

Universidad Nacional de Córdoba
Facultad de Matemática, Astronomía y Física

Trabajo Especial de la Licenciatura en Física

Elementos para una Descripción Dinámica de la Conductancia
Cuántica en Nanohilos Magnéticos.

Autor: Lucas Jonatan Fernández
Director: Dr. Horacio M. Pastawski

Marzo 2011

Índice

I. Introducción	1
II. Transporte en Metales ferromagnéticos	3
Paredes de Dominio	
Modelo de dos bandas o modelo <i>sd</i>	
Hamiltoniano de los electrones de conducción	
Modelo de dos resistores para una pared de dominio	
Descripción microscópica de la pared de dominio	
Las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes	
Fórmula de Landau-Zenner	
Paredes de interés	
III. Transporte Coherente	14
Funciones de Green y fórmula de Landauer	
Modelo Tight Binding para la pared de dominio	
Cálculo de la transmitancia en el régimen coherente	
Régimen dispersivo	
Régimen balístico	
IV. Propuesta Dinámica: Expansión de Trotter-Suzuki	22
Presentación del Método de Trotter Suzuki	
Sistema de dos Niveles	
Transmitancia y respuesta dinámica	
Conduciendo electrones en el nanohilo ferromagnético	

V. Modelo Dinámico para la decoherencia	34
Antecedentes	
Modelo Dinámico para Decoherencia	
Testeando el modelo dinámico para decoherencia	
Pruebas preliminares	
Sistema de dos niveles con decoherencia	
Comparación con el modelo D'Amato Pastawski	
Doble barrera	
Cadena lineal con decoherencia	
VI. Propiedades del Transporte con Decoherencia en el Nanohilo Ferromagnético	47
Oscilaciones de Rabi	
Trayectoria de una partícula con decoherencia	
VII. Conclusiones	51
VIII. Apéndices	55
Apéndice A: Modelo Tight Binding	
Apéndice B: Funciones de Green y método de decimación	
Apéndice C: Expansión de Trotter Suzuki	
Bibliografía	62

Agradecimientos

A Horacio y Patricia, por su paciencia e incondicional ayuda.

A mis padres, Esther y Raúl, por apoyarme siempre, en cada momento de mi vida.

A mis hermanos, Emanuel, Soledad y Augusto.

A mis amigos, por apoyarme siempre y poner alegría en mi vida, en especial a Rubén y su familia, por su ayuda y apoyo.

A mis compañeros, con quienes compartí muchos momentos a lo largo de esta etapa.

A los integrantes del grupo, Hernán, Raúl, Carlos, Axel y Pablo, por las valiosas contribuciones a este trabajo.

A la gente del LaNaIS, por los momentos compartidos.

Y por sobretodo, a todas las personas que estuvieron en mi vida durante estos años, les digo

¡¡¡MUCHAS GRACIAS!!!

Capítulo I

1 Introducción

Este trabajo tiene como objetivo el desarrollo de nuevas herramientas y modelos que nos permitirán analizar propiedades dinámicas en el transporte de electrones que se manifiestan en la conductancia de nanohilos ferromagnéticos. Estas herramientas no son particulares de los sistemas ferromagnéticos, sino que encuentran aplicaciones en problemas de dinámica cuántica en general, como así también en problemas de transporte y dinámica decoherente.

Vamos a explorar algunos fenómenos que se dan en estos metales ferromagnéticos, en especial, los relacionados con la dependencia del espín de la conductancia. Desde el descubrimiento de la magnetorresistencia gigante por el grupo de Fert [F08], estos sistemas han generado un gran interés debido a sus novedosas propiedades magnéticas y la posibilidad de hacer interactuar al espín del electrón con su campo magnético local incluyéndolo como un nuevo ingrediente en el transporte electrónico. En particular, el transporte a través de regiones donde se extienden paredes de dominio está en actual efervescencia por sus potenciales aplicaciones que emergen del control de las paredes de dominio: Se pueden lograr campos locales controlables por corrientes y lograr la movilidad de las paredes por medio corrientes electrica. [PhysKN10]. También es posible lograr una inversión en la magnetización transversal en una pared de dominio mediante pulsos controlados de corriente, efecto que aún no pudo sido explicado con las teorías actuales[PhysK08].

Por otro lado, no podemos ignorar los fenómenos producidos por el ambiente y los efectos térmicos en los materiales. El principal efecto que introduce la temperatura es la decoherencia, ya que a través de esta modifica sustancialmente las propiedades de transporte [CBMP10]. Esto nos lleva a buscar una descripción del problema que incorpore este nuevo elemento de la física, la decoherencia. Pensamos que una descripción del problema que incorpore este ingrediente nos acercará más a los resultados experimentales, en particular a los experimentos locales [FFVUH10].

En el segundo capítulo, introducimos algunos conceptos relevantes para el análisis de la conductancia en los materiales ferromagnéticos. Se describe a la estructura de dominios de estos materiales. Se tratará las bandas electrónicas mediante el modelo de dos bandas, para hallar el Hamiltoniano que gobierna a este sistema. Se discuten las formas de las paredes de dominio que se presentan en la naturaleza y modelos para su manifestación en la dinámica cuántica. En particular se introduce el modelo semi-fenomenológico de dos resistores desarrollado por Falloon et al [FJWS04, FJWS06, Fall06] cuyo

ingrediente central son las transmitancias cuánticas que estudiamos en esta tesis.

En el tercer capítulo se introduce el modelo de enlaces fuertes (Tight Binding) para tratar al nanohilo. Se discuten los regímenes balístico y dispersivo para la transmitancia, que aparecen cuando la componente de la energía de Fermi a lo largo del nanohilo ferromagnético es mucho mayor y del orden que la energía Zeeman respectivamente. Vamos a utilizar las funciones de Green para calcular las transmitancias del nanohilo en ambos regímenes, reobteniendo los resultados de [GWJS04], en el caso dispersivo. Se discuten algunos resultados de interés: Polarización y Oscilaciones.

En el cuarto capítulo, se introduce el modelo para analizar la dinámica cuántica del sistema usando la expansión de Trotter-Suzuki. Luego de la presentación del modelo se lo evalúa en sistemas familiares, tales como un dímero y la doble barrera con un sitio resonante. Usando este último presentamos las trayectorias espacio-temporales de la partícula. Se evalúa el régimen de validez de la transmitancia medida con el modelo dinámico frente a la transmitancia obtenida por las funciones de Green. Se propone y evalúa un método más eficiente para medir la transmitancia, las regiones de absorción. Por último se procede a la reobtención de las transmitancias en función del largo de la barrera, con sus oscilaciones.

En el quinto capítulo, se presentan las bases de un modelo dinámico que incorpora la decoherencia a la evolución cuántica de una partícula. Este puede considerarse como una versión dinámica del modelo D'Amato-Pastawski [DP90] para el transporte decoherente pero también puede verse como una variante "ad-hoc" del modelo de saltos cuánticos desarrollado por Carmichel [Car89] para óptica cuántica. Se evalúa en diferentes sistemas ya conocidos.

En el sexto capítulo presentamos algunos resultados que obtuvimos en el tratamiento decoherente de la conductancia cuántica mediante el Modelo Dinámico para la Decoherencia.

Por último, se presentan en Apéndices los cálculos que complementan el desarrollo del trabajo pero que no hacen la esencia del mismo.

Capítulo II

2 Transporte en Metales Ferromagnéticos

Los electrones que se encuentran dentro de un material ferromagnético contribuyen de forma directa o indirecta al transporte electrónico que en ellos se produce. El efecto de las paredes de dominio sobre el mismo no puede ser despreciado y afecta al transporte electrónico aprovechando su propiedad cuántica del espín.

Vamos a ver, en este capítulo, algunas características esenciales de estos sistemas y analizaremos el impacto sobre la conductancia desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica.

2.1 Paredes de dominio

Los materiales ferromagnéticos son típicamente aquellos formados por los elementos de transición, donde la capa d no está completa. Esto le confiere un momento magnético neto a cada una de sus moléculas. Estas, a causa del principio de exclusión de Pauli, alinean sus momentos magnéticos unas con otras, y debido a las interacciones dipolares forman regiones donde hay una magnetización colectiva definida, que llamaremos **dominios magnéticos** o simplemente **dominios**.

Los dominios no tienen siempre la misma dirección. En general, una muestra de un material ferromagnético presenta dominios en diferentes direcciones, donde dominios adyacentes comunmente tienen su magnetización opuesta, o formando ángulos de 90° . Estas estructuras consiguen minimizar la energía libre del material.

Las zonas o fronteras que separan dominios son llamadas **paredes de dominio**. La magnetización rota gradualmente a través de la pared hasta orientarse en el sentido del dominio que tenga en contacto. Para hierro, por ejemplo, cubren hasta trescientos átomos. Los desplazamientos angulares mas usuales son de 90° ó 180° .

Dependiendo de la geometría del sistema, las paredes de dominio más convenientes pueden ser diferentes. En muestras volumétricas, la configuración de más baja energía son las paredes de Bloch, en las que la magnetización rota en el plano definido por la pared de dominio.

En sistemas de dimensión menor, las paredes de Bloch dejan de ser las más convenientes. Las paredes de dominio más usuales para estos casos son las de Néel y las "head to head" (cabeza a cabeza). En la figura 2 se muestra

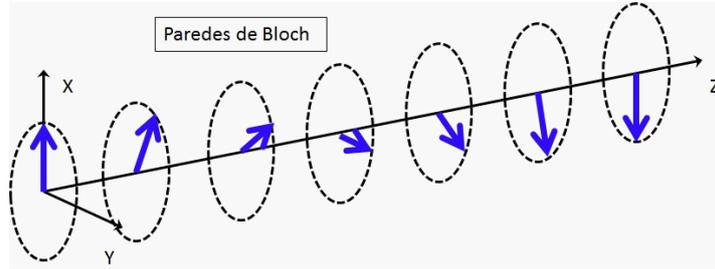


Figura 1: Vectores de magnetización en la pared de dominio en un plano paralelo al de la interfase.

un esquema que las representa. En ambas la magnetización rota en el plano perpendicular a la pared.

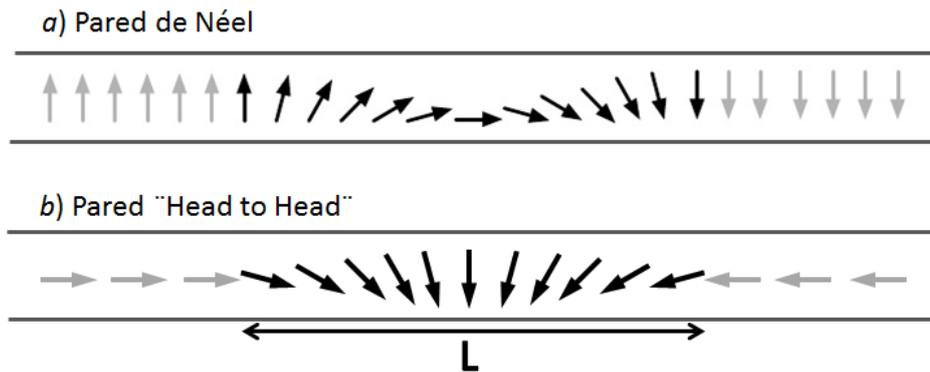


Figura 2: Vectores de magnetización en el plano que contiene al nanohilo, perpendicular al plano de la interfase.

En este trabajo se pretende estudiar algunas propiedades de la transmisión de las corrientes de electrones considerando sus interacciones con los campos magnéticos presentes en una muestra de un material ferromagnético. En particular estamos interesados en sistemas cuyas magnitudes transversales son mucho menores a las longitudinales, por lo que las primeras pueden ser despreciadas.

Es necesario entender algunas características de estos materiales, principalmente las vinculadas con la conducción electrónica. Un buen punto de partida es estudiar su estructura electrónica o estructura de bandas. La estructura electrónica de los metales ferromagnéticos suele ser bastante complicada por lo que vamos a introducir un modelo simple, que tome los ingredientes

de la física relevantes en el problema. La descripción del modelo adoptado se encuentra muy apegada a la hallada en la tesis de Peter Falloon[Fall06], introducido por Mott para hierro, cobalto y níquel.

2.2 Modelo de dos Bandas o Modelo S-D

En el modelo sd , la estructura electrónica comprende estas dos bandas, la s y la d . A las bandas d se las representa por una banda semi-elíptica, con dependencia del espín. Típicamente son muy angostas en energía, por lo cual los electrones d tienen con una gran masa efectiva. Esta última propiedad determina que su contribución al transporte no es directamente relevante. La característica importante de la banda d , es que, para un mismo eje de cuantización, las sub-bandas que la componen tienen un diferente número de estados ocupados. Esto genera un momento magnético neto en el ferromagneto, \vec{M} , como se muestra en la figura 3.

La banda s , por otro lado, también puede ser representada por una estructura parabólica simple, con pequeña masa efectiva, y son estos electrones los que contribuyen significativamente al transporte.

La interacción de intercambio entre electrones en las bandas s y d da lugar al campo \vec{H}_{sd} que actúa sobre los electrones s y es paralelo a \vec{M} . La estructura de bandas es ilustrada esquemáticamente en la figura 3.

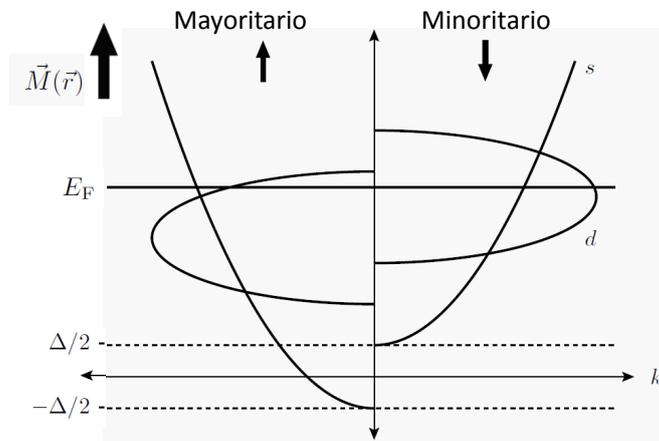


Figura 3: Se muestran las bandas s , esquematizada con una parábola, y las d , con forma semi-elíptica, dependientes del espín del electrón. Las bandas d se extiende sobre la energía de Fermi generando un número diferente de estados ocupados para cada orientación del espín y generando de esta forma un momento magnético neto \vec{M} en el material.

2.3 Hamiltoniano de los electrones de conducción

Como vimos, los electrones que van a contribuir a la conducción eléctrica son los que se encuentran en la banda s . El momento magnético de estos electrones es $\vec{\mu} = \mu_B \cdot \vec{\sigma}$ donde μ_B es el magnetón de Bohr y $\vec{\sigma}$ es el operador de espín de Pauli, el cual interacciona con el campo \vec{H} presente en la muestra. \vec{H} está compuesto de dos términos:

$$\vec{H} = \vec{H}_{sd} + \vec{H}_{dip}$$

Por un lado, el Hamiltoniano \vec{H}_{sd} , que es el campo efectivo producido por la interacción de intercambio con los electrones de la banda d , mientras que \vec{H}_{dip} es el campo magnético dipolar.

La energía de interacción entre los electrones s y el campo efectivo es

$$V = V_{sd} + V_{dip} = -\vec{\mu} \cdot (\vec{H}_{sd} + \vec{H}_{dip}) = -\mu_B \cdot \vec{\sigma} \cdot (\vec{H}_{sd} + \vec{H}_{dip})$$

Definamos $\vec{f} = \vec{f}(\vec{r}) = \frac{\vec{H}_{sd} + \vec{H}_{dip}}{|\vec{H}_{sd} + \vec{H}_{dip}|}$; es la dirección de la magnetización

en la muestra y $\Delta = \mu_B \cdot |\vec{H}_{sd} + \vec{H}_{dip}|$.

Entonces el Hamiltoniano total para los electrones de conducción viene dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \Delta \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{f}$$

La dirección de la magnetización \vec{f} define las características esenciales de la interacción con los electrones s que eventualmente produce una rotación del espín. En cada punto del espacio traza un campo Zeeman local que define un eje de cuantización local.

2.4 Modelo de Dos Resistores para una pared de Dominio

El modelo de dos resistores original fue introducido por Valet y Fert para describir el fenómeno de Magnetoresistencia Gigante observado en el grupo de Fert [BF88],[VF93]. Esta descripción simplificada de la compleja situación fuera de equilibrio involucrada, considera una pared abrupta entre dos dominios magnéticos que pueden estar alineados u opuestos según cierto campo de control. Se busca la descripción de la magnetoconductancia de acuerdo con esta alineación y para ello se tiene en cuenta que la conductividad en los electrones s es distinta según sean mayoritarios o minoritarios. Esto es

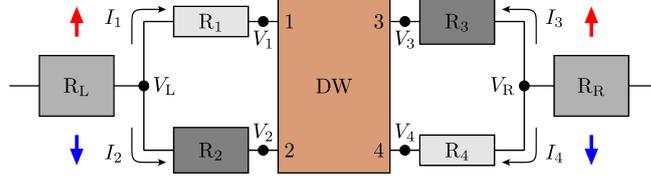


Figura 4: "Circuito modelo para la pared de dominio: La pared de dominio es un circuito de cuatro terminales conectado a las resistencias espín-dependientes R_i ($i = 1, 2, 3, 4$), que representa el transporte espín-dependiente sobre una longitud ℓ_{sd} a cada lado de la pared. Las resistencias $R_{L,R}$ representan la resistencia del resto del cable, en que los canales up y down están en equilibrio y que por lo tanto no contribuyen a la conductancia." ([Fall06])

debido a la distinta densidad de estados de los centros magnéticos, los electrones d . Así, dentro de una longitud ℓ_{sd} de la frontera, la resistencia que resulta de un análisis semiclásico de la ecuación de Boltzmann es:

$$R_\sigma = \frac{h}{e^2} \frac{\ell_{sd}}{N_\sigma \ell_\sigma}$$

donde h y e son las constantes de Planck y la carga electrónica respectivamente, N_σ el número de estados disponibles para el transporte (canales) y ℓ_σ es el camino libre medio entre colisiones que conservan espín (fonones, desorden) pero que randomizan la fase y muy principalmente la hibridización de la banda d del mismo espín. La resistencia se evalúa con la fórmula de Drude para un segmento de longitud ℓ_{sd} determinada por las colisiones que relajan el espín (spin-órbita, magnones, impurezas magnéticas, etc). El punto crucial es la dependencia de ℓ_σ en la densidad de estados d a través de la Regla de Oro de Fermi. La magnitud ℓ_σ se obtiene a partir de $\ell_\sigma = v_{Fs} \tau_\sigma$ donde v_{Fs} es la velocidad de Fermi de los electrones s y τ_σ es el tiempo de vida media. Este último presenta una dependencia con la densidad de estados de la banda d según la relación

$$\frac{1}{\tau_\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{s\sigma}|^2 N_d$$

donde $V_{s\sigma}$ es el parámetro cinético de los electrones s y N_d es la densidad de estados de los electrones d .

Al considerar una pared de dominio de espesor finito L , Falloon y colaboradores introdujeron los efectos cuánticos en esta región mediante un cálculo de transmitancias a través de la pared. Para ello se debe adoptar un modelo "microscópico" que permita evaluar dichas transmitancias. A partir de estas

se obtienen las conductancias mediante la formulación de Landauer-Büttiker en un sistema multi-terminal que se explicará en el capítulo cinco.

Según Landauer [IL99] una conductancia $(R_{RL})^{-1}$ entre dos canales cuánticos L y R es proporcional a la transmitancia cuántica

$$\frac{1}{R_{RL}} = \frac{e^2}{h} T_{RL}.$$

Es precisamente esta conductancia elemental la que genera, mediante un laborioso trabajo [KMK81], la expresión macroscópica mostrada más arriba.

En este contexto, buscamos evaluar y entender en detalle las transmitancias a través de la pared de dominio. Asimismo, si se logra un formalismo cuántico que incluya también los procesos decoherentes, en principio sería posible lograr una descripción unificada para toda la zona próxima a la pared de dominio que vaya desde la resistencia normal para dominios orientados (que se obtiene cuando L es muy grande) a la magnetoresistencia gigante obtenida como límite de paredes de dominio abruptas ($L = 0$).

2.5 Descripción Microscópica de la Pared de Dominio

Utilizaremos un sistema relativamente simple en geometría para extraer resultados físicamente relevantes sin complejidad innecesaria. Nuestro sistema será un ferromagneto unidimensional que presenta una pared de dominio. Puede pensarse que la magnetización es una función sólo de la coordenada de avance z , $\vec{f}(\vec{r}) = \vec{f}(z)$, sin pérdida de generalidad por tratarse de esta geometría particular. Es decir, \vec{f} sólo depende de la posición a lo largo del nanohilo ferromagnético.

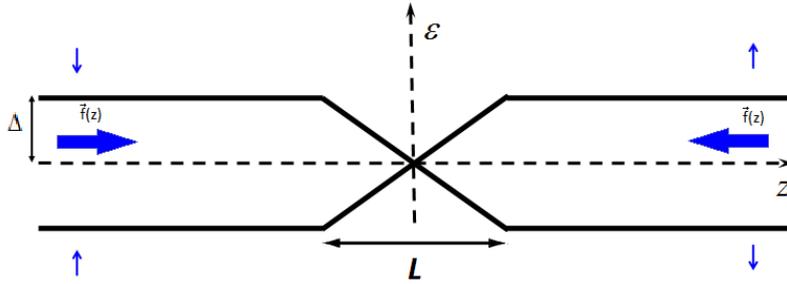


Figura 5: Esquema de la pared de dominio como barrera de potencial de longitud efectiva L en el nanohilo ferromagnético. Se nombrarán a los estados de acuerdo a su orientación paralela(\uparrow) o antiparalela(\downarrow) respecto al campo en $z = -\infty$.

En particular, se desea estudiar la conducción en una región cuya magnetización esta modelada por las formas funcionales

$$\vec{f}(z) = \left(\alpha \frac{1}{\cosh\left(\frac{z}{L}\right)}, 0, \tanh\left(\frac{z}{L}\right) \right), \quad \text{para paredes "head to head"}$$

y

$$\vec{f}(z) = \left(\tanh\left(\frac{z}{L}\right), 0, \alpha \frac{1}{\cosh\left(\frac{z}{L}\right)} \right), \quad \text{paredes de Néel}$$

donde α es un parámetro de anisotropía y L es la longitud característica de la pared de dominio.

La primera forma funcional, describe una pared de dominio "head to head", con una magnetización inicial apuntando hacia los z positivos y rota hasta tomar una orientación completamente opuesta. La segunda, describe una pared de Néel, en la que la magnetización rota según avanza la coordenada z , pero la dirección del vector cambia de $-x$ a x , como podemos ver en la figura 2.

Para ambas paredes de dominio, el término $\alpha \left(\cosh\left(\frac{z}{L}\right) \right)^{-1}$ es el responsable de las propiedades de la rotación de la magnetización, generando diferentes situaciones según sea el valor del parámetro α . Por ejemplo, si $\alpha = 1$, la norma de \vec{f} es constante en el espacio, es decir, la magnetización simplemente rota 180° entre los extremos del nanohilo. Si $\alpha \neq 1$, estamos en un caso anisotrópico, en el que la magnetización rota cambiando su intensidad. Es un caso más general, que contiene al anterior.

El eje de cuantización quedará definido por la dirección de la magnetización en los dominios. Los estados serán llamados de acuerdo a su posición en $z = -\infty$. Es decir, si tenemos un estado definido en la base $\{|z, \uparrow\rangle, |z, \downarrow\rangle\}$, designaremos por $|\uparrow\rangle$ al estado paralelo al campo y por $|\downarrow\rangle$ al antiparalelo, en $z = -\infty$.

2.6 Las ecuaciones de Cabrera-Falicov

Si escribimos la función de onda spinorial en la base up-down

$$|\varphi(z)\rangle = u_\uparrow(z) |z, \uparrow\rangle + u_\downarrow(z) |z, \downarrow\rangle$$

donde los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ ya fueron definidos como la orientación de espín paralela y antiparalela al campo de magnetización local en $z = -\infty$, respectivamente.

Sabiendo que podemos escribir la forma del vector dirección de la magnetización local, sin pérdida de generalidad, de esta forma

$$\vec{f} = \vec{f}(z) = (f_x, 0, f_z)$$

entonces la ecuación de autovalores para el Hamiltoniano queda [CF74]

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \Delta \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{f} - \varepsilon \right) |\varphi(z)\rangle = 0$$

donde ε es la energía, $\vec{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli. Esto da como resultado una variante de las ecuaciones de Bogoliubov-De Gennes, usadas en superconductividad:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} u_\uparrow + \Delta f_z u_\uparrow - \varepsilon u_\uparrow = -\Delta f_x u_\downarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} u_\downarrow - \Delta f_z u_\downarrow - \varepsilon u_\downarrow = -\Delta f_x u_\uparrow \end{cases} \quad \text{Paredes "Head to Head"}$$

para las paredes tipo "head to head", que tienen su eje de cuantización en la dirección z , o para las paredes de Néel, con eje de cuantización en la dirección x ,

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} u_\uparrow + \Delta f_x u_\uparrow - \varepsilon u_\uparrow = -\Delta f_z u_\downarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} u_\downarrow - \Delta f_x u_\downarrow - \varepsilon u_\downarrow = -\Delta f_z u_\uparrow \end{cases} \quad \text{Paredes de Néel}$$

Analizemos las ecuaciones recordando la forma del vector magnetización para cada tipo de pared de dominio. Notemos que el término proporcional a $\tanh\left(\frac{z}{L}\right)$, en ambos casos, está tomando el papel de energía potencial, y por su forma, define una barrera de potencial para los electrones. El otro término, proporcional a $\left(\cos h\left(\frac{z}{L}\right)\right)^{-1}$ es la amplitud de rotación del espín determinando la capacidad de rotación del espín de los electrones.

2.7 Fórmula de Landau-Zener

Como dijimos antes, el término que corresponde a la magnetización en la dirección de cuantización, f_z para las paredes "head to head" y f_x para las de Néel, contribuye de tal forma que genera un desdoblamiento en la energía "potencial" de cada estado. Al variar su valor en cada punto del espacio, esta cantidad será la responsable de definir una barrera de potencial en la región donde se encuentra la pared de dominio. Para cada estado

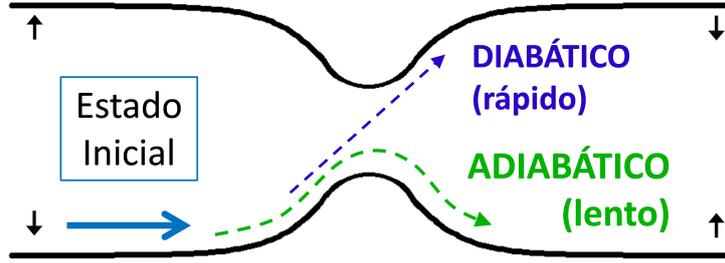


Figura 6: En el cruce evitado, una transmisión adiabática nos asegura que el estado final será el $|\downarrow\rangle$, mientras que en un pasaje diabático la probabilidad de terminar en el estado $|\uparrow\rangle$ es más alta, si el estado inicial es el $|\uparrow\rangle$.

toma un valor diferente, como se muestra en la figura 6. En la región central donde se encuentra la barrera, las energías de cada estado presentan un cruce, que debido al efecto de la interacción no diagonal que mezcla proyección de espines (f_x en paredes de Neel y f_z en Head to Head), resulta en un cruce evitado.

Como es sabido, las transiciones dinámicas en estos sistemas viene descrita por la fórmula de Landau-Zener.

$$T_{\uparrow\uparrow} = \exp\left(-2\pi \frac{|V_{1,2}|^2}{\hbar (dE/dt)}\right)$$

donde para nuestro problema

$$\frac{dE}{dt} = \left(\frac{dE}{dq}\right) \left(\frac{dq}{dt}\right) = \frac{\Delta}{L} \cdot v_f$$

De acuerdo a la tasa de cambio en energía sitio a sitio, comparada con la velocidad de los portadores y el valor de la amplitud de rotación del espín, seremos capaces de identificar un régimen adiabático, donde el electrón experimenta una rotación de espín gradual a lo largo de toda la pared de dominio, o un régimen diabático en el que el pasaje rápido evita la rotación del espín. Esperaríamos que en el primer régimen el espín permanezca en la orientación inicial, es decir, paralela o antiparalela al campo de magnetización del dominio inicial. Por el contrario, si el cambio de la orientación de la magnetización es realizado en forma abrupta, esperaríamos que haya reflexiones significativas y una mínima rotación entre los estados.

Como vimos, hay una región dentro de la pared de dominio en que las energías de los estados paralelo y antiparalelo se encuentran casi degeneradas. Vamos a discutir la física involucrada considerando que en las ecuaciones no

tenemos un término cinético. En esta región, precisamente el término que domina la rotación entre los estados, debido a su forma, toma su valor más alto. Recordemos que en las ecuaciones este término es proporcional a f_x para paredes "head to head" o a f_z en paredes de Néel y tiene la forma $\left(\cos h\left(\frac{z}{L}\right)\right)^{-1}$ (entonces esperaríamos que la rotación se manifieste como oscilaciones en la probabilidad de ocupación de ambos estados, como ocurre en sistemas de dos niveles). El estado final será función del tiempo que dure la interacción. Si el tiempo dentro de la barrera es igual al de un período de la oscilación, el estado final tendrá mayor probabilidad de ser el inicial. Por lo tanto, pensamos que estas son oscilaciones de Rabi.

2.8 Paredes de dominio en nanohilos

Hemos visto antes que las paredes de dominio más frecuentes en sistemas unidimensionales son las paredes de Néel y las "head-to-head". Ahora que hemos incorporado nuevos elementos a la descripción de estos sistemas $1D$ estamos en condiciones de analizar la dependencia de la rotación de la magnetización, o del parámetro de anisotropía α , dentro de la barrera con la forma de la pared de dominio.

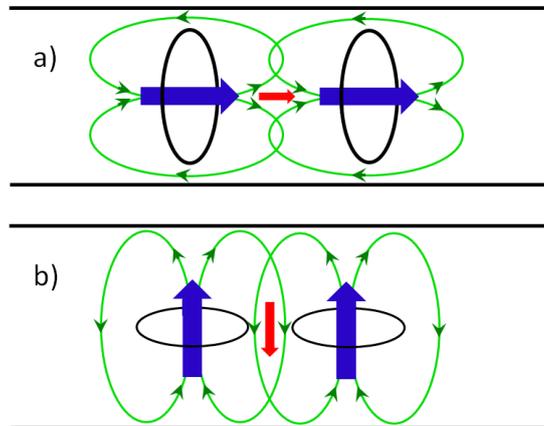


Figura 7: Se esquematiza la interacción dipolar entre las moléculas magnéticas en el nanohilo representadas por loops de corriente. Por la disposición geométrica se reconocen dos situaciones: a) el campo dipolar fortalece al campo local. b) el campo dipolar reduce la intensidad del campo local

Para entender al campo total dentro del nanohilo, es necesario analizarlo con una visión microscópica. Usaremos un modelo simple en el que vemos a cada molécula ferromagnética como un loop de corriente, representado en la figura 7.

En la figura 7a) las moléculas magnéticas del nanohilo se orientan de forma tal que el campo dipolar fortalece al campo magnético local. En 7b) ocurre el caso contrario, donde el campo dipolar apunta en dirección contraria al campo producido por la molécula.

La pregunta que queremos responder es cómo afecta esto al campo magnético local. Consideremos primero las paredes de dominio con estructura "head-to-head". En estas, los dipolos magnéticos en los dominios se orientan de forma tal que el momento magnético que genera cada uno de ellos fortalece a la magnetización neta, como se muestra en 7a). Dentro de la pared de dominio la situación se revierte, ya que el campo dipolar no favorece la magnetización local. Si hacemos un gráfico en el que representamos el campo magnético producido por los dipolos en cada punto del espacio, que consideramos como un campo Zeeman local, se ve que en la región donde se encuentra la barrera el campo local presenta una intensidad menor que el desdoblamiento de energía fuera de la misma, como se muestra en la figura 8a).

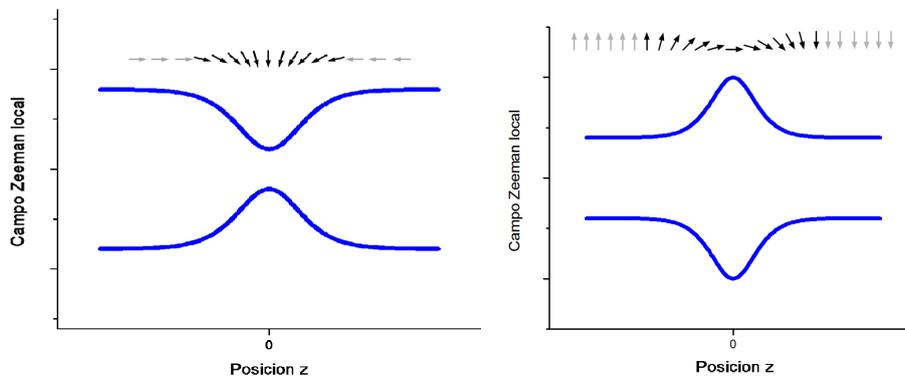


Figura 8: Se muestra el campo Zeeman efectivo experimentado por los electrones de la banda s en cada punto del espacio.

Analicemos ahora el caso de las paredes de Néel. En estas paredes, los dipolos se reorientan hacia una configuración que aumentará el campo local dentro de la pared de dominio con respecto al valor que tiene en sus dominios. Ocurre así porque en los dominios la interacción dipolar contribuye negativamente al valor de la magnetización local como podemos ver en la figura 7b),

mientras que en el interior de la barrera ocurre el caso contrario. Entonces el campo Zeeman local es mayor en el interior de la pared de dominio, como se muestra en 8*b*).

Concluimos que el parámetro de anisotropía α , tomará valores diferentes en ambos casos. Para las paredes "head to head" $\alpha < 1$ mientras que en las de Néel $\alpha > 1$.

Capítulo III

3 Transporte Coherente

Nos encontramos interesados en hallar propiedades características del transporte electrónico en este sistema, como por ejemplo la transmitancia total, o la transmitancia dependiente de la polarización del espín de inyección. También se busca analizar las propiedades del transporte en dos regímenes: el régimen balístico, en que los electrones atraviesan la barrera con la máxima velocidad, y el régimen dispersivo, donde los portadores tienen poca energía cinética.

3.1 Funciones de Green y fórmula de Landauer

El grupo de Córdoba, tiene amplia experiencia en lo que concierne al tratamiento de problemas de transporte en sistemas mesoscópicos. Una de las herramientas con la que nos hemos valido para el estudio de estas propiedades son las Funciones de Green.

Si consideramos al espacio en forma discreta, igual que una red cristalina, en un modelo llamado modelo Tight Binding, que también puede verse como la representación de la ecuación en términos de diferencias finitas. El Hamiltoniano se convierte en un operador de forma matricial, donde las componentes diagonales representan la energía de cada sitio de red, y los elementos fuera de la diagonal, el "hopping", representan la amplitud de salto entre sitios. La función de onda se vuelve un vector donde cada componente representa la amplitud de probabilidad de encontrar a la partícula en el sitio. En este modelo definimos a la Función de Green Retardada G^R como:

$$[(\varepsilon + i\eta) \mathbf{I} - \mathbf{H}] G^R = \mathbf{I}$$

Resolviendo esta ecuación matricial podemos hallar G^R [PM01].

Un paso crucial en este tratamiento es que si bien trabajamos con el Hamiltoniano de una porción finita que denominamos nuestro **sistema** (por ejemplo la pared de dominio y cierta porción alrededor de esta), es posible describir su interacción con el resto del **ambiente** (resto del nanohilo y contactos con las fuentes de corriente) a través de un procedimiento exacto de renormalización. Mediante este procedimiento podemos completar el Hamiltoniano \mathbf{H}_0 del sistema aislado, con la energía de renormalización Σ que da cuenta por la parte externa no incluida en \mathbf{H}_0 .

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \Sigma$$

donde

$$\Sigma = \Delta - i\Gamma$$

su componente real describe un "corrimiento" de los niveles de energía mientras que las componentes imaginarias describen el "escape" o "decaimiento" de los estados por interacción con el ambiente. En general el problema se vuelve no-lineal ya que Δ y Γ son funciones de ε , la energía investigada, pero existen expresiones analíticas que son exactas para describir ciertos modelos simples.

En presencia de contactos descritos por conductores ideales, la Fórmula de Fisher-Lee [PM01] nos permite relacionar la transmitancia entre esos dos cables L y R , que se conectan a través del sistema caracterizado por $G_{L,R}^R$, se define:

$$T(\varepsilon) = 2\Gamma_L(\varepsilon) |G_{L,R}^R|^2 \cdot 2\Gamma_R(\varepsilon)$$

donde Γ_L y Γ_R son las partes imaginarias de la corrección a la energía de sitio por el efecto de la conexión con los cables (Ver Apéndice B).

3.2 Modelo Tight Binding para la Pared de Dominio

Queremos representar nuestro sistema en un modelo Tight Binding. Si consideramos el espacio en forma discreta, con un parametro de red a entre sitios consecutivos, en general puede ser diferente a la separación interatómica, la posición a lo largo del eje z será $z = n.a$, donde n será llamado "índice de sitio". De esta forma, la operación de derivar se realiza tomando diferencias finitas, como vimos antes.

Denotemos a $u(z = m.a) = u^m$, $f(z = m.a) = f^m$. Luego, las ecuaciones anteriores se escriben:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2ma^2} [u_{\uparrow}^{m+1} - 2u_{\uparrow}^m + u_{\uparrow}^{m-1}] + \Delta f_z^m \cdot u_{\uparrow}^m - \varepsilon \cdot u_{\uparrow}^m = -\Delta f_x^m \cdot u_{\downarrow}^m \\ -\frac{\hbar^2}{2ma^2} [u_{\downarrow}^{m+1} - 2u_{\downarrow}^m + u_{\downarrow}^{m-1}] - \Delta f_z^m \cdot u_{\downarrow}^m - \varepsilon \cdot u_{\downarrow}^m = -\Delta f_x^m \cdot u_{\uparrow}^m \end{cases}$$

Si $V = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$, y considerando que la energía potencial está definida a menos de una constante, podemos absorber en la energía de sitio (energía potencial), el término $2.V.u^m$ en ambas ecuaciones resultando:

$$\begin{cases} -V.u_{\uparrow}^{m+1} + (\Delta f_z^m - \varepsilon) \cdot u_{\uparrow}^m - V.u_{\uparrow}^{m-1} = -\Delta f_x^m \cdot u_{\downarrow}^m \\ -V.u_{\downarrow}^{m+1} - (\Delta f_z^m + \varepsilon) \cdot u_{\downarrow}^m - V.u_{\downarrow}^{m-1} = -\Delta f_x^m \cdot u_{\uparrow}^m \end{cases}$$

Como vemos, ahora se tienen dos ecuaciones con dos autofunciones diferentes: la que representa a los estados con orientación de espín paralelo al

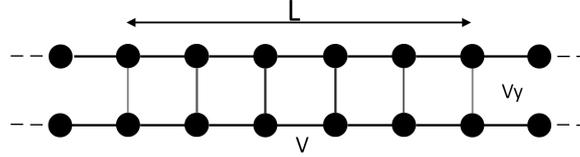


Figura 9: Representación de las ecuaciones en el modelo Tight Binding en el que cada cadena representa un estado de espín, formando una escalera. V es el parámetro de salto del sistema, V_y representa la amplitud de rotación del espín, L es la longitud efectiva de la pared de dominio.

campo, es decir u_\uparrow , y la que representa a los estados antiparalelos al campo, los u_\downarrow . En nuestra representación Tight Binding, cada uno quedará discretizado espacialmente, formando una cadena. También, debido a la amplitud de rotación que mezcla los estados u_\uparrow y u_\downarrow , ambas cadenas estarán vinculadas entre sí por un parámetro de salto que da cuenta de la rotación del espín a lo largo de la barrera.

Una gran ventaja que presentan los sistemas Tight Binding es que pueden ser esquematizados en diagramas de sitios. Nuestro sistema en esta forma gráfica luce como una escalera.

La cadena superior representa los sitios espaciales del estado u_\downarrow o "down", y la inferior, los u_\uparrow o "up". Las líneas horizontales son el parámetro de salto V , y las verticales representan la interacción que mezcla los estados up y down.

Como se nombró anteriormente, estamos interesados en el cálculo de la transmitancia a través de este sistema utilizando las Funciones de Green. Para encontrarlas, necesitaremos describir al Hamiltoniano del sistema en forma matricial.

Para empezar, pensaremos en cada dímero vertical como un pequeño bloque caracterizado por el índice de sitio. Cada bloque se encuentra conectado a sus vecinos, por izquierda y derecha. Si definimos una base, llamada base de sitios, de la siguiente forma, entonces el Hamiltoniano se escribe:

$$\psi = \begin{pmatrix} \vdots \\ u_{-1}^\uparrow \\ u_{-1}^\downarrow \\ u_0^\uparrow \\ u_0^\downarrow \\ u_1^\uparrow \\ u_1^\downarrow \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \dots & & & & & & \\ & E_{-1}^\uparrow & -V_y & -V & 0 & 0 & 0 \\ & -V_y & E_{-1}^\downarrow & 0 & -V & 0 & 0 \\ & -V & 0 & E_0^\uparrow & -V_y & -V & 0 \\ & 0 & -V & -V_y & E_0^\downarrow & 0 & -V \\ & 0 & 0 & -V & 0 & E_1^\uparrow & -V_y \\ & 0 & 0 & 0 & -V & -V_y & E_1^\downarrow \\ & & & & & & \dots \end{bmatrix}$$

donde V es el hopping del sistema, $E_i^{\uparrow,\downarrow}$ representa la energía en el sitio i para el estado $|\uparrow\rangle$ ó $|\downarrow\rangle$, y V_y la interacción de mezcla entre ambos estados. Nótese la naturaleza tridiagonal en bloques de la matriz \mathbf{H} .

3.3 Cálculo de la transmitancia en el régimen coherente

En este capítulo nos enfocaremos en entender el comportamiento del transporte a través del nanohilo ferromagnético en el régimen de una pared de dominio donde los efectos del ambiente pueden ser despreciados. Para ello se dará una explicación de las herramientas teóricas utilizadas para el cálculo de magnitudes relevantes para el transporte electrónico, tales como la transmitancia.

3.3.1 Régimen Dispersivo

El cálculo de las transmitancias en este régimen fue estudiado con anterioridad en [GWJS04] implementando el método desarrollado en [PM01]. En este trabajo se considera el transporte a través de hilos ferromagnéticos de sección finita. La transmitancia se ve descompuesta en canales paralelos y ortogonales a la dirección de avance de la pared de dominio.

La energía total de una partícula, viene dada por

$$E_F = E_{\parallel} + E_{\perp}$$

donde E_{\perp} es la energía en los canales ortogonales y E_{\parallel} la de los paralelos. Debido a que las rotaciones en el espín se dan en la dirección paralela, la energía que nos interesa considerar es

$$\varepsilon = E_{\parallel} = E_F - E_{\perp}$$

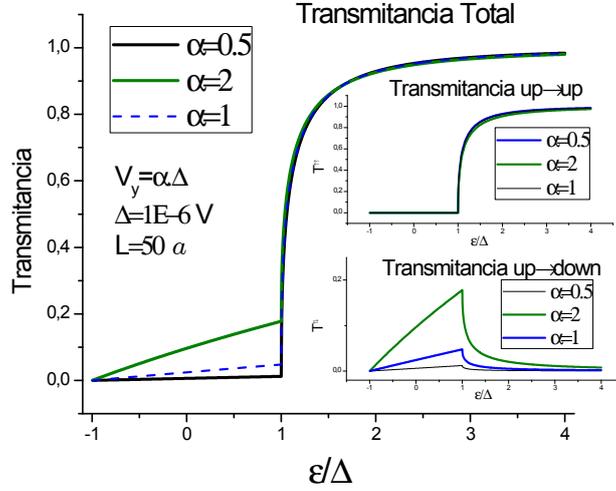


Figura 10: Se muestra la transmitancia total T , en caso de una corriente de espín incidente polarizada en el estado $|\uparrow\rangle$. $T^{\uparrow\uparrow}$ y $T^{\uparrow\downarrow}$ denotan la transmitancia desde el estado $|\uparrow\rangle$ hacia el $|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$ respectivamente. Tres casos son presentados, una pared de Néel ($\alpha > 1$), una "head to head" ($\alpha < 1$) y una isotropica ($\alpha = 1$).

De esta forma, se reduce el problema a un caso unidimensional con una partícula con energía ε , cuyo valor es menor a la energía de Fermi total y típicamente $\varepsilon \approx \Delta$.

Utilizando el método de las funciones de Green de [PM01] calculamos la transmitancia en función de la energía, con todos los demás parametros fijos.

Nuestros resultados coinciden con los hallados en [GWJS04] para el caso $\alpha = 1$.

Recordemos que habíamos nombrado a los estados paralelo ($|\uparrow\rangle$) y antiparalelo ($|\downarrow\rangle$) según su orientación en $z = -\infty$. En la figura 10 se grafica la transmitancia total y las transmitancias dependientes de la orientación del espín en el nanohilo en función de la energía. Notemos que en todos los casos la transmitancia total toma valores pequeños si la energía es menor a Δ . Principalmente en el caso $V_y < \Delta$ decae dramáticamente hasta valores muy pequeños. En el caso contrario, $V_y > \Delta$, el valor es pequeño. Si analizamos las transmitancias dependientes del espín después de la barrera, vemos que $T^{\uparrow\uparrow}$ es no nula sólo en caso que $\varepsilon_f > \Delta$ y no presenta variaciones significativas según el tipo de pared en cuestión. $T^{\uparrow\downarrow}$ presenta un comportamiento creciente en forma lineal según aumenta la energía hasta el punto en que $\varepsilon_f = \Delta$. Superado ese valor, presenta un decaimiento hasta cero.

Podemos aprovechar esta propiedad asimétrica del transporte para generar

una corriente de salida que sea selectivamente polarizada en la orientación del espín. Se define a la polarización de la corriente de espín de la siguiente forma:

$$P = \frac{I^\uparrow - I^\downarrow}{I^\uparrow + I^\downarrow}$$

La intensidad está relacionada con la transmitancia mediante la fórmula de Landauer-Bütiker que introduce un factor de proporcionalidad

$$I^{\uparrow,\downarrow} = e/h \cdot \Delta\mu \cdot T^{\uparrow,\downarrow}$$

Por lo tanto:

$$P = \frac{T^\uparrow - T^\downarrow}{T^\uparrow + T^\downarrow}$$

donde T^\uparrow y T^\downarrow son las transmitancias con estado final up o down,

$$T^\uparrow = T^{\uparrow\uparrow} + T^{\uparrow\downarrow}$$

$$T^\downarrow = T^{\downarrow\downarrow} + T^{\downarrow\uparrow}$$

y P es la polarización de la corriente de espín.

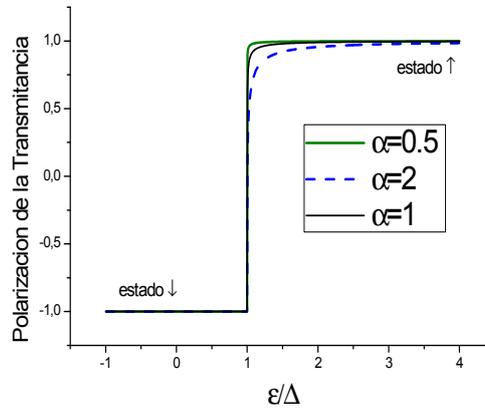


Figura 11: Polarización de la corriente de espín en función de la energía del electrón, cuya orientación inicial es \uparrow .

En la figura 11 se muestra la polarización para los tres casos. Las tres curvas tienen la característica común de que la corriente de salida está completamente polarizada en una orientación de espín que cambia de acuerdo a

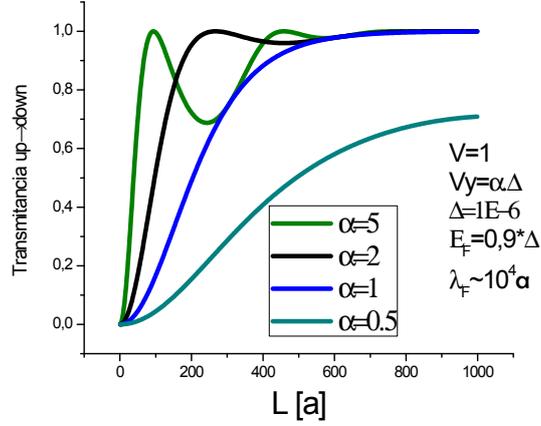


Figura 12: Transmitancia up→down en función de la longitud efectiva de la pared de dominio para distintos parámetros de anisotropía α .

cual sea el nivel de la energía de Fermi, aunque sólo el caso con $\alpha = 2$ tiene una transmitancia $T^{\uparrow\downarrow}$ no despreciable para valores de $\varepsilon_f < \Delta$.

Pensaremos en analizar cómo cambia la transmitancia de acuerdo a la longitud de la barrera, L . En cierta forma podemos ver a L como un parámetro que caracteriza la adiabaticidad o diabaticidad de la transmisión. Si L es muy grande, un electrón que entrase a la barrera, rotaría su orientación de espín lentamente hasta orientarse en el sentido opuesto al inicial. Por otro lado, si la barrera es abrupta, esperamos que se produzca una reflexión mayoritariamente, si $\varepsilon_f < \Delta$, ó una transición diabática si $\varepsilon_f > \Delta$. Esta última podría ser descrita por la fórmula de Landau-Zener, que calcula la probabilidad de tener una transición diabática entre estados de un sistema de dos niveles en un cruce evitado. La misma, como dijimos anteriormente, viene dada por

$$T_{\uparrow\uparrow} = \exp\left(-2\pi \frac{|V_{1,2}|^2}{\hbar (dE/dt)}\right)$$

donde

$$\frac{dE}{dt} = \left(\frac{dE}{dq}\right) \left(\frac{dq}{dt}\right) = \frac{\Delta}{L} \cdot v_f$$

En la figura 12 se muestra la transmitancia en función de la longitud de la barrera para cuatro valores de α .

Como habíamos previsto, se ve que la transmitancia no es significativa si el cambio en la pared de dominio es abrupto, mientras que es completamente transmitido cuando la barrera es amplia.

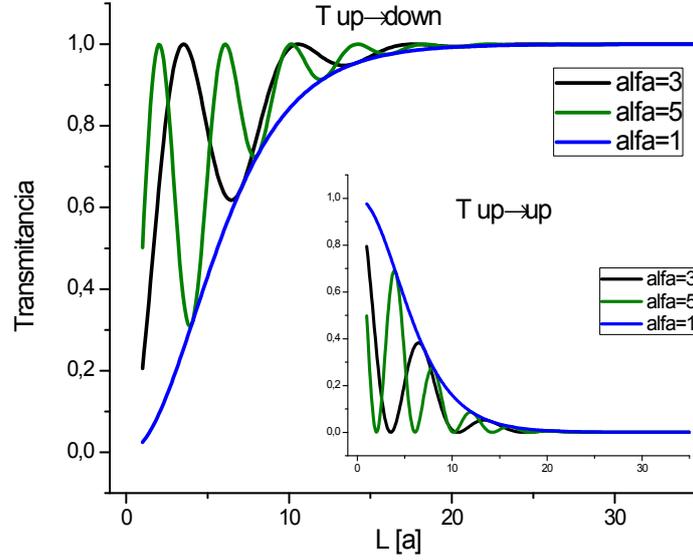


Figura 13: Transmitancias up→down(principal) y up→up(inset) en función del largo de la barrera para distintos parámetros de anisotropía.

Se ve que para altos valores de α aparecen oscilaciones de la transmitancia en función de la longitud de la barrera.

3.3.2 Régimen Balístico

Consideraremos la situación ideal de metales ferromagnéticos unidimensionales en los que la energía de Fermi sólo toma el valor $E_f = 2V$ situado en el centro de la banda. En este caso, nos encontramos en el centro de la banda, donde la relación de dispersión toma forma aproximadamente lineal y el cuasimomento de la onda queda bien definido por la relación de dispersión, obteniendo $k_F = \frac{\pi}{2a}$. El desdoblamiento de energías Zeeman es típicamente pequeño comparado con el ancho de banda, igual a $4V$, siendo del orden de $10^{-1}V$ o más pequeño.

Estaremos interesados en analizar la dependencia de la transmitancia con la longitud de la barrera, el cual será el parámetro de control para identificar los regímenes en los que el pasaje a través de la misma se realiza en forma diabática o adiabática. Compararemos los resultados obtenidos con los predichos por la fórmula de Landau-Zener.

Las oscilaciones están presentes también en este régimen, más aún, son más notables que en el régimen dispersivo. Vemos que la longitud característica de las oscilaciones es más pequeña que en el régimen dispersivo, llegando a un valor estacionario de la transmitancia en longitudes más cortas, hasta un orden de magnitud menor. Éstas son suprimidas cuando el valor de $\alpha = 1$. Puede verse que la suma de las transmitancias es igual a la unidad. Esto nos indica que no hay reflexiones debido a la barrera. Puede entenderse considerando que la energía de Fermi queda muy por encima del desdoblamiento Zeeman, por lo que la barrera resulta solo una pequeña perturbación a la dinámica del electrón. Además la forma elegida para modelar la pared de dominio tiene la característica de que todas sus derivadas son continuas en el espacio. Esto limita posibles reflexiones de la onda.

Para entender mejor a estas oscilaciones, incorporaremos otro ingrediente a la descripción del problema: el tiempo. Nos interesará analizar la dinámica de los paquetes de onda moviéndose a través de las paredes de dominio.

Capítulo IV

4 Transporte Dinámico

Un enfoque diferente del problema puede ser tomado si analizamos el comportamiento de las partículas dentro del nanocable ferromagnético. Para ello debemos servirnos de una nueva herramienta. Debemos diseñar un paquete de ondas y analizar su evolución dentro del sistema que se desea estudiar.

4.1 La Expansión de Trotter-Suzuki

La evolución temporal de un paquete de onda se lleva a cabo mediante el operador $U = \exp(iHt/\hbar)$, en caso de que el Hamiltoniano sea independiente del tiempo. Este Hamiltoniano puede ser descompuesto en una suma de Hamiltonianos más simples,

$$H = H_1 + H_2$$

Cada uno de los H_i representa operaciones entre dos sitios de la descripción Tight Binding. La expansión de Trotter-Suzuki nos sugiere que

$$\exp\left(\frac{i(H_1 + H_2)\delta t}{\hbar}\right) \simeq \exp\left(\frac{iH_1\delta t}{\hbar}\right) \cdot \exp\left(\frac{iH_2\delta t}{\hbar}\right)$$

En esencia, la evolución temporal puede ser lograda por la aplicación intermitente de muchos operadores unitarios de evolución conformados por Hamiltonianos simples en lugar de la aplicación continua del operador evolución completo.

4.2 Implementación de la evolución cuántica

Examinaremos algunas generalidades de este método al ver la evolución de paquetes de onda en sistemas conocidos. Primero, veremos la evolución de un sistema de dos niveles representado en un modelo Tight Binding por dos sitios conectados. Se analizará la evolución coherente de un paquete deltiforme en este sistema. Se pretende observar oscilaciones de Rabi, con un período relacionado con el término cinético V del sistema. Por otra parte, deseamos analizar la capacidad de la propuesta dinámica para reproducir el cálculo de magnitudes tales como la transmitancia, en comparación con los resultados de cálculos de estado estacionario. Para ello deberemos definir una forma para medir la transmitancia en estos sistemas.

4.2.1 Sistema de dos Niveles.

Nos interesa analizar las propiedades de la evolución coherente utilizando el método de Trotter-Suzuki en un sistema que presenta un hamiltoniano de la forma:

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & -V_{1,2} \\ -V_{2,1} & E_2 \end{bmatrix}$$

En un modelo Tight Binding el dímero luce así:

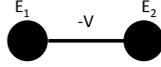


Figura 14: Representación Tight Binding del sistema de dos niveles como un dímero.

El seccionamiento del hamiltoniano será tal que separe la parte diagonal de la no diagonal, resultando:

$$H_1 = \begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix} \text{ y } H_2 = \begin{bmatrix} 0 & -V_{1,2} \\ -V_{2,1} & 0 \end{bmatrix}$$

La evolución temporal de un estado dado por $|\psi(t)\rangle$ debida a este hamiltoniano es

$$|\psi(t+dt)\rangle = \exp\left(-\frac{iHdt}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle$$

Usando la expansión de Trotter-Suzuki,

$$|\psi(t+dt)\rangle \approx \exp\left(-\frac{iH_1dt}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iH_2dt}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle$$

El efecto de $\exp\left(-\frac{iH_1dt}{\hbar}\right)$, como se muestra en el Apéndice C, es producir un **cambio en la fase** de la amplitud de probabilidad en el sitio.

Por otro lado:

$$\exp\left(-\frac{iH_2dt}{\hbar}\right) = \cos\left(\frac{Vdt}{\hbar}\right) \cdot \mathbf{I} + i \cdot \sin\left(\frac{Vdt}{\hbar}\right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_x$$

Como puede verse, este operador es el responsable de la migración de la población de un estado a otro.

Haremos una prueba en que el estado inicial estará definido, digamos $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Es decir, toda la polarización inicial está concentrada en el primer sitio. Las energías de sitio serán ambas iguales a cero y el hopping $V = 1$, y definirá el sistema de unidades. Se buscará medir la polarización en el sitio 1 a cada instante de tiempo donde la polarización es

$$P(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle$$

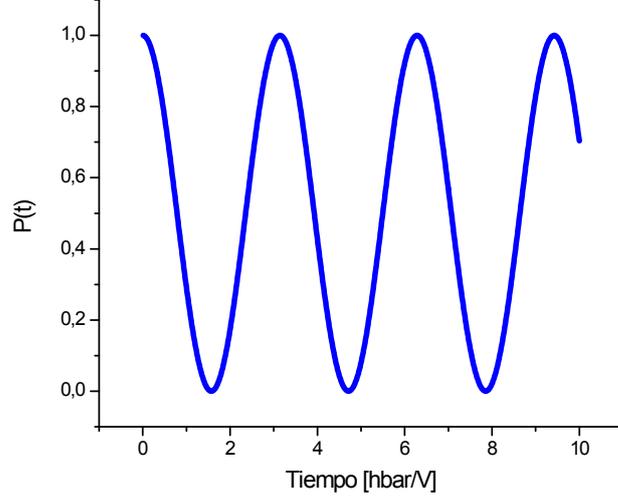


Figura 15: Las oscilaciones de la probabilidad en el sitio $|1\rangle$ en función del tiempo muestran una curva de nutación.

Esta medición describe una curva de nutación del espín conducente a las oscilaciones de Rabi en la polarización electrónica.

La frecuencia característica en que se producen las oscilaciones viene dado por $\omega = 2\frac{V}{\hbar}$. Es decir, el período de oscilación es $T = \pi\frac{\hbar}{V}$

El valor medio de la cantidad P , es $\langle P \rangle = \frac{1}{2}$, ya que la polarización oscila entre ambos niveles, ya que no son autoestados.

4.2.2 Transmitancia y respuesta dinámica.

Estamos interesados en evaluar la reproducción de los resultados que encontramos con el método de estado estacionario de las funciones de Green. Esto nos dará la seguridad de que este enfoque dinámico es útil para la descripción que buscamos.

Vamos a evaluarlo en un sistema simple. Pensaremos en el diodo tunel con un estado resonante. Es un sistema relativamente sencillo y contiene los suficientes ingredientes que queremos analizar.

En un modelo Tight Binding, el sistema consiste de dos cadenas semi-infinitas unidas, mediante un parámetro de salto más pequeño, que modelará las barreras de potencial, a un sitio con energía que puede ser diferente.

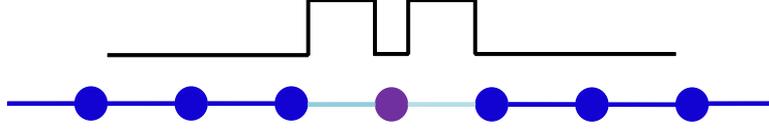


Figura 16: Esquema en el que se muestra el sistema de la doble barrera de potencial en la representación de sitios del modelo Tight Binding.

Primero calcularemos el valor de la Transmitancia en función de la energía mediante el uso de las funciones de Green.

Decimando las cadenas semi-infinitas en el sitio central, obtendremos para la expresión de la función de Green

$$G^R = \frac{1}{\varepsilon - E_r - \Sigma_L(\varepsilon) - \Sigma_R(\varepsilon)}$$

donde $\Sigma_L(\varepsilon)$ y $\Sigma_R(\varepsilon)$ son las correcciones a la energía de sitio por haber decimado las cadenas semi-infinitas por izquierda y derecha respectivamente. La transmitancia viene dada por la fórmula de Fisher y Lee:

$$T(\varepsilon) = 2\Gamma_L(\varepsilon) |G^R|^2 \cdot 2\Gamma_R(\varepsilon)$$

Esta cantidad nos servirá para comparar con los resultados obtenidos mediante la evolución dinámica de los paquetes de onda.

Aparece una pregunta en forma natural: ¿Cómo vamos a medir la transmitancia usando el método de Trotter Suzuki? Dado que tenemos una descripción Tight Binding del sistema. Para la descripción dinámica no es necesario que las cadenas sean semi-infinitas, sino suficientemente largas como para definir un paquete de onda en ellas. es decir, el estado inicial de todo el sistema estará definido y normalizado. Este será un paquete de onda con forma gaussiana. La relación de fase relativa entre dos sitios consecutivos viene fijada por el momento $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ que querramos que tenga la onda en la forma $\exp(ika)$. Recordemos que el momento y la energía de la onda están ligados mediante la relación de dispersión $\varepsilon(k) = U_0 + 2V(1 - \cos(ka))$.

Supongamos que definimos el paquete a la izquierda de la doble barrera con un momento hacia la derecha.

Luego de dejarlo evolucionar durante un tiempo suficiente, se observan las reflexiones y transmisiones, que dividen al paquete en dos partes: una que viaja hacia la derecha habiéndose transmitido, y otra que viaja hacia la izquierda por acción de una reflexión. Podemos ver esto en la figura 18. Se muestra la trayectoria de la partícula a lo largo del tiempo y el espacio. Como vemos, en $x = 500a$ el paquete se encuentra con la doble barrera. Aquí



Figura 17: Representación del paquete de ondas con momento definido en dirección hacia la doble barrera. Las regiones azules son las "extensiones" que se agregan al sistema con la finalidad de hallar la transmitancia en forma de una integral.

se producen las reflexiones y transmisiones, para luego tener como resultado dos paquetes de onda, uno viajando hacia la izquierda, el paquete reflejado, y otro hacia la derecha, el transmitido. La cantidad de función de onda que escapa hacia cada extremo, representará la transmitancia o la reflectancia. Para medirlas usaremos la definición

$$T = \int_{\text{semi-espacio}} |\psi(x)|^2 dx$$

donde el intervalo de integración es el lado izquierdo del sistema, para calcular R , y el lado derecho para T . Estas mediciones no deben realizarse a un tiempo arbitrario, sino cuando ambos paquetes estén bien resueltos uno de otro. Para algunos sistemas puede ser conveniente el agregado de extensiones a ambos lados. Es decir, extender cadenas de sitios a ambos lados para dar tiempo suficiente para que los paquetes queden bien resueltos. Con esto se tiene el objetivo de evitar que la onda se refleje contra los bordes externos ya que incidiría nuevamente en la región de las barreras de potencial.

Compararemos las transmitancias obtenidas por ambos métodos. En la figura 19 se muestra la transmitancia para este sistema. Representamos con líneas la transmitancia teórica, obtenida mediante las funciones de Green, y con cuadrados, la transmitancia calculada numéricamente con nuestro modelo dinámico. Puede verse, que ambas transmitancias están en perfecto acuerdo en los dos casos con el parámetro V_L más grande. Conforme V_L se hace más pequeño, el ancho del pico se angosta. En este caso, la transmitancia obtenida por evolución dinámica presenta un pico más ancho y menos alto. Entonces concluimos que hay un límite en el que los picos no pueden ser resueltos con suma precisión, por lo que a partir de ahora seremos cuidadosos de estar siempre dentro de los límites de validez del método.

Se observa que el pico se encuentra ensanchado y más bajo del valor unitario ideal. Esto es debido a que el principio de incertidumbre comienza a jugar un rol activo en los resultados. El paquete de onda que hemos definido

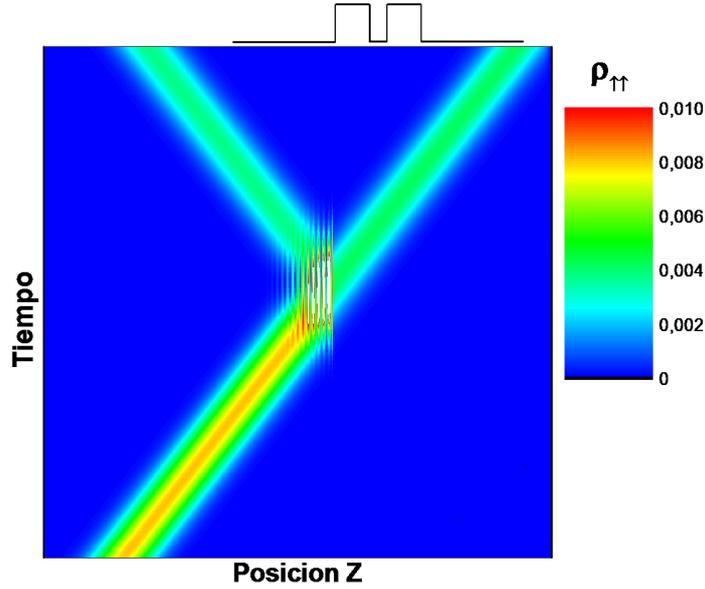


Figura 18: Se muestra la trayectoria en el espacio-tiempo de un paquete de ondas de forma Gaussiana que incide sobre la doble barrera produciendo un fenómeno de reflexión y transmisión simultáneamente. En la región donde se sitúa la barrera puede verse cómo la onda reflejada produce interferencia con la onda incidente.

tiene un ancho dado Δx . El principio de incerteza nos dice que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Sabemos que $\Delta p = \hbar \Delta k$ y mediante el uso de la relación de dispersión podemos relacionarlo con la incerteza en energía.

$$\frac{\Delta \varepsilon}{\Delta k} = 2Va \cdot \text{sen}(ka) \leq 2Va$$

escrito de otra forma vemos que

$$\Delta k \geq \frac{\Delta \varepsilon}{2Va} \implies \Delta x \frac{\hbar \Delta \varepsilon}{2Va} \geq \frac{\hbar}{2} \implies \boxed{\Delta x \Delta \varepsilon \geq Va}$$

Esta forma de escribir al principio de incerteza relaciona dos magnitudes muy frecuentes en nuestro análisis: una incerteza en la posición se traduce en una incerteza en energía. El hecho de que la energía no esté bien definida es lo que nos permite entender el ensanchamiento de los picos de transmitancia.

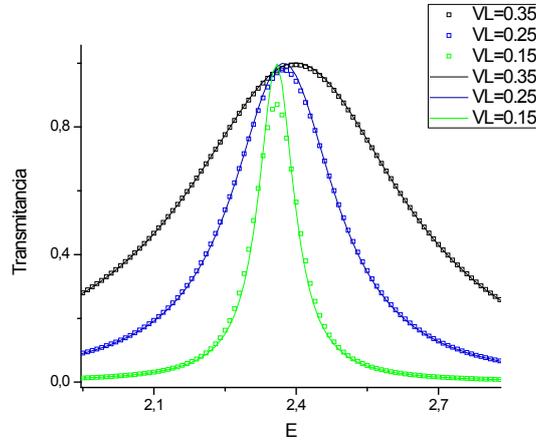


Figura 19: Se compara la transmitancia hallada por el método de las funciones de Green(línea) con las que obtenemos con el Método Dinámico(puntos cuadrados).

Cuando definimos la energía de la onda, o su momento, tan solo estamos dando el valor medio de dicho observable. La energía o momento correctos son una distribución que se encuentra realizando transformada de Fourier al paquete. En ambos casos, el ancho de la distribución resultante es inversamente proporcional al ancho del paquete. Por lo tanto, cuando se desea obtener una respuesta del sistema en función de la energía o momento, para cada punto representaría un promedio entre esa distribución. Por el momento dejamos este punto para un análisis ulterior.

Por ahora, esta forma de definir la transmitancia es adecuada ya que los tiempos en que los paquetes que viajan a ambos lados logran definirse como transmitidos ó reflejados, son relativamente cortos. Como ya anticipamos, estaremos interesados en tratar el transporte en regímenes decoherentes. En este caso, los efectos de la decoherencia harán que necesitemos más tiempo para poder medir qué es lo que se transmite y qué es lo que se refleja. Esto conllevará un aumento en el tamaño del sistema al necesitar sitios agregados como extensiones y por lo tanto, mucho más costo computacional. Es por eso que nos vemos en la necesidad de definir una forma equivalente para medir la transmitancia, pero evitándonos extender el sistema conforme aumenta el tiempo de cálculo.

La propuesta que surgió fue la de agregar al sistema unas "Regiones de Absorción" en sus extremos. Estas regiones deben cumplir ciertos requerimientos. Primero, no deben generar reflexiones cuando la onda entra en estas

regiones. Es decir, la transición entre el sistema y la región de absorción debe ser suave para garantizar esta propiedad. Tampoco debe haber reflexiones mientras la onda se encuentra dentro de dicha región. Por otra parte, debemos asegurarnos que **todo** paquete de ondas que ingresa sea absorbido antes de llegar al borde.

La absorción se va a lograr reduciendo gradualmente la amplitud de probabilidad sitio a sitio.

$$\tilde{\psi}_j = \sqrt{1 - p_j} \cdot \psi_j$$

donde ψ_j representa la amplitud de probabilidad en un sitio j en cada instante de tiempo, el cual está dado por $t = n \cdot \delta t$ con n entero. El parámetro p_j también depende del sitio en cuestión.

La transmitancia quedará definida como una sumatoria sobre todas las absorciones realizadas en cada sitio del espacio, en cada intervalo de tiempo. Es decir

$$T = \sum_{j,t} p_j |\psi_{j,t}|^2$$

De las condiciones que pedimos nos damos cuenta que p debe ser nulo en el comienzo de la región de absorción, para garantizar una transición suave. Con el mismo objetivo, nos interesa que la variación de p en el inicio de la absorción sea lento. Utilizando la relación más simple que mezcla estos elementos, propondremos que p dependa cuadráticamente con la posición dentro de la región de absorción. El valor que debe tomar p en el final de región será 1, de esta forma nos garantizamos que la absorción sea completa. Por ejemplo, para la zona derecha de absorción que se muestra en la figura 20,

$$p = \frac{(n - n_c)^2}{(N_{final} - n_c)^2}$$

donde n es el índice de sitio, n_c el índice donde comienza la zona de absorción y N_{final} el máximo valor de que puede tomar n . Vemos que al comenzar la zona de absorción, $p = 0$. Luego, el crecimiento de p es suave hasta tomar el valor de $p = 1$, cuando $n = N_{final}$, es decir en el borde de la región.

Tenemos que ver si esta forma de medir la transmitancia nos sirve. Para ello compararemos los resultados obtenidos integrando la función de onda en la extensión del sistema con los provenientes de esta nueva propuesta de la absorción. Utilizaremos un sistema simple y ya conocido. Vamos a usar la doble barrera.

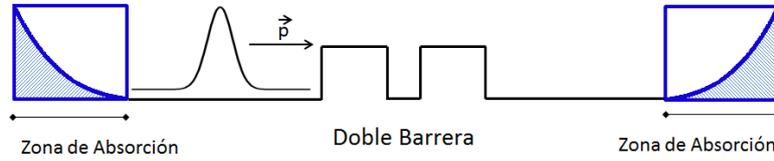


Figura 20: Se muestran las regiones de absorción (cuadrados azules) en los extremos del sistema de la doble barrera. Serán evaluadas como método para medir la transmitancia.

Las zonas sombreadas en azul, en la figura 20, representan nuestras regiones de absorción.

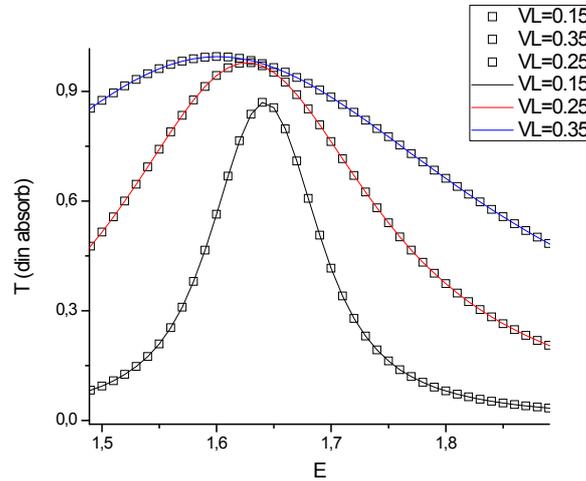


Figura 21: Comparación de la transmitancia medida en la doble barrera mediante las "zonas de extensión", hallando la transmitancia por integración (líneas), con la obtenida mediante las "regiones de absorción" para tres barreras diferentes.

En el gráfico se muestra la transmitancia medida por ambos métodos. Las líneas representan la transmitancia obtenida por integrar sobre las extensiones del sistema, mientras que los cuadrados son la transmitancia obtenida con las regiones de absorción. Como puede verse ambos conjuntos de curvas se presentan en perfecto acuerdo. De estos resultados podemos inferir que la introducción de las regiones de absorción representan una adecuada estrategia para la medición de la transmitancia.

Aquí se muestra una imagen de un paquete de ondas en parte reflejado y en parte transmitido por un sistema de doble barrera con un estado resonante.

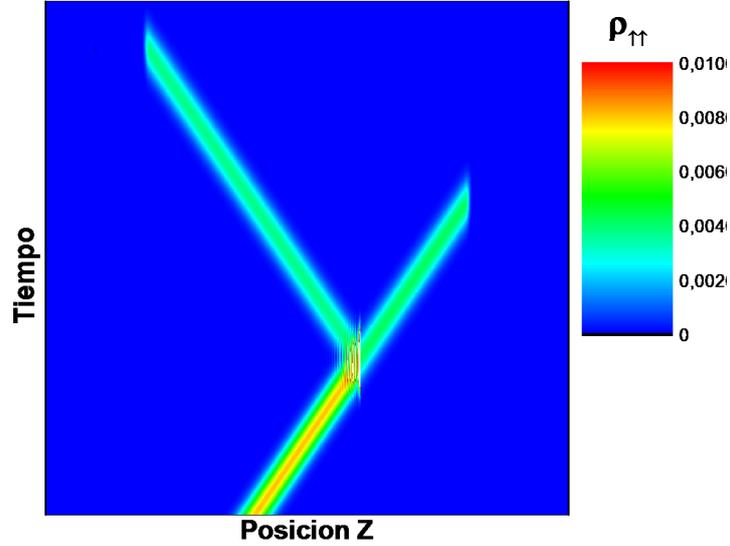


Figura 22: Se muestra al paquete de ondas "desapareciendo" en las regiones de absorción. La absorción del paquete no presenta reflexiones y es total.

Al llegar a las regiones donde se produce la absorción el paquete desaparece gradualmente sin producir reflexiones. Esta era una de las características que queríamos para asegurarnos que la transmitancia esté bien definida.

La conservación de la probabilidad total de encontrar a la partícula debe ser garantizada. Esta probabilidad viene dada por la suma de la probabilidad de encontrar a la partícula dentro del sistema, más la probabilidad absorbida en cada punta del mismo, las cuales serán identificadas como transmitancia o reflectancia de acuerdo a la región de absorción a la que hayan llegado. Es decir

$$P = T + R + P_{sis}$$

Se muestra la transmitancia, la reflectancia, la probabilidad de encontrar a la partícula dentro del sistema y la norma total en función del tiempo. Como era de esperarse, la norma total es siempre igual a la unidad.

4.3 Conduciendo electrones en el nanohilo ferromagnético

Recordemos que al utilizar las funciones de Green, en el régimen balístico principalmente, habíamos encontrado profundas oscilaciones en la transmitancia. Con esta nueva herramienta podemos analizar las oscilaciones en

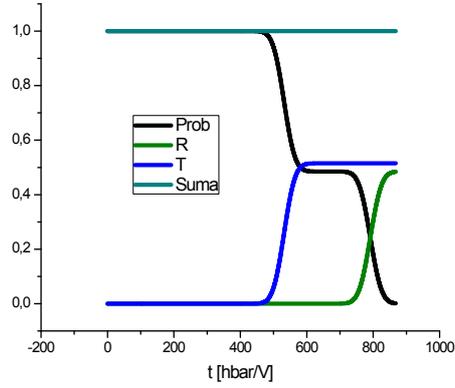


Figura 23: En el gráfico se presentan las curvas de transmisión, reflexión, probabilidad de encontrar la onda dentro del sistema y norma total en función del tiempo de evolución. Notemos que la norma total es constante e igual a la unidad.

función del tiempo.

Definamos un paquete de forma gaussiana caracterizado por un ancho Δx . En el régimen balístico, como vimos anteriormente, la energía de Fermi estaba fija en el centro de la banda, por lo que $k_F = \frac{\pi}{2}$. Entonces tenemos al paquete, que se moverá con un sentido definido, a saber, el de los x positivos. Vamos a considerar que la inyección de función de onda se hará con un estado inicial con espín paralelo al campo magnético local, que designábamos con u_\uparrow .

Primero, vamos a calcular la transmitancia en función de la longitud.

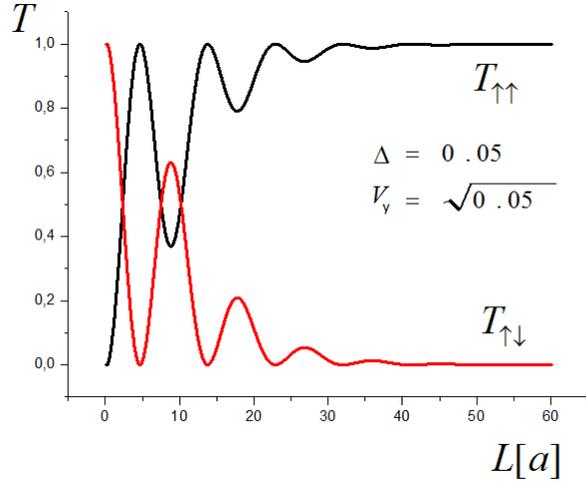


Figura 24: Transmitancia a través del nanohilo ferromagnético en función de la longitud de la pared de dominio.

Para el valor más chico de la longitud, vemos que la probabilidad de encontrar a la partícula en el estado u_{\uparrow} , en un dado tiempo, se muda al estado u_{\downarrow} y luego se divide con considerable probabilidad en ambos estados. Para $L = 14a$ vemos que se completa una oscilación y el estado final es el opuesto al inicial. Para $L = 30a$ se pueden observar varias oscilaciones entre los estados. Como esperábamos, debido a la física del Landau-Zener intrínseca del problema, cuando las paredes de dominio son extensas, el estado final está determinado a ser la continuación adiabática del u_{\uparrow} , es decir el estado u_{\downarrow} .

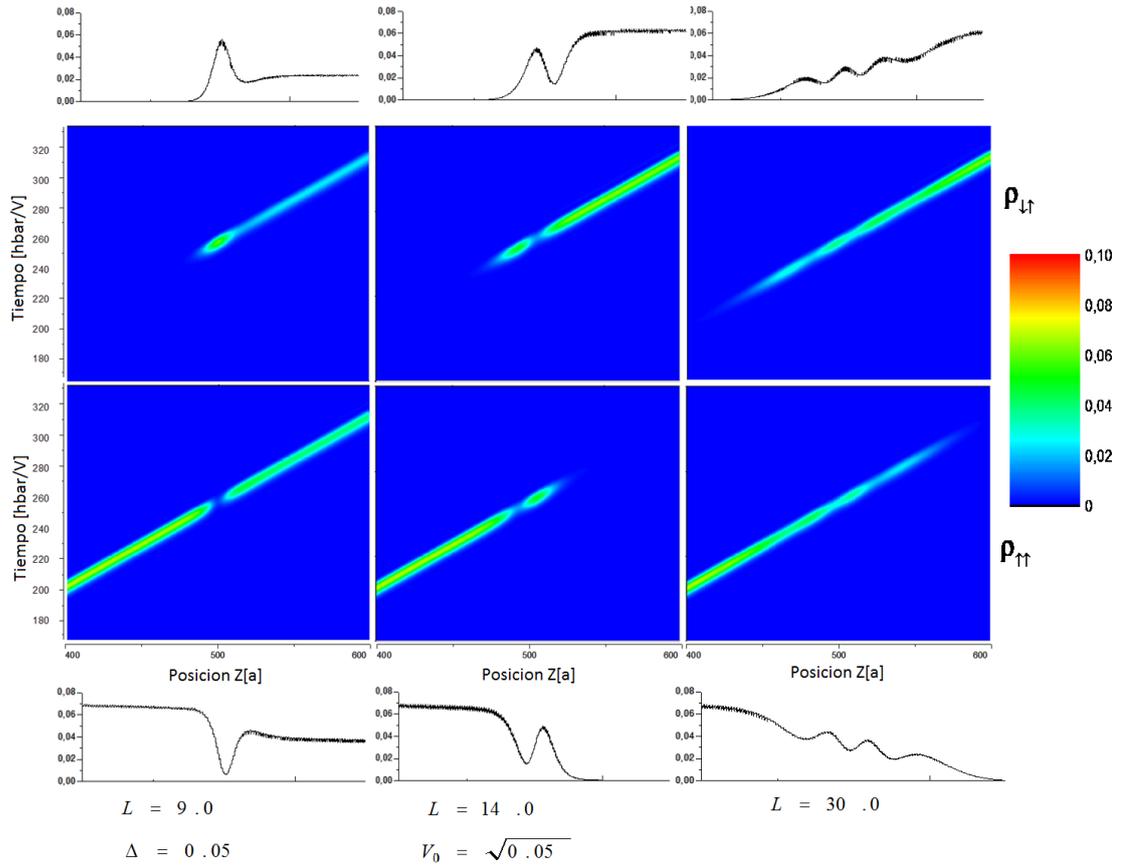


Figura 25: Graficamos la trayectoria espacio temporal para la partícula para tres valores de longitud de la barrera L . Los valores elegidos fueron $L = 9a$, $14a$, y $30a$, ya que coinciden con un máximo o mínimo en la transmitancia, según lo indicado en la figura 24. [INSETS] Probabilidad máxima de hallar al electrón en cada estado de espín.

Capítulo V

5 Modelo Dinámico para la Decoherencia

La búsqueda de una racionalización de los aspectos dinámicos del transporte en este sistema es la motivación que nos llevó a incluir el tiempo entre los parámetros de interés. No sólo podremos entender el por qué de las observaciones de los resultados estacionarios sino que además encontraremos nuevos ingredientes, tales como el principio de incertidumbre, que suman características apasionantes a la respuesta de los sistemas. Se introduce de una forma sutil, pero siempre perceptible, aportando resultados no esperados y contribuyendo al entendimiento de la naturaleza cuántica de la materia.

Por otra parte, efectos que están siempre presentes en la naturaleza incontrolada de la materia, no deben ser despreciados. Por ello, buscamos una forma de incorporar en nuestro estudio, los efectos de la decoherencia. Comenzamos tomando los elementos esenciales de la misma, tratando de entenderlos a fondo, para su posterior aplicación en un modelo, que tome los ingredientes fundamentales de la misma y nos permita hallar una descripción dinámica para sus efectos.

5.1 Antecedentes

Recordamos que el primer modelo fenomenológico para la decoherencia se desarrolló luego que Markus Büttiker desarrollara la formulación de Landauer para un sistema multi-terminal en lo que se denominó Ecuaciones de Landauer-Büttiker[IL99]. En realidad, estas son básicamente las ecuaciones de Kirchhoff usando conductancias de Landauer. La idea clave aparece al considerar un sistema con tres terminales, en el cual uno de ellos, el terminal ϕ conecta con un voltímetro. Se sabe que una medición hace colapsar la función de onda y como tal debe actuar como una fuente de decoherencia. Efectivamente, los electrones que vienen de los electrodos L y R pueden entrar en el voltímetro donde se termalizan. Sin embargo, la condición de corriente nula de un voltímetro implica que deben ser reemplazados por otros electrones que no tienen memoria de la historia de los electrones previos. La simple aplicación de las Ecuaciones de Landauer-Büttiker para un sistema que tiene conectado un voltímetro a una región interna lleva a una transmi-

tancia efectiva (es decir conductancia adimensional)

$$\tilde{T}_{RL} = \underbrace{T_{RL}}_{\text{coherente}} + \frac{T_{R\phi}T_{\phi L}}{\underbrace{T_{R\phi} + T_{\phi L}}_{\text{incoherente}}}$$

La clave para generar un modelo microscópico de la **decoherencia en estado estacionario** fue desarrollado por D'Amato y Pastawski[DP90], quienes identificaron el escape de los electrones hacia el voltímetro o su interacción con otros grados de libertad no controlados por medio de la incertidumbre cuántica ocasionada por la razón de decaimiento Γ impuesta por la correspondiente energía de renormalización. Esto fue implementado en el conocido modelo para describir los procesos decoherentes mediante incertidumbres de energía local $\eta \equiv \Gamma_\phi$. Esto se implementó en forma analítica y numérica mostrando una total consistencia con los regímenes de transporte conocidos. Es importante observar que en la aproximación de decoherencia débil, la vida media $\tau = \hbar/2\eta$ lleva a un ensanchamiento o incertidumbre η de los niveles de energía que corresponden al sistema aislado. Este ensanchamiento adopta una forma Lorentziana que se manifiesta en todas las funciones de Green. Para el caso de una densidad de estados en un nivel resonante E_0 resulta:

$$N_0(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{(\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_\phi)}{(\varepsilon - E_0)^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_\phi)^2}$$

donde al ancho natural del nivel resonante $(\Gamma_L + \Gamma_R)$, determinado por el escape hacia los electrodos, se agrega la contribución Γ_ϕ de los procesos decoherentes tales como la interacción con fonones acústicos. Expresiones similares resultan para las transmitancias y otras funciones de correlación.

Posteriormente, Pastawski pudo demostrar que tal descripción puede adoptarse también en un **formalismo dinámico**, que denominó Ecuaciones Generalizadas de Landauer y Büttiker[P91] y [P92]. Estas encuentran sustento en un formalismo de teoría de campos desarrollada independientemente por Keldysh y por Kadanoff y Baym para la mecánica cuántica de sistemas fuera de equilibrio. Sin embargo, las ecuaciones resultantes tenían forma integral y como tal resultaban de difícil implementación numérica. Dos pasos cruciales para superar tales limitaciones se hicieron en años recientes en una serie de trabajos realizados con la colaboración de Ernesto Danielli, Gonzalo Alvarez y Patricia Levstein. Los nuevos ingredientes fueron:

1) Reemplazar los efectos de memoria en la dinámica cuántica por términos de correlación entre densidad en distintos sitios [ADLP06], [ADLP07]. Esto reduce el problema a la integración tipo Trotter (paso a paso) de la

función densidad de Keldysh $G^<$ o, equivalentemente la matriz densidad ρ . Esta estrategia se implemento con éxito para resolver diversos problemas de dinámica de magnetización en sistemas de espines acoplados.

2) Una limitación que persistía es la necesidad de realizar promedio sobre realizaciones de ensamble estadístico. El tratamiento de sistemas de muchos cuerpos inspiró una solución: el uso de una única función de onda que fuese superposición, pero con fases aleatorias, de todos los estados que participan del ensamble estadístico[ADLP08]. Así, una única evolución cuántica contiene todas las historias cuánticas alternativas. Eventualmente se hace un promedio sobre unos pocos casos para eliminar interferencias espúreas.

5.2 Modelo

La decoherencia es un proceso por el cual los sistemas cuánticos dejan de exhibir sus interferencias características. Pensado en otros términos, la rotura en la correlación entre las fases de un punto del espacio y otro hace que la coherencia se degrade. Entonces, pensando en el modelo de D'Amato-Pastawski para la decoherencia en un modelo Tight Binding, un proceso decoherente en la base local implica una nueva función de onda que empieza su historia en el sitio. Estas últimas dos ideas son las que aparecen también en la propuesta tipo Quantum Jump usada en óptica cuántica. Sin embargo, para obtener observables "suaves", sería necesario la promediación de muchas historias cuánticas. Nuestra propuesta, es usar una única función de onda que contenga simultáneamente las historias coherentes previas así como la inyección de estados sin memoria en la base local. Esto llevaría a una degradación de la relación de fases relativas entre dos sitios consecutivos. En consecuencia, se propone un modelo para la decoherencia como una perturbación a la dinámica del sistema, que es afín a una descripción Tight Binding de la naturaleza.

Consideremos un sistema, en el que está definida una función de onda de cierta partícula, Ψ . Luego de un intervalo de tiempo dt , el sistema evoluciona de acuerdo al Hamiltoniano que lo gobierna. Durante este intervalo, el ambiente genera un efecto sobre la evolución, a nivel perturbativo, alterando la fase de cada sitio. Pensemos que en el intervalo dt , la probabilidad de tener un evento decoherente está dada por el parámetro p , que en términos de un tiempo total de coherencia τ_ϕ está dado por $p = \frac{dt}{\tau_\phi}$.

Si pensamos en un modelo Tight Binding, en el i -ésimo sitio se encuentra definida una amplitud de probabilidad de encontrarla, Ψ_i . Este modelo actúa sobre la amplitud de probabilidad de cada sitio reduciéndola con un factor $\sqrt{1-p}$, donde habíamos dicho que p tiene el sentido de la probabilidad de

sufrir un evento decoherente. Luego se produce una reinyección de amplitud, de tal forma que la probabilidad de encontrar a la partícula en ese sitio sea la misma, pero su fase será aleatoria.

$$\tilde{\Psi}_j = \left(\underbrace{\sqrt{1-p}}_{\text{historia coherente}} + \underbrace{r.e^{i\phi}}_{\text{inyeccion decoherente}} \right) \cdot \Psi_j$$

Donde Ψ_j representa la amplitud de probabilidad en el sitio j y el ángulo de la reinyección ϕ es uniformemente aleatorio entre $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. De esta forma se produce la degradación de la fase en cada sitio.

En nuestro modelo vamos a considerar que la probabilidad de encontrar a la partícula en el sitio debe conservarse. Esto nos impone la siguiente condición sobre $\tilde{\Psi}$:

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_j|^2 &= |\Psi_j|^2 \\ \text{Es decir} \\ |\tilde{\Psi}_j|^2 &= [(1-p) + r^2 + 2r\sqrt{1-p}\cos(\phi)] \cdot |\Psi_j|^2 \\ \text{entonces} \end{aligned}$$

$$0 = -p + r^2 + 2r\sqrt{1-p}\cos(\phi)$$

Tenemos una ecuación de segundo grado para r , y sus dos soluciones son:

$$r_{1,2} = -\sqrt{1-p}\cos(\phi) \pm \sqrt{(1-p)\cos^2(\phi) + p}$$

Esto indica que hay dos posibles reinyecciones decoherentes que conservarían la norma local. En efecto, como se ve en la figura 26, hay dos "radios de reinyección" con el mismo ángulo aleatorio ϕ que conservan la norma. Si consideramos que p es pequeño ($\ll 1$), querríamos que la reinyección sea débil, ya que la probabilidad de tener eventos decoherentes es p . Por lo tanto vamos a descartar la solución con signo negativo ya que no se anula si $p \rightarrow 0$ sino que toma el valor $r_2 = 2$. El efecto neto sobre el sitio es el cambio en la fase total que poseía. Este cambio estará caracterizado por un ángulo de desplazamiento de fase total que llamaremos β , que es el ángulo entre Ψ_j y $\tilde{\Psi}_j$. Cambiar la fase de un punto del espacio es equivalente a haber alterado la energía del sitio. Podemos darnos cuenta de este hecho analizando el sistema de dos niveles que se presenta anteriormente. La evolución en un tiempo dt de la función de onda por una cierta energía de sitio está dada por el operador $U = \exp(iE dt/\hbar)$, mientras que la corrección a la fase dada por el efecto decoherente es $\exp(i\beta)$. Esto nos indica que podemos hacer la identificación $\beta = \Delta E \cdot dt$ donde ΔE es la corrección a la energía del sitio por el efecto de la decoherencia.

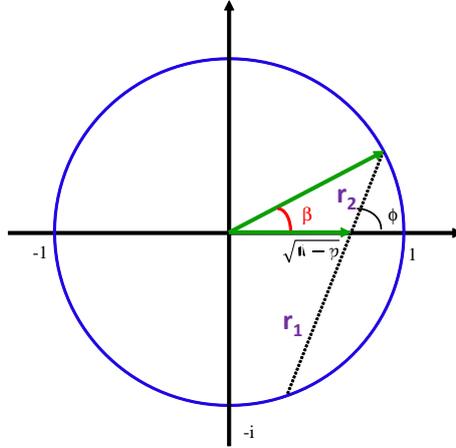


Figura 26: Círculo unidad en el plano complejo, donde se muestra la variación total de la fase de la amplitud de probabilidad en el sitio, caracterizada por el ángulo β . La reinyección decoherente tiene dos posibles valores de r que conservan la norma.

Queremos hallar la distribución probabilística de tener cierto ángulo β considerando que la reinyección decoherente tiene fase uniformemente aleatoria ϕ en el rango mencionado.

$$P(\beta) \cdot d\beta = P(\phi) \cdot d\phi = \frac{1}{\pi} \cdot d\phi$$

$$P(\beta) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{d\phi}{d\beta} = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{\frac{d\beta}{d\phi}}$$

Si utilizamos el teorema del coseno en la figura 26, tendremos:

$$r^2 = 1 + (1 - p) - 2\sqrt{1 - p} \cos \beta$$

utilizando la expresión para r^2 tenemos

$$\cos \beta = \sqrt{1 - p} + \cos \phi \cdot r \quad \text{ó}$$

$$\cos \beta = \sqrt{1 - p} + \cos \phi \cdot \left[-\sqrt{1 - p} \cdot \cos(\phi) + \sqrt{(1 - p) \cos^2(\phi) + p} \right]$$

Y algunas expresiones trigonométricas:

$$\cos \beta = \sqrt{1 - p} \cdot \sin^2(\phi) + \cos(\phi) |\cos(\phi)| \sqrt{1 - \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)} \right)}$$

Como $\phi \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right)$ entonces $|\cos(\phi)| = \cos(\phi)$

Si parámetro p es pequeño, podemos hacer algunas aproximaciones

$$p \ll 1 \Rightarrow \sqrt{1-p} \approx 1 - \frac{1}{2}p$$

$$\sqrt{1 - \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right)} \approx 1 - \frac{1}{2} \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right)$$

introduciendo esto en la expresión

$$\cos \beta \approx \sin^2(\phi) \left(1 - \frac{p}{2}\right) + \cos^2(\phi) \left(1 - \frac{1}{2} \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right)\right)$$

manipulando algebraicamente vemos que esto se reduce a

$$\cos \beta \approx 1$$

Entonces es necesario introducir un orden más en la aproximación de p pequeño

$$\Rightarrow \sqrt{1-p} \approx 1 - \frac{1}{2}p - \frac{p^2}{8}$$

$$\sqrt{1 - \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right)} \approx 1 - \frac{1}{2} \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right) - \frac{1}{8} \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right)^2$$

$$\cos \beta \approx \sin^2(\phi) \left(1 - \frac{p}{2} - \frac{p^2}{8}\right) + \cos^2(\phi) \left(1 - \frac{1}{2} \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right) - \frac{1}{8} \left(p - \frac{p}{\cos^2(\phi)}\right)^2\right)$$

$$= 1 - \frac{p^2}{8} \sin^2(\phi) - \frac{\cos^2(\phi)}{8} p^2 \left(\frac{\cos^2(\phi) - 1}{\cos^2(\phi)}\right)^2$$

$$\boxed{\cos \beta \approx 1 - \frac{p^2}{8} \tan^2(\phi)} \quad \text{Si } \phi \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$$

Hemos hallado una expresión que vincula al ángulo β con ϕ . Recordemos que nosotros estamos interesados en la derivada de β .

$$\frac{d\beta}{d\phi} = \frac{2p}{\cos^2(\phi) \sqrt{16 - p^2 \tan^2(\phi)}}$$

Con lo cual

$$P(\beta) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{\frac{d\beta}{d\phi}} = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{\frac{2p}{\cos^2(\phi) \sqrt{16 - p^2 \tan^2(\phi)}}} = \frac{1}{\pi p} (\cos^2 \phi) \sqrt{1 - \left(\frac{p}{4}\right)^2 \tan^2 \phi}$$

De tenemos que

$$\tan^2(\phi) = \frac{8}{p^2} (1 - \cos(\beta)) \quad \text{ó}$$

$$\phi = \arctan \left[\sqrt{\frac{8}{p^2} (1 - \cos(\beta))} \right]$$

Luego

$$P(\beta) = \cos^2 \left[\arctan \left(\sqrt{\frac{8}{p^2} (1 - \cos(\beta))} \right) \right] \frac{\sqrt{1 + \cos(\beta)}}{\sqrt{2\pi p}}$$

Usando

$$\cos(\arctan(x)) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}}$$

$$P(\beta) = \frac{1}{\pi} \frac{\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)}{p} \frac{1}{1 + \frac{16}{p^2} \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)}$$

Sabemos que a primer orden de aproximación $\cos \beta \approx 1$, por lo que β toma valores pequeños. Si hacemos esta aproximación en la identidad anterior y desarrollamos en serie de potencias hasta segundo orden, obtendremos:

$$P(\beta) = \frac{1}{\pi} \frac{\binom{p}{2}}{\left(\frac{p}{2}\right)^2 + \beta^2}$$

donde queda claro que el ancho de la distribución Lorentziana es

$$\Delta\beta = \frac{p}{2}$$

Esta distribución del ángulo de corrección fase total es bastante apropiada. La principal componente de la Lorentziana está en $\beta = 0$ con lo cual estamos considerando que la mayor parte de las veces, los eventos decoherentes producen una muy pequeña o nula corrección sobre la energía de sitio. Por otro lado, la integral sobre la cola de la Lorentziana no es nula. Esto nos dice que hay probabilidad no nula de que algún evento decoherente produzca un fenómeno de back-scattering, es decir, que la fase total del sitio cambie tan abruptamente, que puede generar un pequeño paquete de ondas cuyo momento sea aproximadamente opuesto al inicial.

Para nuestro modelo, entonces proponemos generalizar la distribución Lorentziana para todos los ángulos β de corrección a la energía de sitio. Podemos ver entonces que nuestra representación inicial no es la más apropiada, por lo cual la reemplazaremos por

$$\tilde{\Psi}_j = e^{i\beta} \cdot \Psi_j$$

donde β responde a la distribución

$$P(\beta) = \frac{1}{\pi} \frac{\binom{p}{2}}{\left(\frac{p}{2}\right)^2 + \beta^2}$$

El ancho de la lorentziana es $\Delta\beta = \frac{p}{2}$, y pensándolo en términos físicos,

$$\Delta\beta = \frac{dt}{2\tau_\phi}$$

$$\Delta E \cdot dt = \frac{dt}{2\tau_\phi}$$

$$\eta = \Delta E = \frac{1}{2\tau_\phi}$$

El parámetro η podría denominarse incerteza energética ya que tiene el sentido físico que aquí se muestra, una incertidumbre en la energía ocasionada por la interacción por componentes incontrolados del ambiente que producen la decoherencia .

5.3 Testeando el Modelo para Decoherencia Dinámica

5.3.1 Pruebas preliminares

Tenemos una propuesta para modelar la decoherencia que considera el efecto del ambiente producido en cada momento y la posibilidad de un back-scattering que puede ser visto como interacción con impurezas en la muestra o con fonones, efectos de la temperatura, por ejemplo.

Es necesario realizar diferentes pruebas y chequeos para verificar que el comportamiento del modelo es físicamente aceptable. Procederemos a verificar que la norma del paquete sea una cantidad conservada. Aún cuando estemos analizando eventos decoherentes, pensamos que estos actúan como una perturbación a la dinámica del paquete de ondas, por lo que la probabilidad de encontrar al paquete en el sistema que estamos estudiando siempre debe ser la unidad.

Se espera ver una dinámica del paquete que sea acorde a la descripción física que querramos dar al problema. Por ello vamos a comparar los resultados que son obtenidos con esta nueva propuesta dinámica para la decoherencia con resultados conocidos u obtenidos con otros modelos anteriores que tratan la decoherencia.

Sistema de dos niveles con decoherencia Este sistema fue previamente estudiado, así que ya conocemos algunas propiedades de la dinámica en el dímico. Ahora vamos a introducir la decoherencia con el modelo que hemos propuesto. A priori uno puede intuir que el efecto de la misma será mezclar ambos estados en una superposición uniforme.

Proponemos el siguiente experimento: Se pone toda la polarización en un estado, digamos el $|1\rangle$, y se hace evolucionar al sistema con el Hamiltoniano que ya hemos considerado. Se busca medir la polarización en el mismo sitio en cada instante de tiempo.

Uno esperaría que la polarización decaiga al valor $\frac{1}{2}$ en forma exponencial con un tiempo de vida media que esté relacionado al τ_ϕ .

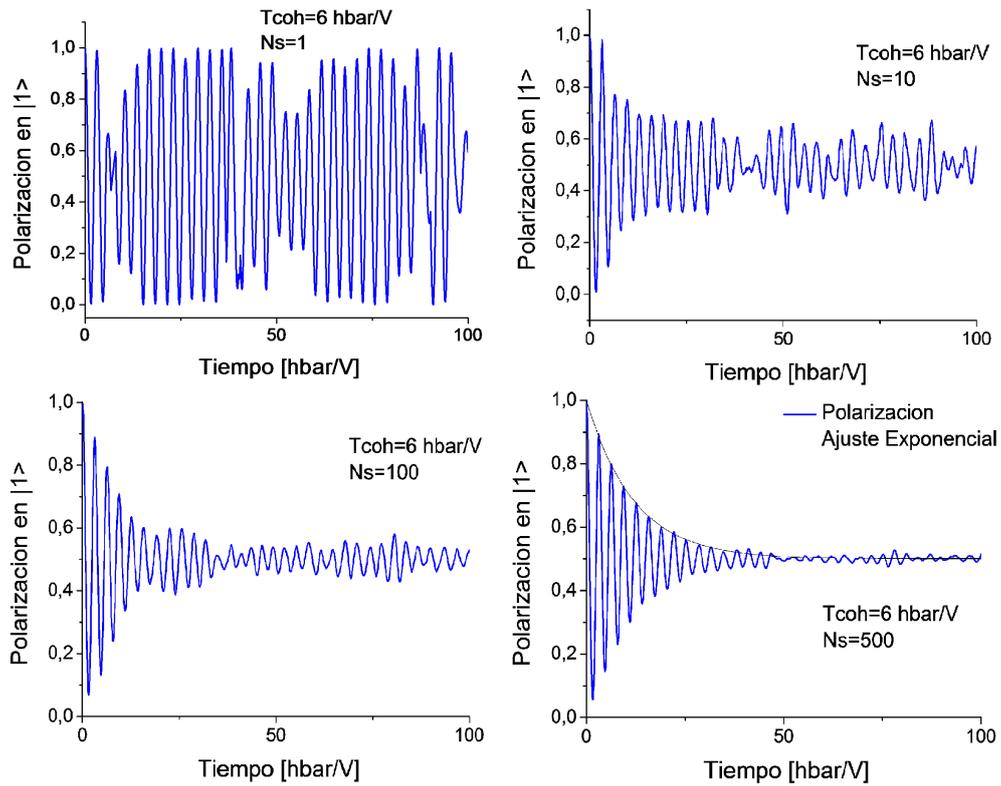


Figura 27: Se muestra la polarización en función del tiempo de evolución del sistema de dos niveles, caracterizado por $E_0 = 0V$, $V = 1$, $\tau_\phi = 6\hbar/V$, con tres números de promedios $N_s=10$, 100 y 500. En el gráfico de $N_s=500$ se presenta la curva del ajuste exponencial con una tasa de decaimiento de $2\cdot\tau_\phi$.

Puede verse en los gráficos que se hace presente el comportamiento oscilatorio que notamos con anterioridad al estudiar este sistema junto con un decaimiento de forma exponencial con una tasa igual a $2\tau_\phi$. Debido a que el modelo incluye la utilización de números aleatorios para introducir la decoherencia, necesitamos hacer varios promedios. Esto también es debido de que el sistema es pequeño, ya que solo contiene dos sitios en los que se producen eventos decoherentes. Esperaríamos que en sistemas que contengan mayor número de sitios que generan decoherencia, el sistema se "autopromedie" y no sea necesario realizar varias simulaciones.

Cabe destacar que el método es sumamente eficiente, ya que al tomar la representación cuántica del vector función de onda se gana eficiencia numérica comparado con otros métodos, como quantum jumps, que utilizan el formalismo de la matriz densidad.

Comparación con el modelo D'Amato-Pastawski Un modelo que sentó precedentes en el tratamiento de la decoherencia en sistemas mesoscópicos fue el modelo D'Amato-Pastawski. Vamos a comparar los resultados que se obtienen de ambos modelos con un objetivo doble. Por un lado, se pretende verificar que el Modelo Dinámico para Decoherencia efectivamente actúa de forma tal que introduce los efectos de la decoherencia en el sistema. Por otro lado, se quiere establecer una correspondencia unívoca entre ambos modelos y los parámetros que controlan la decoherencia entre cada uno de ellos.

Doble barrera Primero vamos a usar la transmitancia a través de una doble barrera de potencial, como se muestra en la figura 28, como parámetro de comparación.

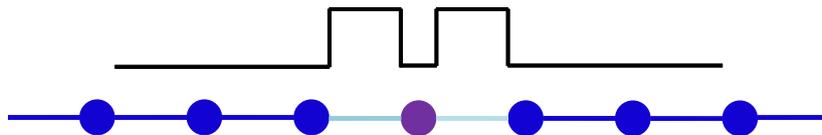


Figura 28: Sistema de doble barrera en representación Tight Binding, con parámetros $V = 1$, $V_{L,R} = 0,25V$, $E_0 = 0V$.

Ya hemos estudiado algunas de las propiedades del transporte en este sistema. Ahora vamos a utilizarlo para la medición de la transmitancia mediante la evolución dinámica decoherente.

En la figura 29 se muestran las diferentes curvas de transmitancia halladas con el Modelo Dinámico para la Decoherencia para diferentes parámetros de decoherencia η . Recordemos que $\eta = \frac{\hbar}{2\tau_\phi}$, por lo tanto $p = \frac{dt}{\tau_\phi} = \frac{2\eta}{\hbar} dt$. Al aumentar el valor del parámetro η vemos que los picos van disminuyendo su altura, es decir que la transmitancia coherente de valor igual a la unidad ya no puede ser lograda, y presentan un ensanchamiento. este es el efecto que esperábamos de la decoherencia.

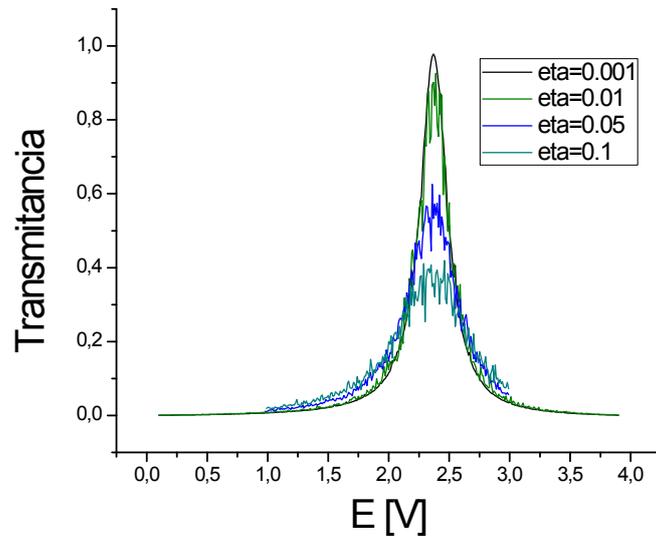
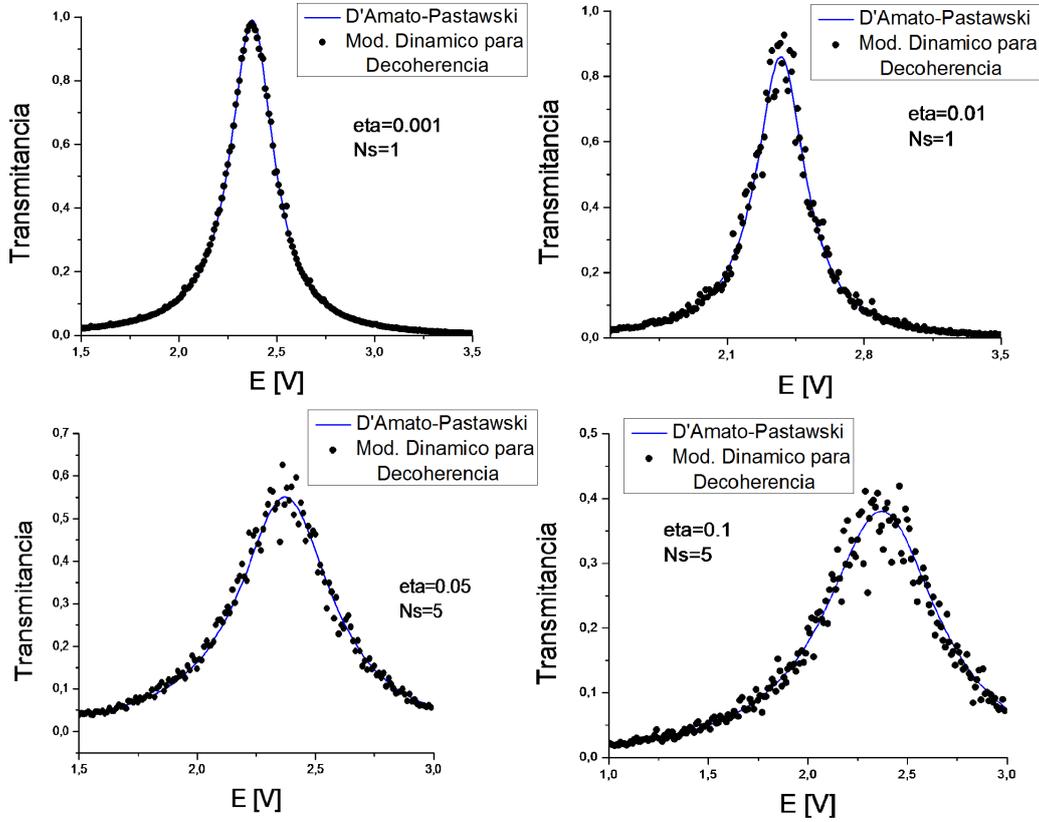


Figura 29: Se muestra la transmitancia obtenida usando el Modelo Dinámico para la Decoherencia. Nótese cómo la intensidad del máximo de la transmitancia decrece y se ensancha la distribución al aumentar la decoherencia.

Debemos compararlo con un modelo anterior, como el D'Amato-Pastawski, para establecer una relación entre los parámetros de control de la decoherencia. Para ello comparamos el resultado obtenido en forma dinámica con el predicho por el modelo DP para un mismo valor de η .



$$V=1 \quad E_r=0.35 \text{ V} \quad V_L=V_R=0.25 \text{ V} \quad E_o=0 \text{ V} \quad dt=0.01 \text{ hbar/V}$$

Se muestra la Transmittancia a través de la doble barrera con un sitio con decoherencia para los valores del parámetro de decoherencia $\eta = 0.001V$, $\eta = 0.01V$, $\eta = 0.05V$ y $\eta = 0,1V$ junto con las curvas teóricas calculadas con el modelo D'Amato-Pastawski.

Como puede verse en las figura 5.3.1, el cálculo teórico realmente ajusta los resultados obtenidos con el método dinámico. Entonces, verificamos que ambos modelos estan en acuerdo y el parámetro de control de decoherencia η en ambos modelos proporciona un mismo resultado.

A pesar de que el sistema sólo tiene un sitio en el que se producen los eventos decoherentes, el número de simulaciones que tuvieron que realizarse para reducir el ruido fue del orden $O(N_s) = 10$ o menos.

Cadena lineal con decoherencia Hemos verificado que el modelo funciona satisfactoriamente en los dos casos anteriores, pero estos tenían el ingrediente en común de poseer pocos sitios en los que se realiza la decoherencia. Quisieramos ver cómo se comporta el modelo en un sistema que contenga un amplio número de sitios decoherentes.

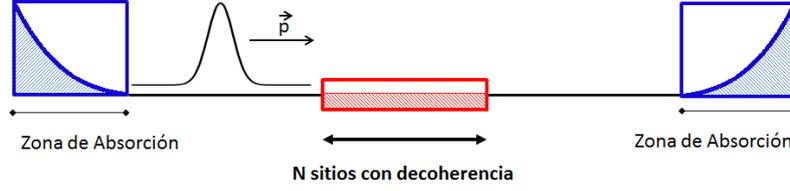


Figura 30: Esquema que muestra una cadena lineal con N sitios con decoherencia para el modelo dinámico.

Para esto pensamos en una cadena lineal con un cierto número N de sitios en los que la decoherencia es producida, como se muestra en la figura 30.

Realizamos la simulación con un número de trescientos sitios en los que se produce la decoherencia en una cadena con parámetro de hopping $V = 1$, $E_0 = 0V$, $E_F = 0V$ (centro de banda) y un η variable. también presentamos los mismos resultados pero en función de la longitud de coherencia total L_ϕ . ésta es obtenida de la siguiente forma:

$$\eta = \frac{\hbar}{2\tau_\phi}$$

Recordemos que $\tau_\phi = L_\phi/v_F$, con lo que

$$\eta = \frac{\hbar v_F}{2L_\phi}$$

Como la $E_F = 0V$ entonces, de la relación de dispersión vemos que $v_F = 2\frac{aV}{\hbar}$. Por lo tanto

$$\eta = \frac{1}{L_\phi}[aV]$$

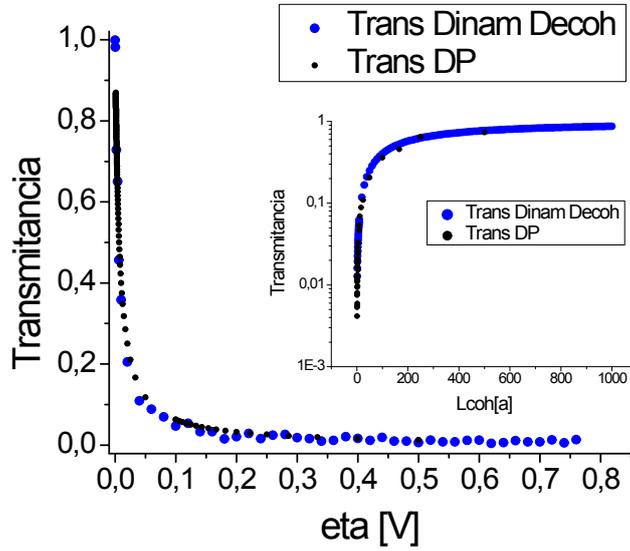


Figura 31: Transmitancia obtenida a través de una cadena lineal de trescientos sitios con decoherencia en función del parámetro de decoherencia η . [INSET] Transmitancia (en escala logarítmica) en función de la longitud de coherencia en el mismo sistema. Parámetros: $V = 1$, $E_0 = 0V$, $E_F = 0V$, $N_s = 1$.

Con este experimento podemos ver que ambos modelos arrojan resultados equivalentes.

Notemos que al existir un gran número de sitios con decoherencia no es necesario hacer promedios para disminuir el ruido ya que este es muy pequeño.

Capítulo VI

6 Propiedades del Transporte con Decoherencia en el Nanohilo Ferromagnético.

En este capítulo vamos a discutir el efecto de la decoherencia sobre las propiedades del transporte que hemos estudiado. Además compararemos los resultados obtenidos con el Modelo Dinámico para la Decoherencia con resultados de estado estacionario que utilizan el modelo D'Amato-Pastawski.

6.1 Oscilaciones de Rabi

Veamos que ocurre con las oscilaciones de la transmitancia en función de la longitud de la barrera. Las detectamos cuando trabajábamos con propagación de paquetes de onda en casos coherentes. Pero estas oscilaciones ¿permanecerán si la decoherencia está presente?

Realizaremos una simulación en la que la pared de dominio se encuentre en una región que produzca decoherencia. Vamos a considerar una zona, de ancho fijo, en la que esté definida una barrera con diferentes longitudes efectivas. Hallaremos la transmitancia decoherente en cada caso, con los dos modelos, el de estado estacionario D'Amato-Pastawski y el Modelo Dinámico para la Decoherencia. podemos ver que ambos modelos arrojan un resultado

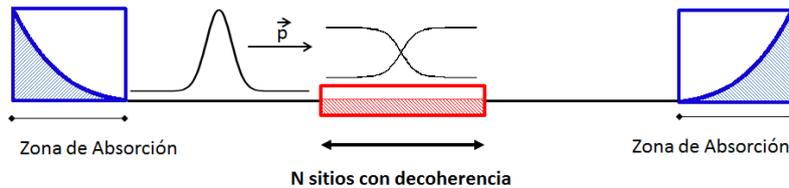


Figura 32: Esquema que representa el espacio donde se define el paquete que incidirá en la pared de dominio que está situada en una región que presenta decoherencia (rectángulo rojo). Los rectángulos azules son las zonas de absorción que se usarán para medir la transmitancia.

equivalente, mostrando que las oscilaciones de Rabi son robustas a la acción de la decoherencia. Cuando la longitud de coherencia L_ϕ no es infinita, puede verse que la transmitancia a través del sistema decae.

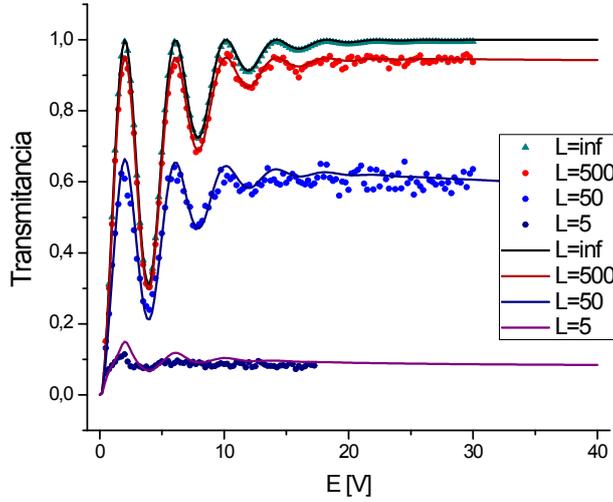


Figura 33: En el gráfico se muestran las transmitancias cuánticas a través de una región con decoherencia que comprende a la pared de dominio y parte de los cables, es decir, precisamente un total de 500 sitios con decoherencia, como se muestra en 32.

Si $L_\phi \approx L$ la transmitancia decae notablemente, pero las oscilaciones permanecen. Si $L_\phi \ll L$ el modelo DP sigue mostrando las oscilaciones. El modelo dinámico parece presentar sólo el primer máximo.

6.2 Trayectoria de una partícula con Decoherencia

Vamos a utilizar el modelo que hemos desarrollado para indagar sobre la dinámica de un electrón en el sistema ferromagnético en presencia de decoherencia. Una herramienta que podemos usar para observar algunas propiedades dinámicas son las trayectorias espacio-temporales.

Notemos primero que el efecto de la decoherencia es débil ya que no destruye el paquete de onda que teníamos inicialmente, sino que modifica su dinámica. Por otro lado, notemos que las oscilaciones de Rabi que se ven en la trayectoria coherente siguen presentes aún cuando la decoherencia está actuando, por lo que podríamos pensar que estas oscilaciones son robustas ante la acción decoherente. Por último observemos las líneas que aparecen cuando el paquete entra a la región donde hay decoherencia, y toman diversas orientaciones. Estos filamentos son pequeños paquetes de onda que se desprenden del paquete original debido a los efectos de back-scattering, que habíamos pensado que aparecerían. Notemos que las pendientes de estos paquetes dispersados, que se relaciona con la velocidad que tiene el mismo,

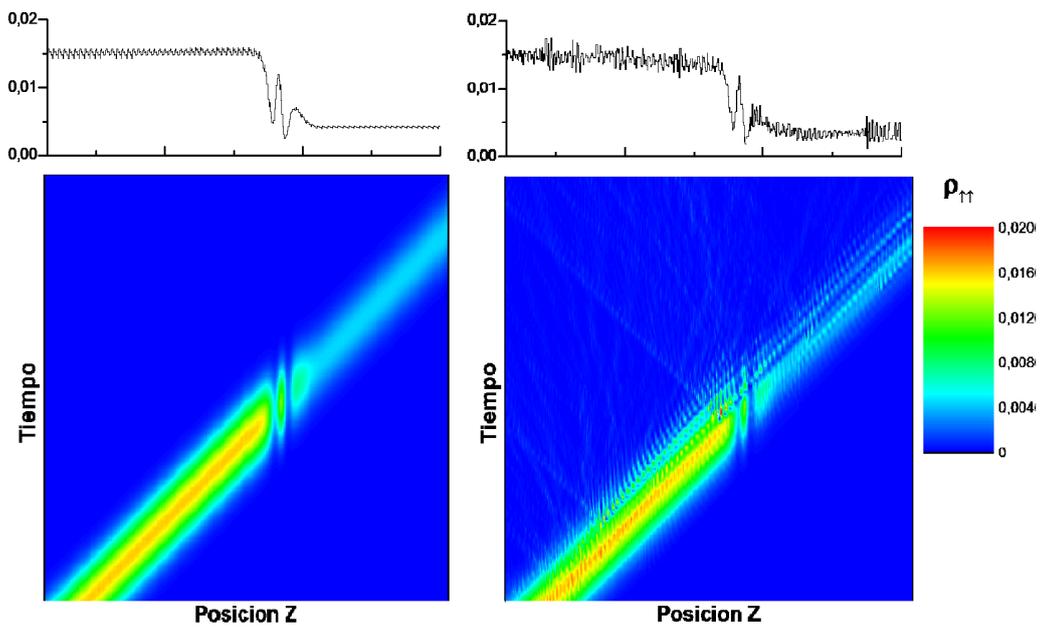


Figura 34: Se comparan las dos trayectorias espacio-temporales, el caso coherente(izquierda) y decoherente(derecha). En el caso decoherente aparecen filamentos que se ven reflejadas hacia atrás, que son pequeños paquetes de onda que se desprenden del paquete inicial con un momento que tiene dirección opuesta. Esto es lo que llamamos efectos de difusión hacia atrás o "back-scattering".

son variados, es decir, no sólo es un fenómeno de reflexión sino que la acción de la decoherencia genera ondas que se dispersan en todas las velocidades posibles.

Capítulo VII

Conclusiones

Con el objetivo de estudiar propiedades del transporte en los sistemas ferromagnéticos en presencia de paredes de dominio, hemos diseñado una amplia gama de herramientas. Cada una de estas nos permitió dar un nuevo punto de vista al problema.

La clave para el análisis es que una conductancia es una transmitancia cuántica. Por otra parte mediante la incorporación de procesos decoherentes es posible tender un puente entre el comportamiento cuántico y el clásico. Primero tratamos el problema de hallar la transmitancia cuántica en un nanohilo ferromagnético en un régimen donde los efectos de la decoherencia pueden ser despreciados. En esta etapa hicimos uso de una herramienta conocida, las funciones de Green. Esta tiene la ventaja que puede ser generalizada, mediante la teoría de campos, para situaciones con interacciones decoherentes para describir otras situaciones fuera de equilibrio.

Por un lado se analiza el caso de un ferromagneto donde sus canales de conducción pueden ser vistos como sistemas unidimensionales. En este caso los portadores pueden tener una energía cinética en la dirección paralela al transporte ε que resulta pequeña comparada con la energía magnética Zeeman involucrada ($\varepsilon \sim \Delta, \lambda_F = 10^4 a$). Es decir, la energía de la onda nos sitúa en la parte inferior de la banda, donde esta es parabólica y presenta una dispersión de la onda. Aquí se logró reproducir los resultados hallados anteriormente en [GWJS04] y se incorpora un ingrediente nuevo al considerar casos en que la rotación de la magnetización a lo largo de la pared de dominio es anisotrópica. Esta situación, que había sido obviada en los modelos original desarrollado por Cabrera y Falicov al describir paredes de Bloch, es natural al tratar nanohilos. Encontramos que si el parámetro de anisotropía $\alpha > 1$, es decir, casos en los que el campo Zeeman local se fortalece en el interior de la pared respecto de su intensidad en los dominios, entonces aparecen oscilaciones en la transmitancia en función del largo de la barrera, en el orden de los cientos de unidades de red ($L \sim 0.5\lambda_F$).

Otro régimen fue analizado al considerar un nanohilo ferromagnético en el que su energía de Fermi se sitúa en el centro de la banda ($\varepsilon_F = 2V; \lambda_F = 4a$), por lo que la relación de dispersión es lineal. En este caso, el paquete de ondas tiene su velocidad de Fermi v_F máxima. Las oscilaciones en función de la longitud de la barrera también son observadas para este régimen balístico, pero las longitudes características envueltas son un orden de magnitud menor que en el régimen dispersivo ($L \sim 2.5\lambda_F$).

Notamos que, en ambos regímenes, en casos límites, las transmisiones en el cruce evitado son bien descritas por la fórmula de Landau-Zener

$$T_{\uparrow\uparrow} = \exp\left(-2\pi \frac{|V_{1,2}|^2}{\hbar (dE/dt)}\right)$$

Es decir, cuando las barreras son extensas, es decir límite de barreras adiabáticas, el estado final es $|\downarrow\rangle$ con muy alta probabilidad ($T_{\downarrow\uparrow} \simeq 1$) siendo que el inicial es $|\uparrow\rangle$; mientras que por el contrario, si las barreras son abruptas, se produce una transmisión diabática en la que el estado más probable es $|\uparrow\rangle$. En el caso de barreras intermedias el fenómeno físico que domina son las oscilaciones en la transmitancia. Ver figuras 12 y 13. Sospechamos que estas oscilaciones, no son atribuibles a interferencias de Fabry-Perot espaciales sino que tienen su fundamento en la dinámica del portador dentro de la pared de dominio, es decir que son oscilaciones de Rabi en el espacio de proyección de espín.

Con el objetivo de explorar nuevas propiedades dinámicas, como las oscilaciones descritas anteriormente, se utilizó la evolución coherente de paquetes de onda a través del sistema utilizando como herramienta la expansión de Trotter-Suzuki. Mediante simulaciones numéricas, verificamos que observables de nuestro interés, tal como la transmitancia, podrían ser obtenidos por este medio.

Como se mostró en la figura 19, la transmitancia calculada por el método dinámico es exactamente igual a la obtenida en forma teórica con el uso de las funciones de Green, excepto para casos en que los picos de la transmitancia sean excesivamente agudos. Esto podría deberse a la inclusión de efectos derivados de la incerteza en energía que es introducida por el principio de incertidumbre. Es decir, al tener un paquete de ondas con un ancho definido, esta incerteza se traslada, vía el principio de incertidumbre y la relación de dispersión, a una incertidumbre en la energía del paquete.

En el desarrollo de esta última herramienta se abrió una interesante línea de exploración, ya que podría pensarse que cada punto en la transmitancia es una integral de convolución en un ancho energético igual al de la incertidumbre en energía, lo cual disminuiría la altura de los picos y los ensancharía, similar al efecto producido por la decoherencia. El origen físico de ambos fenómenos se ve ligado por una incertidumbre en la energía, pero el análisis completo de este fenómeno queda pendiente para un estudio ulterior.

Para realizar la medición de la transmitancia desarrollamos una estrategia que es adecuada al problema y que no tiene antecedentes reportados previamente. Esta es la incorporación de las regiones de absorción como método para calcular la transmitancia. Comparamos los resultados de esta

estrategia con la forma teórica de calcular esta cantidad, es decir integrando la función de onda en una región definida del espacio. Para ambos casos se obtuvieron los mismos resultados al evaluarlo en un sistema de doble barrera. La trayectoria espacio-temporal de la partícula demuestra que las reflexiones del paquete de onda en esta región son escasas o nulas, efectuándose una absorción suave del paquete. Por ende, se decidió adoptarlo como método confiable para la determinación de la transmitancia.

Reprodujimos el cálculo de la transmitancia en el régimen balístico, donde $E_F = 2V$ (centro de banda). Analizando algunas trayectorias espaciotemporales de la partícula dentro de una pared de dominio anisotrópica (con $\alpha > 1$), vemos que aparece una rotación del espinor entre sus estados up y down, denominada oscilación de Rabi, que permanece mientras la partícula se encuentre dentro de la pared de dominio. El estado de salida es función de la orientación del espín al instante en que la barrera se diluye. Esta propiedad dinámica genera las oscilaciones en la transmitancia que observamos en el caso estático.

Decidimos incorporar el ingrediente de la decoherencia al tratamiento del transporte, dado que esta es el puente con el tratamiento del transporte semiclásico basado en la ecuación de Boltzmann desarrollado por Valet y Fert para explicar la magnetoresistencia gigante producida por una pared de dominio. Como ya se mencionó, el problema del nanohilo ferromagnético puede verse como un sistema de cuatro puntas. Fue necesario desarrollar un programa que utilice el modelo D'Amato-Pastawski para un sistema de cuatro puntas en presencia de decoherencia el cual fue desarrollado por Carlos Cattena, con mi colaboración.

Para estudiar el efecto de la decoherencia en las oscilaciones de Rabi, y por ende en el transporte, surgió la necesidad de implementar un modelo que incorpore la decoherencia en la evolución dinámica de una partícula. Para ello se introdujo la representación de una partícula mediante la función de onda que fuera representativa del estado estadístico. La decoherencia se introduce considerando a esta función de onda como un promedio sobre muchas "historias", por lo que nuestro método no incorpora el colapso de la función de onda como un ingrediente activo. Consideramos que la probabilidad de evolución coherente de la partícula se ve disminuída en cada paso de tiempo mientras que se produce una reinyección de función de onda que conserva la norma local y que tiene una fase aleatoria. Vimos que este punto de vista nos lleva a la perturbación de la fase local con una fase aleatoria con distribución Lorentziana. Esta fase puede ser vista como una corrección a la energía de sitio con incertidumbre Lorentziana, con lo que resulta consistente con el tratamiento dentro de la teoría de campo fuera de equilibrio (Formalismo de Keldysh) desarrollado por Pastawski [P91, P92] para describir procesos

decoherentes.

Se examinó el modelo comparándolo con diferentes sistemas conocidos. Vemos que el Modelo Dinámico para la Decoherencia se comporta de la misma forma que el modelo precedente de D'Amato-Pastawski para el cálculo de transmitancias. Es importante destacar que la cantidad de promedios que son necesarios para disminuir el ruido son relativamente pocos (del orden de 10 promedios para el cálculo de la transmitancia). Cabe destacar la eficiencia del método debido a la utilización de una única función de onda para describir a la partícula en vez de la matriz densidad, como es usada para *saltos cuánticos* en modelos atómicos, la que implementada para un sistema mesoscópico resultaría mucho más costosa computacionalmente.

La implementación de la decoherencia en el nanohilo dió como resultado que las oscilaciones son robustas ante el efecto de la decoherencia, como puede verse en la figura 33. El efecto de la decoherencia produce back-scattering, observándose pequeños paquetes de onda se desprenden del original con momentos aleatorios.

En síntesis, hemos desarrollado una amplia gama de herramientas que nos servirán para describir la dinámica de partículas en sistemas de cuatro terminales, en regímenes coherentes tanto como en incoherentes. Estas herramientas reconocen una inmediata aplicación a análisis de fenómenos que se dan experimentalmente en los materiales ferromagnéticos. Dado que la decoherencia es uno de los principales efectos que introduce la temperatura [CBMP10] nos acercan al tratamiento de situaciones de interés experimental local, como la dependencia térmica de transporte [FFVUH10]), así como de otras situaciones que están teniendo un gran interés experimental y tecnológico, que se suman al ya establecido fenómeno de la magnetoresistencia gigante y nos conducen de lleno al campo de la spintrónica [F08]. En particular, como posibles campos de aplicación, mencionamos el movimiento de paredes de dominio [PhysKN10], o volteo de la magnetización en las paredes de dominio [PhysK08] inducidos por corriente .

Capítulo VIII

7 Apéndices

7.1 Apéndice A: Modelo Tight Binding

7.1.1 Cadena lineal

Consideremos una partícula, por ejemplo un electrón, moviéndose en el espacio con un potencial $U(x)$. La ecuación de Schrödinger para este caso es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x) \right] \psi(x) = \varepsilon \psi(x)$$

Si pensamos ahora que el espacio tiene forma discreta, es decir un valor para la posición de la partícula viene dado por $x = n.a$, donde n es un número entero, que denominaremos "índice de sitio", y a es el parámetro de red o constante de red y define el espaciamiento entre dos puntos espaciales sucesivos, entonces la ecuación tomará la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right]_{x=n.a} + U(n.a) \psi(n.a) = \varepsilon \cdot \psi(n.a)$$

Designemos $\psi_n = \psi(n.a)$, $U_n = U(n.a)$, y definamos la derivada utilizando las diferencias finitas, entonces $\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{a} (\psi((n+1).a) - \psi(n.a))$. Por lo tanto, aplicando esto a la ecuación nos queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} [\psi_{n+1} - 2.\psi_n + \psi_{n-1}] + U_n.\psi_n = \varepsilon.\psi_n$$

Si $V = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ entonces tenemos

$$-V\psi_{n-1} + (U_n + 2V).\psi_n - V\psi_{n+1} = \varepsilon.\psi_n$$

Utilizando esta relación de recurrencia, se define el Hamiltoniano de diferencias finitas del sistema en forma matricial

$$H = \begin{bmatrix} U_1 + 2V & -V & 0 & 0 \\ -V & U_2 + 2V & -V & 0 \\ 0 & -V & \dots & \\ 0 & 0 & & \end{bmatrix}$$

Como es sabido, el potencial esta definido salvo una constante aditiva. Si elegimos esta constante igual a $-2V$ entonces quitaremos el segundo término de los elementos diagonales, quedándonos sólo con el que depende del potencial.

Comparando este Hamiltoniano con una versión Tight Binding notamos que tienen una gran similaridad. En la representación Tight Binding la función de onda representa un orbital atómico en cada sitio de red, el parámetro V tiene el sentido de overlap o integral de superposición entre orbitales atómicos cercanos, que llamamos amplitud de salto, y el potencial U es la energía del orbital localizado. Es por eso que llamaremos a esta representación de diferencias finitas, modelo Tight Binding.

En nuestra representación Tight Binding, los términos situados en la diagonal de la matriz Hamiltoniano son llamados "energía de sitio", y tiene el sentido de la energía potencial. Los términos fuera de la diagonal, van a ser aquellos que conecten dos sitios. Esta conexión viene caracterizada por el parámetro V , que llamamos amplitud de salto o término cinético, y será el que defina el sistema de unidades utilizado.

Los modelos Tight Binding presentan la gran ventaja de poder ser representados gráficamente. Por ejemplo para este caso del electrón en un sistema unidimensional, el modelo luce como una cadena

Relación de Dispersión y Velocidad de Grupo Sabemos que para un potencial uniforme $U(x) = U_0$ la solución a la ecuación de Schrödinger son ondas planas que tienen una relación de dispersión parabólica

$$\psi(x) = \exp(i.k.x) \quad y \quad \varepsilon(k) = U_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U_0 + V a^2 k^2$$

En nuestro caso $\psi_j = \exp(ikja)$. Si lo introducimos en la ecuación tendremos

$$-V \exp(ik(j-1)a) + (U_0 + 2V) \cdot \exp(ikja) - V \exp(ik(j+1)a) = \varepsilon \cdot \exp(ikja)$$

Lo cual nos da la siguiente relación de dispersión:

$$\varepsilon(k) = U_0 + 2V(1 - \cos(ka))$$

Si a toma valores cada vez más pequeños, haciendo serie de Taylor a segundo orden vemos que se recupera la relación cuadrática que teníamos para el continuo.

La velocidad de grupo es otra magnitud de interés. Esta se ve definida por

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$$

En nuestra representación discreta la velocidad de grupo es $v_g = 2Va \cdot \text{sen}(ka)$ mientras que en el continuo la velocidad de grupo tiene una relación lineal con k dada por $v_g = \frac{2Va^2}{\hbar} k$. En el límite de a pequeño ambas coinciden.

7.2 Apéndice B: Funciones de Green y Método de Decimación

Las funciones de Green han hallado un extendido uso en el área del transporte. Una parte de su éxito se debe a que proporcionan resultados exactos.

Como vimos, las funciones de Green son solución a la ecuación matricial

$$[(\varepsilon + i\eta) \mathbf{I} - \mathbf{H}] G^R(i, j) = \mathbf{I}$$

o dicho de otra forma, están definidas por:

$$G^R(i, j) = [(\varepsilon + i\eta) \mathbf{I} - \mathbf{H}]^{-1}$$

si todos sus autovalores son distintos de cero.

Para entender mejor y ganar intuición en el uso de las funciones de Green, utilicemos un ejemplo: el sistema de dos niveles. Un sistema que posee dos niveles de energía, puede ser representado en un modelo Tight Binding por un Hamiltoniano de dos sitios. Entonces,

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & -V \\ -V & E_2 \end{bmatrix}$$

Calculemos ahora la función de Green asociada a este problema.

$$G^R = [\varepsilon \cdot \mathbf{I} - \mathbf{H}(\mathbf{r})]^{-1} = \begin{bmatrix} \varepsilon - E_1 & V \\ V & \varepsilon - E_2 \end{bmatrix}^{-1}$$

$$G^R = \frac{1}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2)} \begin{bmatrix} (\varepsilon - E_2) & -V \\ -V & (\varepsilon - E_1) \end{bmatrix}$$

Para este caso, calcularlas puede ser muy sencillo, pero podemos darnos cuenta que el problema crecerá en complejidad conforme aumentemos el número de sitios del sistema. Esto podría ser muy inconveniente si queremos

discretizar el espacio con un parámetro de red pequeño, ya que el número de sitios N crecería notablemente, y más aún el Hamiltoniano, que tendría dimensión $N \times N$. Tal parece entonces, que el cálculo de las funciones de Green no es conveniente analítica y numéricamente. Por fortuna, la solución a este problema fue encontrada. El método de decimación, nos permitirá invertir la matriz del Hamiltoniano con una facilidad inesperada.

Vamos a introducirnos en el uso del método de decimación mediante un ejemplo:

Un sistema con tres estados, representado en un modelo Tight Binding por tres sitios. El Hamiltoniano que lo domina, en la base de sitios, es:

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & -V & 0 \\ -V & E_2 & -V \\ 0 & -V & E_3 \end{bmatrix}$$

Donde E_i representan las correspondientes energías de sitio y V el hopping entre ellos.

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger matricial será:

$$\mathbf{H}\varphi = \varepsilon\varphi$$

$$\begin{bmatrix} E_1 & -V & 0 \\ -V & E_2 & -V \\ 0 & -V & E_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

Esta ecuación de autovalores, desde un punto de vista matemático es un sistema de tres ecuaciones acopladas. Si despejamos, usando la segunda ecuación, la amplitud de probabilidad sobre el segundo sitio, u_2 , tendremos:

$$u_2 = \frac{V.u_1 + V.u_3}{E_2 - \varepsilon}$$

Podemos "eliminar" el sitio reemplazando su expresión equivalente en las otras ecuaciones.

$$\begin{aligned} \left(E_1 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} \right) .u_1 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} .u_3 &= \varepsilon .u_1 \\ -\frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} .u_1 + \left(E_3 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} \right) .u_3 &= \varepsilon .u_3 \end{aligned}$$

Como vemos, hemos eliminado de esta representación al segundo sitio pagando el costo de tener dos ecuaciones no lineales en la energía ε . De esta forma, hemos obtenido un Hamiltoniano efectivo con una dimensión menor.

$$H_{eff} = \begin{pmatrix} \tilde{E}_1 & -\tilde{V} \\ -\tilde{V} & \tilde{E}_3 \end{pmatrix}$$

donde las energías de sitio y los hopping se encuentran renormalizados

$$\tilde{E}_i = E_i - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} = E_i + \Sigma(\varepsilon)$$

A $\Sigma(\varepsilon)$ se la llama self-energy. Es la corrección a las energías de sitio por haber "decimado" o eliminado al sitio 2. Si ahora pretendo eliminar \tilde{E}_3 , siguiendo el mismo procedimiento

$$u_3 = -\frac{\tilde{V}}{\tilde{E}_3 - \varepsilon} u_1$$

Introduciendolo en la primer ecuacion

$$\begin{aligned} \left(\tilde{E}_1 + \frac{\tilde{V}^2}{\tilde{E}_3 - \varepsilon} \right) \cdot u_1 &= \left[E_1 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} + \left(\frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} \right)^2 \cdot \frac{1}{E_3 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} - \varepsilon} \right] \cdot u_1 \\ &= \left[E_1 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} \left(1 - \frac{V^2}{(E_2 - \varepsilon)} \frac{1}{\left(E_3 - \frac{V^2}{E_2 - \varepsilon} - \varepsilon \right)} \right) \right] \cdot u_1 \\ &= \left[E_1 - \frac{V^2}{E_2 - \frac{V^2}{(E_3 - \varepsilon)} - \varepsilon} \right] \cdot u_1 \end{aligned}$$

Ahora tenemos un Hamiltoniano efectivo de dimension 1×1 . El segundo término dentro del corchete es, de nuevo, la self-energy, o sea la corrección a la energía del sitio 1 por haber eliminado los otros dos sitios.

Pensemos que hubiera pasado si en vez de tener tres sitios hubiesemos tenido 4 sitios.

Al decimar el cuarto sitio en el tercero tendremos.

$$\tilde{E}_3 = E_3 - \frac{V^2}{E_4 - \varepsilon}$$

Solo se corrige la energía del tercer sitio. Podemos ver que ahora tenemos un sistema efectivo de tres sitios. Utilizando lo que vimos antes para tal caso, tendremos

$$H_{1,4} = E_1 - \frac{V^2}{E_2 - \frac{V^2}{\left(\tilde{E}_3 - \varepsilon\right) - \varepsilon}} = E_1 - \frac{V^2}{E_2 - \frac{V^2}{E_3 - \frac{V^2}{E_4 - \varepsilon} - \varepsilon}}$$

Analicemos ahora el caso de cadenas semi-infinitas, que nos servirán para modelar los cables que nos conectarán a la fuente de electrones. Utilizando lo que vimos arriba, podemos darnos cuenta que la self-energy para una cadena semi-infinita cumple

$$\Sigma = \frac{V^2}{\varepsilon - E - \Sigma}$$

Con lo cual, la solución a esa ecuación es

$$\Sigma = \Delta \mp i\Gamma$$

donde

$$\Delta = \begin{cases} \frac{\varepsilon - E}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E}{2}\right)^2 - V^2}, & \text{si } \frac{\varepsilon - E}{2} > |V| \\ \frac{\varepsilon - E}{2} > |V| & \text{si } \left|\frac{\varepsilon - E}{2}\right| \leq |V| \\ \frac{\varepsilon - E}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E}{2}\right)^2 - V^2} & \text{si } \frac{\varepsilon - E}{2} < -|V| \end{cases}$$

$$\Gamma = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{\varepsilon - E}{2} > |V| \\ \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E}{2}\right)^2} & \text{si } \frac{\varepsilon - E}{2} \leq |V| \end{cases}$$

Esta cantidad Γ , es la que utilizamos en la fórmula de Fisher y Lee para el cálculo de la transmitancia cuántica.

7.3 Apéndice C: Expansión de Trotter-Suzuki

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & -V_{1,2} \\ -V_{2,1} & E_2 \end{bmatrix}$$

Usando la expansión de Trotter-Suzuki,

$$|\psi(t + dt)\rangle \approx \exp\left(-\frac{iH_1 dt}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iH_2 dt}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle$$

En nuestra representación el espacio tiene forma discreta, por lo que

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^2 a_j |j\rangle$$

donde los a_j son las amplitudes de probabilidad en cada sitio.

Analicemos por separado la acción de cada operador $\exp\left(-\frac{iH_j dt}{\hbar}\right)$. Por definición, $\exp\left(-\frac{iH dt}{\hbar}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-idt)^k}{k!} \cdot H^k$.

En el caso de H_1 sus potencias son

$$(H_1)^2 = \begin{bmatrix} (E_1)^2 & 0 \\ 0 & (E_2)^2 \end{bmatrix}$$

$$(H_1)^3 = \begin{bmatrix} (E_1)^3 & 0 \\ 0 & (E_2)^3 \end{bmatrix}$$

Vemos que esto puede generalizarse y escribir

$$\exp\left(-\frac{iH_1 dt}{\hbar}\right) = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-idt)^k}{k!} \cdot (E_1)^k & 0 \\ 0 & \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-idt)^k}{k!} \cdot (E_2)^k \end{bmatrix}$$

$$\exp\left(-\frac{iH_1 dt}{\hbar}\right) = \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{iE_1 dt}{\hbar}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{iE_2 dt}{\hbar}\right) \end{bmatrix}$$

Observemos esta última expresión. Las energías de sitio se encuentran en los elementos diagonales de la matriz del operador evolución temporal. Es decir, no producen mezcla entre los estados sino que el único efecto que logran es un **cambio en la fase** de la amplitud de probabilidad en el sitio.

Ahora examinaremos el operador $\exp\left(-\frac{iH_2 dt}{\hbar}\right)$.

$$(H_2)^2 = \begin{bmatrix} (-V)^2 & 0 \\ 0 & (-V)^2 \end{bmatrix} = V^2 \cdot \mathbf{I}$$

$$(H_2)^3 = \begin{bmatrix} 0 & (-V)^3 \\ (-V)^3 & 0 \end{bmatrix}$$

Ya podemos intuir cómo es la sucesión de potencias. De esta forma:

$$\begin{aligned}
\exp\left(-\frac{iH_2 dt}{\hbar}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-idt/\hbar)^k}{k!} \cdot (H_2)^k \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-idt/\hbar)^{2n}}{(2n)!} \cdot (H_2)^{2n} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-idt/\hbar)^{2m+1}}{(2m+1)!} \cdot (H_2)^{2m+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (dt/\hbar)^{2n}}{(2n)!} V^{2n} \cdot \mathbf{I} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)(-1)^{m+1} (dt/\hbar)^{2m+1}}{(2m+1)!} V^{2m+1} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \cos\left(\frac{V dt}{\hbar}\right) \cdot \mathbf{I} + i \cdot \sin\left(\frac{V dt}{\hbar}\right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_x
\end{aligned}$$

Bibliografía

- [BF88] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Van Dau, F. Nguyen Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **61** 2472 (1988).
- [ADLP06] G.A. Álvarez, E.P. Danieli, P.R. Levstein, y H.M. Pastawski. *Environmentally induced quantum dynamical phase transition in the spin swapping operation*. J. Chem. Phys. **124**, 194507(8) (2006)
- [ADLP07] G.A. Álvarez, E.P. Danieli, P.R. Levstein, and H.M. Pastawski. *Decoherence under many-body system-environment interactions: a stroboscopic representation based on a fictitiously homogenized interaction rate*. Phys. Rev. A **75**, 062116 (2007). cond-mat/0701574
- [ADLP08] G. A. Álvarez, E. P. Danieli, P. R. Levstein, H. M. Pastawski, *Quantum Parallelism as a Tool for Ensemble Spin Dynamics Calculations*, Phys. Rev. Lett. **101**, 120503 (2008)
- [CF74] G. G. Cabrera, L. M. Falicov, *Theory of the Residual Resistivity of Bloch Walls: I. Paramagnetic Effects*, Phys. Status solid B **61**, 539 (1974).
- [Car89] H. J. Carmichael, S. Singh, R. Vyas and P. R. Rice, *Photoelectron waiting times and atomic state in resonance fluorescence*; Phys. Rev. A **39**, 1200 (1989)
- [CBMP10] Carlos J. Cattena, Raúl A. Bustos-Marín, and Horacio M. Pastawski, *Crucial role of decoherence for electronic transport in molecular wires: Polyaniline as a case study*, Phys. Rev. B **82**, 144201 (2010)
- [DP90] J. L. D'Amato, H. M. Pastawski, *Conductance of a disordered linear chain including inelastic scattering events*. Phys. Rev. B **41**, 7411 (1990).
- [F08] Albert Fert, *Nobel Lecture: Origin, development, and future of spintronics*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1517 (2008)
- [FFVUH10] L. M. Fabietti, J. Ferreyra, M. Villafuerte, S. E. Urreta, and S. P. Heluani, *Kondo-like effect in magnetoresistive CuCo alloys*, Phys. Rev. B **82**, 172410 (2010)

- [FJWS06] Peter E. Falloon, Rodolfo A. Jalabert, Dietmar Weinmann, and Robert L. Stamps, *Electron transport through disordered domain walls: Coherent and incoherent regimes*, Phys. Rev. B **74**, 144425 (2006) – Published October 25, 2006
- [FJWS04] Peter E. Falloon, Rodolfo A. Jalabert, Dietmar Weinmann, and Robert L. Stamps, *Circuit model for domain walls in ferromagnetic nanowires: Application to conductance and spin transfer torques*, Phys. Rev. B **70**, 174424 (2004) – Published November 15, 2004
- [Fall06] P. E. Falloon, *Electron Transport through Domain Walls in Ferromagnetic Nanowires* <http://scd-theses.u-strasbg.fr/1135/01/FALLOON2006.pdf> **46**, 4053 (1992).
- [GWJS04] V. A. Gopar, D. Weinmann, R. Jalabert, R.L. Stamps; *Electronic transport through domain walls in ferromagnetic nanowires: Co-existence of adiabatic and non-adiabatic spin dynamics*; Phys. Rev. B **69**, 014426 (2004)
- [IL99] Yoseph Imry and Rolf Landauer, *Conductance viewed as transmission*, Rev. Mod. Phys. **71**, S306 (1999) – Published March 1, 1999
- [KMK81] A. MacKinnon y B. Kramer , *One-Parameter Scaling of Localization Length and Conductance in Disordered Systems*, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546–1549 (1981)
- [KMK93] A. MacKinnon y B. Kramer, *Localization: Theory and Experiment*, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)
- [PhysKN10] G. Karapetrov and V. Novosad, *Domain walls riding the wave*, Physics **3**, 96 (2010)
- [PhysK08] Mathias Kläui, *Flipping a domain wall switch*, Physics **1**, 17 (2008) DOI: 10.1103/Physics.1.17
- [PM01] H. M. Pastawski y E. Medina, *‘Tight Binding’ methods in quantum transport through molecules and small devices: From the coherent to the decoherent description*. Revista Mexicana de Física **46**, 1-23 (2001)
- [P91] H. M. Pastawski, *Clasical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations*, Phys. Rev. Lett. **44** 6329 (1991)

- [P92] H. M. Pastawski, *Classical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations II. Time-dependent resonant tunneling*, Phys. Rev.
- [VF93] T. Valet, A. Fert, *Theory of the perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers*, Phys. Rev. B **48** 7099 (1993).