al nivel efectivo en el interior del propio gap, es decir, al ir aumentando la magnitud del gap, hacen falta niveles ε_d más profundos, para no caer en su interior.

Un último aspecto a notar, es donde caen los valores de intensidad máxima para cada valor de ε_d . Es decir que valores de Δ hacen máxima la intensidad para un cierto valor de ε_d . Éstos valores son cuando el nivel, se coloca en un lugar tal que el nivel efectivo cae donde haya más posibilidades de transporte (es decir justo antes del gap) por tanto la condición matemática que equivale al razonamiento anterior es: $\varepsilon_d + E_C \rightarrow \Delta$. Por tanto si queremos aumentar la corriente que circula por nuestro sistema, podemos tener que elegir adecuadamente el nivel del punto cuántico, y el gap del superconductor, el cual puede controlarse mediante campos magnéticos externos y cambios de temperatura.

5. Conclusiones

Hemos estudiado el transporte de carga y calor en puntos cuánticos en el régimen de bloqueo coulombiano usando el formalismo de la ecuación maestra. Las dependencias con la altura del nivel “desnudo” ε_d , con el voltaje (V) entre los reservorios a los que está acoplado el punto cuántico, y la temperatura (T) de los mismos, han sido exhaustivamente estudiadas bajo las condiciones impuestas.

La parte más interesante ha sido apreciar el cambio notable, al introducir el material superconductor en nuestro estudio. Como era de esperar, obtenemos circunstancias bajo las cuales la corriente llega incluso a doblar en magnitud a la del sistema normal, además de obtener una región donde no existen estados energéticos posibles y no es viable el transporte.

La motivación posterior a este trabajo, consiste en estudiar un sistema con dos superconductores, con diferentes gaps, y ver como responde el sistema modificando éstos, a través del cambiar el flujo magnético que atraviesa cada reservorio, tal y como propone Giazzotto en su artículo *arXiv 1609.08525*

Tener en cuenta la conducción por pares de Cooper en la región de estados prohibidos, en lo que se conoce como reflexión Andreev, sería una posible mejora del modelo para describir los sistemas con superconductores, lo cuál supone otra posible motivación posterior a la realización de este trabajo.

Por último, también sería interesante reducir el número de simplificaciones del modelo realizado en éste trabajo de final de grado, como por ejemplo, posibilitar la doble ocupación del nivel del punto cuántico, es decir relajar la tercera condición del apartado 2.4 (interacción tan elevada dentro del punto cuántico que solo puede haber un electrón en el único nivel activo), habilitar más de un nivel activo para la conducción...

Y en base a los resultados, ver como de lejos se hallan cuantitativamente, que no conceptualmente, nuestros resultados

Todo ello lo dejamos en vistas a un posible trabajo de final de máster en dicha rama.

Apéndice

La carga eléctrica total almacenada por nuestro sistema viene dada por

$$Q = C_L(\varphi - V_L) + C_R(\varphi - V_R)$$

Donde φ es el potencial electrostático dentro del punto cuántico. Reescribiendo la relación anterior tenemos:

$$\varphi = \frac{C_L V_L + C_R V_R + Q}{C_L + C_R}$$

Y la energía potencial suministrada al punto cuando se añaden N cargas al sistema es:

$$U(N) = \int_0^{e \cdot N} \varphi dQ = \frac{1}{C_L + C_R} \left((C_L V_L + C_R V_R) e \cdot N + \frac{(eN)^2}{2} \right)$$

Teniendo en cuenta que el nivel solo puede estar ocupado por un electrón o ninguno, el potencial electroquímico será:

$$\mu_d = \varepsilon_d + U(N = 1) - U(N = 0) = \varepsilon_d + \frac{1}{C_L + C_R} \left((C_L V_L + C_R V_R) e + \frac{e^2}{2} \right)$$

$$\mu_d = \varepsilon_d + e \frac{(C_L V_L + C_R V_R)}{C_L + C_R} + \frac{e^2}{2(C_L + C_R)}$$

Bibliografía

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Thompson editorial (1976)
- [2] Introduction to the Superconductivity, Editorial Dover publications, Michael Tinkham, 1996
- [3], J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer Phys. Rev. 108, 1175 (1957)
- [4] Marc A.Kastner. (1993). Artificial Atoms. *Physics Today*, 46, 24/31.
- [5] C. W. J. Beenakker, \Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot," *Physical Review B*, vol. 44, pp. 1646{1656, July 1991.
- [6] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and J. Bird, *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, 2009.
- [7] Y. V. Nazarov, Y. Blanter, Y. V. Nazarov, and Y. M. Blanter, \Quantum Transport: Introduction to Nanoscience," Cambridge Univ Pr, p. 581, 2009.
- [8] R. Sanchez and M. Buttiker, \Detection of single-electron heat transfer statistics," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 100, no. 4, p. 47008, 2012.
- [9] D.K.C. MacDonald, *Thermoelectricity: an introduction to the principles*, John Wiley & Sons INC. (1962)
- [10]T. Oosterkamp, \Artificial Atoms and Molecules: on manibody effects and coherence on semiconductor quantum dots," 1999.
- [11] T. Ruokola and T. Ojanen, \Theory of single-electron heat engines coupled to electromagnetic environments," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 86, no. 3, pp. 1{7, 2012}.
- [12]R. C. Ashoori, \Electrons in artificial atoms," *Nature*, vol. 379, no. 6564, pp. 413{419, 1996}.