

DOCTORADO EN CIENCIA y Tecnología
Evaluado y acreditado POR LA Comisión Nacional de Evaluación y
Acreditación Universitaria
RESOLUCIÓN N° 1178/11. Calificación "B".

**TRANSPORTE DE CALOR EN SISTEMAS de
baja DIMENSIÓN dependientes del
TIEMPO**

TRABAJO DE TESIS PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE
DOCTOR EN CIENCIA y TECNOLOGÍA
DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SARMIENTO

AUTOR: BERAHA, NATALIA

DIRECTOR: CARUSELA, MARÍA FLORENCIA

CO-DIRECTOR: SOBA, ALEJANDRO

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA
Evaluado y acreditado POR LA Comisión Nacional de Evaluación y
ACREDITACIÓN UNIVERSITARIA
RESOLUCIÓN N° 1178/11. Calificación "B".

FORMULARIO "E"
TESIS DE POSGRADO

Niveles de acceso al documento autorizados por el autor

El autor de la tesis puede elegir entre las siguientes posibilidades para autorizar a la UNGS a difundir el contenido de la tesis: (c)

- (a) Liberar el contenido de la tesis para acceso público.
- (b) Liberar el contenido de la tesis solamente a la comunidad universitaria de la UNGS.
- (c) Retener el contenido de la tesis por motivos de patentes, publicación y/o derechos de autor por un lapso de cinco años.

a. Título completo del trabajo de Tesis: **Transporte de calor en sistemas de baja dimensión dependientes del tiempo.**

b. Presentado por: **Beraha Natalia**

c. E-mail del autor: **nberaha@campus.ungs.edu.ar**

d. Estudiante del Posgrado: **Doctorado en ciencia y tecnología**

e. Institución o Instituciones que dictaron el Posgrado: **Universidad Nacional de General Sarmiento**

f. Para recibir el título de (consignar completo):

a) Grado académico que se obtiene: **Doctor**

b) Nombre del grado académico: **Doctora en Ciencia y Tecnología**

g. Fecha de la defensa: 15 /10 /2021

h. Director de la Tesis: **Carusela María Florencia**. Co-Director de la Tesis:

Soba Alejandro

i. Tutor de la Tesis: **El Hasi Claudio Daniel**

j. Colaboradores con el trabajo de Tesis:

k. Descripción física del trabajo de Tesis: **180 páginas, 50 figuras.**

l. Alcance geográfico y/o temporal de la Tesis: **Internacional.**

m. Temas tratados en la Tesis (palabras claves): **Transporte de calor, Fonónica, Sistemas alejados del equilibrio, Termodinámica fuera del equilibrio.**

ñ. Resumen en español (hasta 1000 caracteres):

En esta tesis se propone el estudio del transporte de calor en sistemas unidimensionales que se encuentran alejados del equilibrio debido a la acción de agentes termomecánicos dependientes del tiempo. Primero, se estudia numéricamente el transporte térmico en una cadena de osciladores que conforman un sistema clásico con interacciones locales sujeto a diferentes perturbaciones dependientes del tiempo. Caracterizamos los diferentes regímenes de transporte en función de parámetros relevantes asociados a las perturbaciones temporales.

Posteriormente, el estudio numérico se extiende a una cadena de osciladores cuánticos acoplados localmente, con perturbaciones dependientes del tiempo. Utilizando el formalismo de funciones de Green de no equilibrio de Keldysh, analizamos las condiciones para generar diferentes regímenes de transporte térmico.

Por último, extendemos el sistema cuántico analizando el rol de la localidad de las interacciones interpartículas.

Palabras claves: Fenómenos de transporte térmico clásico y cuántico - Sistemas de baja dimensión - Ecuación de Langevin- Formalismo de las funciones de Green-Keldysh de no equilibrio.

n. Resumen en portugués (hasta 1000 caracteres):

Esta tese propõe o estudo do transporte de calor em sistemas unidimensionais distantes do equilíbrio devido à ação de agentes termomecânicos dependentes do tempo.

Primeiramente, o transporte térmico em uma cadeia de osciladores que compõem um sistema clássico com interações locais sujeitas a diferentes perturbações dependentes do tempo é estudado numericamente. Caracterizamos os diferentes regimes de transporte com base em parâmetros relevantes associados a perturbações temporárias.

Posteriormente, o estudo numérico é estendido a uma cadeia de osciladores quânticos acoplados localmente, com perturbações dependentes do tempo. Usando o formalismo de Keldysh de não equilíbrio das funções de Green, analisamos as condições para gerar diferentes regimes de transporte de calor.

Finalmente, estudamos o sistema quântico analisando o papel da localidade das interações entre as partículas.

Palabras claves: Fenômenos de transporte térmico clássico e quântico - Sistemas de baixa dimensão -Equação de Langevin - Formalismo de funções de Green-Keldysh fora de equilíbrio - Retificação térmica.

o. Resumen en inglés (hasta 1000 caracteres):

In this thesis we study the heat transport in one-dimensional systems that are driven out of equilibrium due to the action of time-dependent thermomechanical

perturbations.

First, through a numerical study, we analyze the thermal transport in a chain of oscillators that make up a classical system with local interactions subject to different time-dependent perturbations. We characterize the different transport regimes based on relevant parameters associated with temporary disturbances.

Subsequently, the numerical study is extended to a chain coupled quantum oscillators, with time-dependent perturbations. Using the Keldysh non-equilibrium Green functions formalism, we analyze the conditions to generate different heat transport regimes. Finally, we extend the quantum system by analyzing the role of the locality of interparticle interactions.

Keywords: Classical and quantum thermal transport phenomena- Low-dimensional systems - Langevin equation - Keldysh non-equilibrium Green function formalism.

p. Aprobado por (Apellidos y Nombres del Jurado): Alejandro Mariano Fidel Rivas, Luciano Calheiros Lapas y Andrés Salvador Sartarelli

q. Firma y aclaración de la firma del Presidente del Jurado: Andrés Salvador Sartarelli

r. Firma del autor de la tesis: Natalia Beraha

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA
EVALUADO Y ACREDITADO POR LA COMISIÓN NACIONAL DE EVALUACIÓN Y
ACREDITACIÓN UNIVERSITARIA
RESOLUCIÓN Nº 1178/11. Calificación "B".

Publicaciones:

- N. Beraha, A. Soba and M. F. Carusela. Heat transport and cooling performance in a nanomechanical system with no local interactions (2021).
Artículo en preparación a ser próximamente enviado para su publicación.
- N. Beraha, A. Soba and M. F. Carusela. Frequency thermal response and cooling performance in a microscopic system with a time-dependent perturbation. *Physica A* 464 64–73 (2016).
- N. Beraha, A. Soba, R. Barreto, and M. F. Carusela. Phononic heat transfer through a one dimensional system subject to two sources of nonequilibrium. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications* 433, 9 (2015).
- N. Beraha, R. Barreto, A. Soba, M. F. Carusela. Transferencia de calor resonante en una cadena unidimensional con acoplamiento variable. *Anales AFA*. Vol. 24 (2013).

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA
EVALUADO y ACREDITADO POR LA Comisión Nacional de Evaluación y
ACREDITACIÓN UNIVERSITARIA
RESOLUCIÓN N° 1178/11. Calificación “B”.

Aportes Originales:

La tesis propone una extensión al estudio del transporte de calor asistido por fonones en sistemas de baja dimensión en presencia de fuentes de no equilibrio dependientes del tiempo. Dicho estudio se analizó tanto en aproximaciones clásicas como aproximaciones cuánticas. En una primera etapa se consideraron interacciones locales, y posteriormente se introdujo no localidad, característica novedosa en el estudio del transporte térmico dependiente del tiempo.

Tanto en el caso clásico como cuántico se encontró que el sistema presenta el fenómeno de rectificación térmica que da lugar a distintos regímenes de transporte que fueron analizados y caracterizados. En particular en el caso cuántico se encontró un régimen de refrigeración.

Hasta el momento de comenzada esta tesis, el estudio del transporte de calor en sistemas de baja dimensión (1D) usualmente consideraba la acción de forzantes temporales aditivos. En este trabajo hemos extendido el estudio, tanto en el caso clásico como cuántico, al caso de agentes termomecánicos que afectan los parámetros involucrados en las interacciones entre partículas.

Para realizar una gestión térmica dinámica en dispositivos de baja dimensión, y con el objeto de conseguir propiedades de transporte análogas a sus contrapartes electrónicas u ópticas, se deben enfrentar mayores desafíos experimentales y tec-

nológicos, por lo que estos estudios son mucho menos numerosos en la literatura. Estudios teóricos y numéricos como los de esta tesis, son una plataforma adecuada para proponer y caracterizar dispositivos para una gestión térmica controlada.

Para Berta y Albino con cariño

Agradecimientos

A mi directora María Florencia Carusela, por su paciencia y compromiso. Por acompañarme siempre y guiarme en este camino. Gracias por confiar en mí desde un comienzo cuando aún estaba cursando mi carrera de grado.

A mi codirector, Alejandro Soba, por estar siempre atento ante mis dudas y alentarme.

A Alejandro Monastra por revisar minuciosamente esta tesis. Sus comentarios y sugerencias han sido de gran ayuda para poder llegar a esta versión final.

A mi familia que siempre me apoyó y me alentó a llegar a concretar mi meta.

A Natividad López, que supo acompañarme y darme fuerzas para nunca bajar los brazos en momentos de incertidumbre.

Y por último a la UNGS como institución, docentes, compañeros, NoDocentes, que siempre han brindando su colaboración.

Índice general

Resumen	1
Abstract	3
Introducción General	5
Dispositivos de control de flujo.....	8
Transporte de calor mediado por fonones.....	13
Capítulo 1: Transporte de calor en un sistema clásico unidimensional	17
Introducción.....	17
Modelo Frenkel-Kontorova	19
El modelo	21
Reservorios térmicos	25
Termostato Langevin	26
Flujo de calor.....	29
Cálculo de la corriente de calor en un sistema unidimensional	29
Métodos de simulación	33
Métodos Verlet de integración.....	36
Implementación numérica.....	38
Algoritmo numérico cadena clásica.....	39

Transporte térmico con una fuente de no equilibrio dependiente del tiempo	40
Transporte térmico en presencia de dos fuentes de no equilibrio dependientes de tiempo	51
Conclusiones del capítulo	58

Capítulo 2: Transporte de calor en un sistema cuántico unidimensional	59
Introducción.....	59
Bombas cuánticas	61
Formalismo teórico	62
Representaciones en mecánica cuántica	64
Schrödinger	64
Heisenberg.....	64
Interacción.....	65
Operador evolución.....	65
Funciones de Green	67
Sistemas en equilibrio.....	68
Sistemas fuera del equilibrio.....	71
El modelo.....	76
Corriente de energía.....	79
Ecuación de Dyson. Solución perturbativa.....	86
Cálculo de la corriente DC de calor.....	90
Implementación numérica	92
Algoritmo numérico cadenas cuánticas.....	95
Regímenes de transporte	97
Rendimiento del refrigerador fonónico.....	106
Conclusiones del capítulo	108

Capítulo 3: Transporte de calor en el régimen cuántico con interacciones no locales	110
Introducción.....	110
El modelo.....	113
Efectos del driving en el transporte de calor	117
Regímenes de transporte en función del gradiente de temperatura.....	128
Conclusiones del capítulo	140
Conclusiones Generales	142
Extensiones a futuro	145
Apéndice I	147
Apéndice II	151
Bibliografía	153

Terminología utilizada en esta tesis

DM : Dinámica Molecular.

FK : Frenkel Fontorova.

k_B : Constante de Boltzman.

m : Masa.

T_D : Temperatura de Debye.

N : cantidad de partículas.

α : Subíndice que indica el segmento de la cadena central.

β Subíndice que identifica al reservorio β .

K_α : constante de acoplamiento de los elementos de la cadena α .

K_β : constante de acoplamiento de los elementos del reservorio β .

K_{int} : constante de interacción entre segmentos de la cadena.

K_0 : constante de interacción del sustrato (cadena cuántica).

V_0 : Amplitud del potencial de sitio (FK).

T_β : Temperatura del reservorio β .

E_{cin} : Energía cinética.

U_{pot} : Energía potencial asociada al potencial de sitio/sustrato.

U_{int} : Energía potencial asociada a la interacción interpartículas.

T_{eff} : Temperatura cinética efectiva.

J_β : Corriente de energía desde el reservorio β hacia el sistema (-).

R : Rectificación térmica.

CP : Coeficiente de performance (rendimiento) del refrigerador térmico.

P : Potencia.

η_β : Función distribución espectral del reservorio β .

ω_{temp} : Frecuencia de modulación de la temperatura.

ω_K : Frecuencia de modulación de la interacción entre segmentos (cadena FK).

ω_0 : Frecuencia de modulación de la interacción entre segmentos (caso cuántico).

φ : Desfasaje entre fuentes de no equilibrio.
 ν : rango de la interacción.
 $\hat{\cdot}$: indica operador o matriz.
 \hat{U} : Operador evolución temporal.
 \hat{T} : Operador de orden temporal.
 CK : Contorno de Keldysh.
 \hat{T}_{CK} : Operador de orden temporal a lo largo del contorno de Keldysh .
 \hat{T} : Función transmisión.
 Γ : Función distribución espectral.
 \hat{G}, \hat{g} : Funciones de Green.
 \hat{G}, \hat{g} : Funciones de Green en la representación de Fourier-Floquet.
 $\hat{G}_{\mathcal{F}}$: función de Green congelada (frozen).
 $\hat{G}_{\mathcal{F}}$: Función de Green congelada (frozen) en la representación de Fourier-Floquet.

Resumen

En esta tesis se propone el estudio del transporte de calor en sistemas unidimensionales que se encuentran alejados del equilibrio debido a la acción de agentes termomecánicos dependientes del tiempo. Con el objetivo de estudiar las propiedades termodinámicas y propiedades fuera del equilibrio nos enfocamos en el cálculo de los flujos de calor en régimen estacionario de acuerdo con los principios fundamentales de la termodinámica.

En una primera etapa, se estudian diversos aspectos del transporte térmico en una cadena de osciladores que conforman un sistema clásico de baja dimensión con diferentes fuentes de no equilibrio dependientes del tiempo (modulaciones temporales) cuando las interacciones entre partículas son locales (a primeros vecinos). A partir de una dinámica de Langevin, analizamos y caracterizamos los diferentes regímenes de transporte en función de parámetros relevantes asociados a las perturbaciones temporales. El estudio numérico se realiza utilizando técnicas de dinámica molecular.

Posteriormente, el estudio se extiende a una cadena de osciladores cuánticos acoplados localmente y sometida a la acción de un agente mecánico dependiente del tiempo. Analizamos las condiciones para generar diferentes regímenes de transporte térmico.

Por último, extendemos el sistema cuántico al caso de tres cadenas conectadas

a través de contactos modulados temporalmente, comparando y caracterizando los regímenes para el caso de interacciones locales y no locales entre partículas.

En los últimos dos casos el estudio se basó en la aplicación del formalismo de funciones de Green de no equilibrio de Keldysh y en simulaciones numéricas.

Palabras claves: Fenómenos de transporte térmico clásico y cuántico - Sistemas de baja dimensión - Ecuación de Langevin - Formalismo de las funciones de Green-Keldysh de no equilibrio.

Abstract

In this thesis we study the heat transport in one-dimensional systems that are driven out of equilibrium due to the action of time-dependent thermomechanical perturbations. In order to study the non-equilibrium transport properties, we focus on the calculation of heat fluxes in the steady state regime according to the fundamental principles of thermodynamics.

As a first step, we analyze different scenarios of heat transport in a chain of atoms when two time-dependent sources of non-equilibrium are driving the system independently. Using a Langevin dynamics, we analyze and characterize the different transport regimes when local interactions (nearest-neighbor) are considered. The numerical study is carried out using molecular dynamics techniques.

Subsequently, the study is extended to a chain of coupled quantum oscillators with local interactions subjected to a time-dependent mechanical driving. We analyze the conditions to generate different heat transport regimes, comparing with the classical counterpart.

Finally, we extend the study to the case of three quantum chains connected through time-dependent modulated contacts, comparing and characterizing the different transport regimes when local and non-local interactions between particles are considered.

We solve these two problems using Keldysh non-equilibrium Green function

formalism and numerical simulations.

Keywords: Classical and quantum thermal transport phenomena - Low-dimensional systems - Langevin equation - Keldysh non-equilibrium Green function formalism.

Introducción General

Actualmente, debido a las problemáticas ambientales, hay un creciente interés a nivel mundial en el desarrollo de estrategias que permitan lograr una gestión energética sostenible. La recolección, el almacenamiento y las pérdidas de energía son algunos de los puntos críticos al momento de gestionar eficientemente los recursos energéticos desde las grandes fuentes de producción hasta la nanoescala, lo que es vital para un futuro sostenible.

Existen diversas teorías desarrolladas para explicar el comportamiento de las distintas formas de energía. Las energías que involucran electrones y fotones como agentes de transporte están bien desarrolladas, y muchas de sus conclusiones representan aplicaciones de gran impacto en la vida diaria. El caso de los fonones, portadores de calor, aún presentan desafíos teóricos y tecnológicos interesantes. Debe tenerse en cuenta que los fonones no poseen carga ni masa y no es posible controlarlos directamente mediante campos electromagnéticos. El estudio del comportamiento de los fonones en la micro y nanoescala representa un problema fundamental con múltiples aplicaciones relacionadas al manejo del *calor*, que va desde la disipación de calor de un CPU hasta el denominado enfriamiento cuántico donde dispositivos de pequeña escala que operan en el régimen cuántico (por ejemplo qubits acoplados a resonadores) son capaces de comportarse como refrigeradores térmicos, gracias a la presencia de ruido o de campos externos [1].

En las últimas dos décadas el rápido desarrollo de investigaciones teóricas sobre el transporte térmico en la nanoescala así como de nanotecnologías aplicadas, ha producido el surgimiento de la *Fonónica*, una nueva disciplina dedicada al estudio de los fenómenos basados en fonones, su uso y manipulación con el objeto de lograr un control de los flujos térmicos que sea flexible como el de su contraparte electrónica. La *fonónica* juega un rol fundamental en el tendido de puentes entre la electrónica/termoelectricidad y la fotónica/optomecánica [2, 3].

Los dispositivos termoeléctricos son dispositivos que convierten el calor en electricidad o viceversa. Para ser tecnológicamente útiles, se deben diseñar dispositivos termoeléctricos con alta eficiencia de conversión. Usualmente estos dispositivos están basados en materiales semiconductores, los que tienen la limitación de tener una conductividad térmica alta, la cual requiere ser reducida para mejorar la eficiencia termoeléctrica. Generalmente esto está asociado a una disminución de la conductividad eléctrica, lo que termina produciendo en conjunto un efecto inverso. Una alternativa es hacer un diseño inteligente de los materiales involucrados considerando nanoestructurados, cristales fonónicos, superredes y láminas ultra delgadas para ajustar la conductividad térmica mediada por las vibraciones de la red cristalina. En este caso, la Fonónica es el campo que se dedica a realizar esta ingeniería “a medida” de las bandas fonónicas y por lo tanto de la conductividad térmica [4].

Por otro lado, la Fonónica junto con la Fotónica permitieron el desarrollo de la Optomecánica, campo que explora la interacción entre la luz y el movimiento mecánico, enfocándose en sistemas en la micro y nano escala a partir del diseño de micro/nanoresonadores y cavidades. La Optomecánica ha permitido el desarrollo de la medición de precisión de pequeños desplazamientos, fuerzas, masas y todas las funcionalidades actualmente disponibles en plataformas integradas en un chip. A modo de ejemplo, se puede mencionar los sistemas optomecánicos que permiten

estudiar el transporte de calor mediado por fonones entre dos membranas nanomecánicas (resonadores) separadas espacialmente y conectadas a dos reservorios térmicos [5]. Un haz de luz interactúa con estas dos membranas acoplándolas. Las características de este haz de luz (fotones), permite regular las propiedades de acoplamiento entre las membranas variando entonces el flujo de energía que fluye hacia/desde los reservorios térmicos.

Es de esperar que las futuras generaciones de recolectores de energía sean multimodo y se basen en la integración y control de la electrónica, fonónica y fotónica, interrelacionadas como se esquematiza en la Fig.1. Por estos motivos resulta fundamental alcanzar una mayor comprensión de los fenómenos de transporte de energía térmica mediada por fonones.

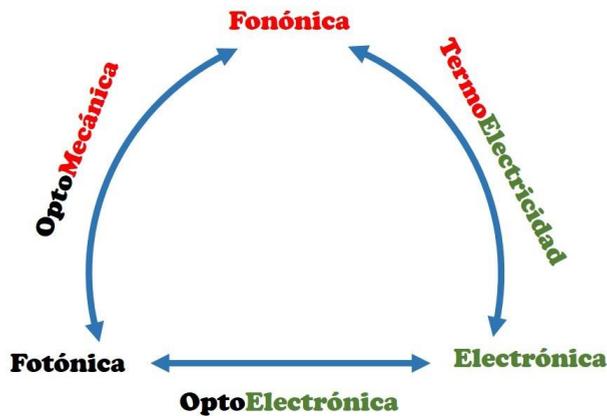


Figura 1: Esquema de integración Fonónica-Fotónica-Eléctrica.

Las nuevas tecnologías y dispositivos electrónicos, debido a sus reducidos tamaños de empaquetamiento, requieren para su buen funcionamiento un control de los flujos de calor a través de ellos para mantener una adecuada performance, además de evitar daños estructurales debido al sobrecalentamiento térmico [6]. Es sabido que un componente electrónico no puede soportar niveles térmicos excesi-

vos. Por ejemplo, en [7] señalan que la tasa de fallos de un ensamblaje o dispositivo electrónico aumenta casi exponencialmente con la temperatura.

Dispositivos de control de flujo

Uno de los dispositivos creados para controlar el flujo de calor es el llamado diodo/rectificador térmico. Análogamente a su contraparte eléctrica, este dispositivo actúa como un conductor térmico si se aplica determinado gradiente de temperatura mientras que si se aplica un gradiente opuesto su conducción térmica se ve disminuida, pudiendo incluso actuar como un aislante térmico [8, 9]. Esencialmente un diodo térmico consiste en la unión de dos materiales que poseen características estructurales que hacen que la transferencia de calor a través de ellos sea diferente, ver Fig.2.

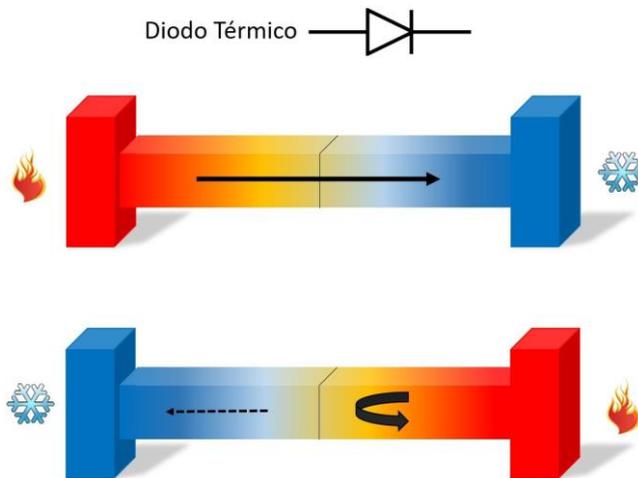


Figura 2: Esquema de funcionamiento de un diodo térmico. Cuando el extremo izquierdo del diodo está a una temperatura más alta que la derecha, se produce un flujo de calor acorde a la Ley de Fourier [10]. En contraste, cuando el extremo derecho es el que se encuentra más caliente en referencia al extremo izquierdo la transmisión de calor se reduce de manera drástica, incluso llegando a anularse.

Tal efecto fue observado por primera vez por Chauncey Starrse en una interfaz cobre - óxido cuproso en la década de 1930 [11]. Desde entonces, se han realizado varios estudios experimentales y teóricos en un intento por comprender los mecanismos que originan este fenómeno de rectificación térmica. Una mejor comprensión de este mecanismo, permitirá desarrollar y utilizar dispositivos como transistores térmicos, circuitos lógicos térmicos, memorias térmicas, resistencia térmica diferencial negativa y diodos térmicos en refrigeración micro/nanoelectrónica. En los últimos años se han propuesto diversos modelos teóricos y se han desarrollado algunas implementaciones experimentales tanto clásicas como cuánticas [12–21]. Estudios teóricos y numéricos previos permitieron desarrollar un primer dispositivo basado en una estructura de nanotubos de carbono asimétricos, y realizar la primera validación experimental de un rectificador térmico [22]. Una fotografía de dicho dispositivo se muestra en la Fig.3.

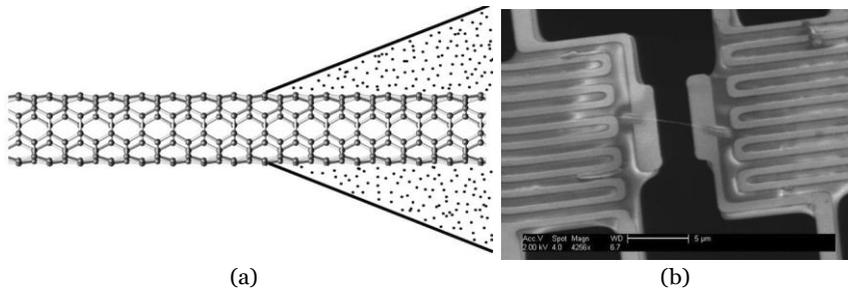


Figura 3: a) Descripción esquemática del dispositivo. b) Imagen de microscopía electrónica (SEM en sus siglas en inglés) de un nanotubo de carbono (línea gris clara en el centro) conectada a los electrodos. Imágenes extraídas de Ref. [22].

Generalmente los diversos dispositivos térmicos basan su funcionalidad en características estructurales estáticas (sus características constitutivas no cambian con el tiempo). Sin embargo sería esperable obtener un control dinámico de la energía térmica utilizando dispositivos fonónicos, con similares posibilidades de

control que sus análogos electrónicos. Para diseñar dispositivos que permitan controlar y rectificar flujos de calor en forma dinámica, deberá tenerse en cuenta no solo el tipo de estructuras sino esencialmente los mecanismos dinámicos que produzcan una rotura de simetría requerida para el fenómeno de rectificación. Dicha rotura puede ser espacial o temporal, de naturaleza determinística o estocástica, por ejemplo generada por potenciales que rompen la invariancia translacional, gradientes de temperatura que varían en el tiempo, campos externos, o acciones mecánicas [23]. Este control dinámico hace que el dispositivo opere en un estado térmico alejado del equilibrio, eludiendo así la segunda ley de la termodinámica por la cual se debería tener un transporte dirigido nulo, y por lo tanto el fenómeno de rectificación térmica no sería posible.

Escenarios como el descrito ofrecen una atractiva posibilidad para realizar una ingeniería dinámica de dispositivos que permitan controlar propiedades de transporte. Bajo el control dinámico se ha demostrado que la estructura de las bandas electrónicas de los materiales pueden sufrir severas modificaciones y por lo tanto sus propiedades de transporte eléctrico [24–26]. En este sentido es interesante explorar cómo realizar controles análogos para el transporte térmico, a partir de una ingeniería dinámica de las bandas fonónicas que permita el diseño de rectificadores, motores y bombas térmicas. El modo operacional de los motores y generadores puede ser entendido fácilmente haciendo una analogía con la máquina de Arquímedes. Esta consiste en un tubo que en su parte interior posee un tornillo giratorio que se mueve con el flujo de agua, modo “motor” en Fig.4-a). En su modo inverso, el agua es bombeada en contra de la gravedad girando el tornillo, modo “bombedor” en Fig.4-b). Por lo tanto, mediante arquitecturas y acciones termomecánicas adecuadas, se pueden proponer y diseñar mecanismos para el funcionamiento de micro o nano-máquinas térmicas. Por ejemplo aplicando ideas similares a las utilizadas en motores brownianos para dirigir partículas,

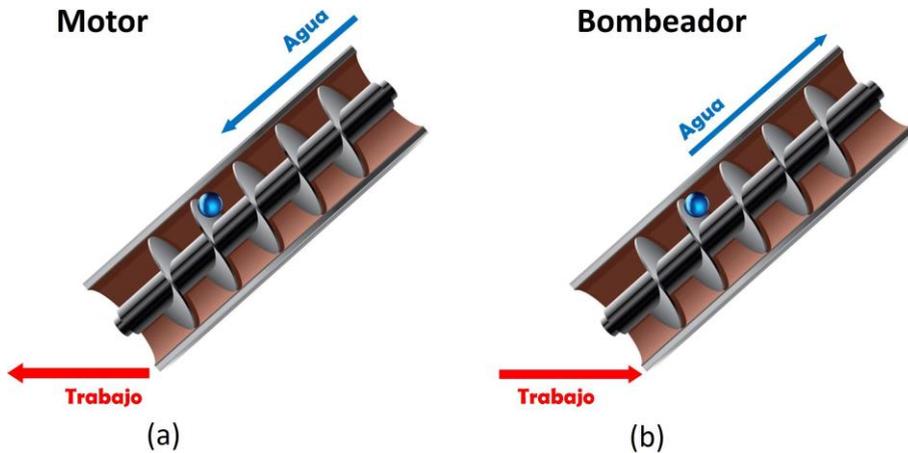


Figura 4: Máquina de Arquímedes. Consiste en un tubo con un tornillo giratorio central. Esta máquina tiene dos modos operacionales, el modo motor y bombeador. Cuando funciona como motor, el tornillo del interior se mueve por el flujo de agua (a). En el modo inverso, bombeador, el agua es bombeada en contra de la gravedad girando el tornillo (b).

se podría conseguir un bombeo o transporte eficiente de energía a través de nanoestructuras en contacto con entornos con gradientes variables de temperatura, mediante la aplicación de campos eléctricos o magnéticos dependientes del tiempo o con la manipulación mecánica, sea en forma de compresión o estiramientos. Estos mecanismos de control *dinámico* del flujo de calor requieren un trabajo externo aplicado sobre el sistema. En [27] se ha propuesto un ratchet o trinquete térmico para dirigir el flujo de calor desde un reservorio a otro a través de una cadena no lineal. En dicho trabajo se propone modular temporalmente las temperaturas de los dos baños térmicos manteniendo el promedio constante. También se han propuesto motores brownianos de calor para transferir calor a través de un sistema unidimensional no lineal y homogéneo [28].

Otros autores proponen alternativas de dispositivos enfriadores, que permitan

dirigir el flujo de calor contra un gradiente de temperatura [29, 30]. En la literatura se pueden encontrar diferentes propuestas: bombas térmicas (fonónicas) a nivel molecular producidas por fuerzas o campos externos dependientes del tiempo, bombas microscópicas basadas en sistemas nanomecánicos bajo la acción de barreras fonónicas generadas por potenciales dependientes del tiempo o mecanismos nano-mecánicos basados en interruptores de encendido/apagado de una perturbación [29, 31–36].

Experimentalmente, se pueden realizar acciones nanomecánicas variando la distancia en juntas moleculares, dispositivos que consisten en la unión de una molécula a dos contactos (reservorios locales) [37–41]. Un esquema ilustrativo de estas juntas puede apreciarse en la Fig.5.

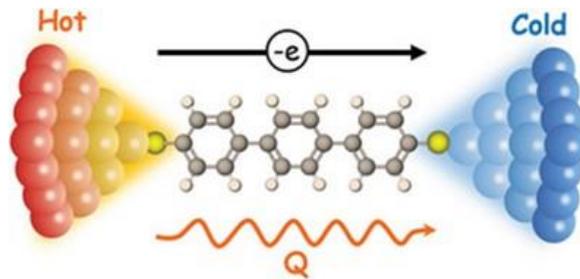


Figura 5: Esquema del efecto termoeléctrico en una junta molecular que consta de una molécula conectada a dos contactos a diferentes temperaturas. Imagen tomada de Ref. [42].

Se ha demostrado teóricamente que las acciones mecánicas de estiramiento (o compresión) en juntas moleculares a través de una cadena de alcanos puenteada entre electrodos de grafeno, pueden cambiar la estructura de las bandas fonónicas posibilitando la apertura o cierre de múltiples canales fonónicos [43], lo que afecta la conductancia térmica del sistema. Este efecto abre la posibilidad de controlar el flujo de calor por medio de una modulación accionada mecánicamente a escala molecular. Un esquema representativo de este experimento puede ser apreciado en

la Fig.6. Un efecto similar se encontró en el caso de un nanohilo, donde la conductancia térmica se encuentra cuantificada en múltiples niveles [44] dependiendo de la intensidad del estiramiento o compresión a la cual es sometido.

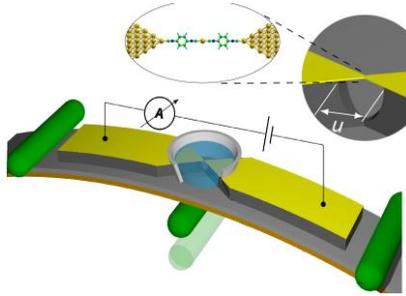


Figura 6: Representación de un experimento de juntas moleculares. El distanciamiento entre los contactos se realiza de manera mecánica. Imagen tomada de Ref. [41].

Transporte de calor mediado por fonones

Un fonón es un estado vibracional (o modo cuantizado vibratorio) que es capaz de transportar energía. Los fonones están presentes por ejemplo, en redes cristalinas como la red atómica de un sólido y en algunos líquidos y juegan un papel importante en muchas de las propiedades físicas de la materia condensada. El nombre fonón viene del griego $\varphi\omega\nu\acute{\epsilon}$: *foné*, que puede traducirse como “sonido” o “voz”. Esto se deriva del hecho de que las vibraciones periódicas de la materia con grandes longitudes de onda (es decir, fonones de gran longitud de onda) producen el sonido como lo conocemos.

En un sólido hay fonones acústicos, más deslocalizados y de baja frecuencia, y ópticos, de más alta frecuencia y localizados [45]. Los fonones, al igual que los electrones o fotones, pueden ser dispersados por otros fonones, por defectos

en la red, por impurezas, por interfases, y por otros portadores como electrones o fotones [46]. Dependiendo de cómo sean estos procesos de dispersión o scattering, el transporte resultante puede resultar balístico, difusivo, superdifusivo o subdifusivo [47–49].

El transporte balístico corresponde a la propagación directa de energía de un punto a otro punto (o transporte punto a punto), es decir, la ausencia de mecanismos de dispersión diferentes de los reflejos especulares de fonones en la superficie, y donde el camino libre medio λ (distancia promedio recorrida por los fonones entre dos eventos sucesivos de dispersión) verifica que $\lambda \propto \tau$, donde τ es el tiempo necesario para recorrer L (longitud característica del sistema). Este tipo de transporte se da principalmente en estructuras ordenadas en las cuales $\lambda \gg L$ (Fig.7-a). Este tipo de transporte balístico se ha encontrado experimentalmente en nanotubos de carbono de longitudes de hasta los μm [50].

El transporte es difusivo o “normal” se produce cuando $L \gg \lambda$, y por lo tanto hay numerosas colisiones fonón-fonón durante el proceso de transporte (Fig.7-b). Este es el régimen que responde a la ley de Fourier que rige los procesos normales de conducción de calor en un material [51], y donde la ley de escaleo es $\lambda \propto \sqrt{\tau}$.

Debido a que el camino libre medio de un fonón va desde algunos nanómetros hasta decenas de micrones, existen también una gran variedad de materiales, en donde se encuentran otros regímenes conocidos como superdifusivos o cuasi-balísticos [52] (Fig.7-c), o incluso subdifusivos para el caso de aislantes térmicos.

En general, la violación de la ley de Fourier se encuentra en los sistemas denominados de baja dimensión, en cuyo caso se dice que el transporte es anómalo, es decir que la conductividad térmica depende del tamaño del sistema. Por ejemplo, se ha encontrado que la conductancia térmica en nanotubos de carbono (sistema 1D) depende de la longitud del sistema [53], evidencia clara de un transporte anó-

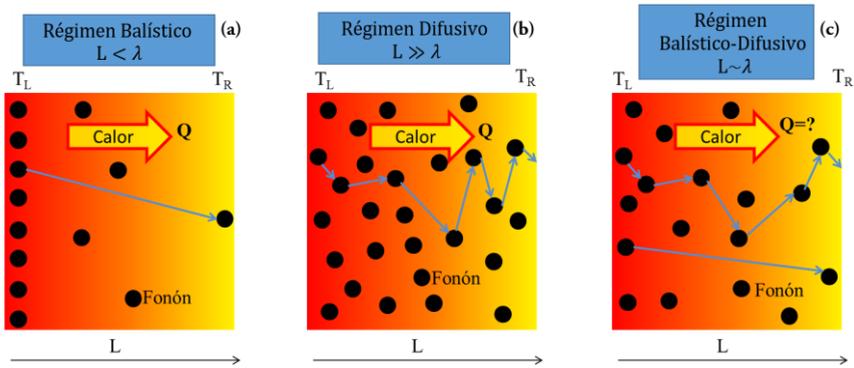


Figura 7: Esquema de la dinámica de fonones en los regímenes de conducción (a) balístico, (b) difusivo, y (c) balístico-difusivo (cuasi-balístico).

malo no observados en sistemas macroscópicos. Se denominan sistemas de baja dimensión a aquellos que tienen al menos alguna dimensión que es intermedia entre aquella característica de átomos o moléculas y las de un material macroscópico o volumétrico. Dependiendo de cuántas dimensiones presentan esta propiedad encontramos sistemas que se comportan como si efectivamente estuvieran en dos dimensiones (ej. gas 2D de electrones), una dimensión (nanotubos) o dimensión cero (puntos cuánticos). En este estado intermedio algunas propiedades de los sistemas de baja dimensión son muy diferentes de sus contrapartes macroscópicas. Generalmente son propiedades ópticas, electrónicas, magnéticas o como en el caso de esta tesis, térmicas. Estos sistemas suelen tener tamaños que van desde la micro a la nanoescala y en los cuales el movimiento de los portadores (electrones, fotones o fonones) suele estar fuertemente restringido o confinado, dando origen a fenómenos novedosos que no se encuentran cuando todas las dimensiones son macroscópicas.

Para entender el mecanismo subyacente que gobierna el transporte térmico en sistemas de baja dimensión, hay que comenzar a comprender sus propiedades a nivel atómico, a partir de descripciones atomísticas o microscópicas tanto clásicas

como cuánticas dependiendo del sistema a estudiar. Los tratamientos clásicos son adecuados para sistemas en regímenes de alta temperatura (temperaturas mayores que la temperatura de Debye (T_D) [54, 55]). Para sistemas de muy baja temperatura o con dimensiones menores o del orden de caminos libres medios o longitudes de coherencia de los portadores, los métodos clásicos ya no resultan válidos y es necesario utilizar una teoría de transporte cuántico.

Esta amplia gama de fenómenos novedosos con gran potencial para su aplicabilidad en el desarrollo tecnológico requieren un abordaje más profundo para su mayor comprensión y son los que motivan la realización de esta tesis. Por lo tanto, este trabajo se encuentra organizado de la siguiente manera: el primer capítulo está destinado a estudiar el transporte de calor en una cadena clásica de osciladores bajo la acción de dos fuentes de no equilibrio, presentando los fundamentos teóricos, técnicas de simulación utilizados y resultados. En el capítulo 2 se estudia el transporte de calor en una cadena cuántica de osciladores bajo la acción de una perturbación temporal AC (se utiliza la sigla AC para el caso de perturbaciones o corrientes con una dependencia temporal periódica). Se repasan conceptos de la teoría de sistemas fuera del equilibrio en el marco del formalismo de las funciones de Green de Keldysh y se presenta su aplicación al estudio de transporte de calor en sistemas con potenciales temporales periódicos. Luego en el capítulo 3 extendemos el estudio del capítulo 2 al caso de interacciones no locales entre átomos. Por último, se resumen las principales conclusiones y resultados de esta tesis y se plantean posibles extensiones a futuro del trabajo.

Capítulo 1: Transporte de calor en un sistema clásico unidimensional

Introducción

Con el objetivo de abordar el estudio del transporte de calor de forma conceptual, es conveniente proponer modelos sencillos pero que incorporen las características más relevantes. Aunque existen modelos más elaborados que suelen considerar potenciales empíricos o semi-empíricos entre partículas, un modelo más simple permitirá capturar la física subyacente en forma más clara, sirviendo como base para un estudio más realista. Estos modelos suelen basarse en redes atómicas unidimensionales o bidimensionales de átomos interactuantes, plataformas ideales para modelar sistemas de baja dimensión. Una ventaja crucial de estos modelos es que su abordaje es posible con una técnica de simulación llamada dinámica molecular (*DM*) lo cual, a diferencia de otras técnicas, permite incorporar las anarmonicidades en las interacciones atómicas, que causan los procesos de scattering fonón-fonón. Esta técnica se denomina dinámica molecular clásica (*DMC*)

cuando permite capturar las trayectorias de los átomos y moléculas a partir de la resolución numérica de las ecuaciones clásicas de movimiento (ecuaciones de Newton) de un sistema de partículas interactuantes y donde las fuerzas se pueden calcular a partir de potenciales sencillos o empíricos. Dado que esta es una descripción clásica, los efectos cuánticos se desprecian. Su implementación para el estudio térmico es adecuada entonces, cuando las temperaturas son tales que es válido considerar una distribución clásica de fonones, es decir una distribución de Boltzmann $\eta(\omega) = e^{-\frac{k\omega}{k_B T}}$, en lugar de la distribución de Bose-Einstein $\eta(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{k\omega}{k_B T}} - 1}$, donde k_B es la constante de Boltzmann, k es la constante de Planck reducida y ω es la frecuencia. Por lo tanto, en las simulaciones de *DMC* se aplica el teorema de equipartición, lo que significa que a cualquier temperatura T todos los fonones térmicamente activados o excitados, sean cuales sean sus frecuencias, tendrán la misma energía $k_B T$. Esta aproximación es válida en tanto se consideren temperaturas mucho mayores que la temperatura de Debye T_D . A temperaturas más bajas que T_D , los fonones de alta frecuencia son sólo parcialmente activados a diferencia del caso clásico considerado en *DM*. Por otro lado, a temperaturas ambiente, la longitud de onda de De Broglie de los átomos es menor que la distancia interatómica y por lo tanto los átomos pueden ser tratados clásicamente, por lo que el modelado y simulación clásico es una aproximación adecuada. Además como ya se mencionara más arriba, la relación entre el tamaño del sistema y las longitudes de coherencia y caminos libres medios también es otro aspecto importante a considerar al momento de decidir si una descripción clásica o cuántica podrá ser más adecuada.

Independientemente de la descripción que se considere, para que un sistema pueda rectificar la corriente térmica se requieren diferentes ingredientes. Una alternativa es romper alguna simetría espacial o introducir anarmonicidades en los potenciales de interacción [44, 56–64]. Se ha demostrado que se requiere la pre-

sencia de no linealidades al momento de diseñar nuevos nanodispositivos térmicos de estado sólido tales como diodos térmicos [12, 13, 22, 27, 65], transistores térmicos [21], puertas térmicas lógicas [66] y memorias térmicas [67, 68]. Otra camino es romper simetrías temporales incorporando fuentes de no equilibrio [8, 69, 70] originadas por campos o perturbaciones termomecánicas dependientes del tiempo. Es sabido que la transferencia de calor se da espontáneamente desde la región de alta a la de baja temperatura, por lo que el control del flujo de calor se basa fundamentalmente en el control de los gradientes de temperatura. Sin embargo, en la práctica no es sencillo sostener grandes gradientes de temperatura en pequeñas distancias, especialmente en la nanoescala. Consecuentemente una pregunta que surge es si es posible crear y controlar corrientes de calor a favor y en contra de gradientes térmicos que pueden sufrir fluctuaciones o variaciones temporales. Debido a las potenciales aplicaciones tecnológicas que estos modos de trasferencias tendría, cualquier intento que permita una comprensión más cabal de los mecanismos implicados en la manipulación dinámica del calor en sistemas de baja dimensión conlleva gran interés. En este capítulo vamos a estudiar el transporte de calor en sistemas clásicos unidimensionales mediante el modelo de Frenkel-Kontorova (FK), cuando estos sistemas operan alejados del equilibrio debido a la presencia de fuentes termomecánicas dependientes del tiempo.

Modelo Frenkel-Kontorova

En 1938, Frenkel y Kontorova propusieron el modelo que lleva sus nombres para estudiar la estructura y dinámica de una red cristalina en la cercanía de núcleos de dislocación [71–74]. A pesar de la aparente simpleza del modelo, ha sido aplicado a una gran variedad de sistemas físicos, dislocaciones en materiales, procesos de adsorción en superficies, imperfecciones reticulares en cristales por el

agregado de átomos (impurezas) [75–77], paredes de dominio en estructuras ordenadas magnéticamente [78], juntas Josephson [79], cadenas unidas por puente de hidrógeno [80] y desnaturalización del ADN [81]. En física de materia condensada y física no lineal este modelo también ha sido usado para estudiar conducción térmica y procesos de transporte fonónico [15, 66, 68, 82–84].

Por otra parte, diferentes trabajos de la literatura [85–92] muestran que en aplicaciones prácticas los dispositivos o nanoestructuras en condiciones de operación suelen estar acoplados o depositados sobre medios materiales, que afectarán los procesos de transferencia térmica. El modelo Frenkel-Kontorova (FK) es un modelo simple que describe la dinámica de una cadena de partículas o átomos interactuantes, con interacciones locales (primeros vecinos), y que están en interacción con un potencial de sitio periódico, el cual modela la presencia de un sustrato material periódico. Un esquema de dicha cadena de partículas se muestra en la Fig.8. Dicho esquema describe una cadena unidimensional de átomos que

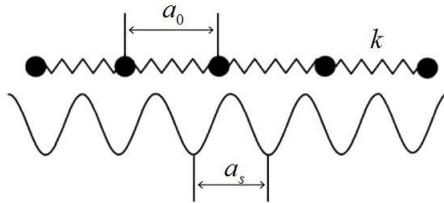


Figura 8: Esquema representativo del Modelo Frenkel-Kontorova.

sólo pueden vibrar longitudinalmente en torno a sus posiciones de equilibrio (se desprecia el movimiento transversal).

El hamiltoniano para este sistema está dado por:

$$H = E_{cin} + U, \quad (1)$$

donde E_{cin} es la energía cinética y U es la energía potencial. La energía cinética

E_{cin} es definida de la siguiente manera:

$$E_{cin} = \sum_n \frac{m}{2} \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2, \quad (2)$$

donde m_n y x_n son la masa y la posición de la n -ésima partícula de la cadena respectivamente. La energía potencial U de la cadena se compone de dos partes:

$$U = U_{sus} + U_{int}. \quad (3)$$

El primer término U_{sus} representa la interacción de la cadena con un potencial de sitio externo periódico (sustrato)

$$U_{sus} = - \frac{V_0}{4\pi^2} \sum_n \cos \frac{2\pi x_n}{a_s}, \quad (4)$$

donde V_0 es la amplitud del potencial y a_s es el período del mismo (ver Fig.8). El segundo término U_{int} da cuenta del acoplamiento lineal entre los primeros vecinos de la cadena:

$$U_{int} = \sum_n \frac{K}{2} (x_{n+1} - x_n - a_0)^2, \quad (5)$$

donde K es la constante elástica y a_0 es la posición de equilibrio del potencial interpartículas (o constante de red). Entonces, el hamiltoniano más general resulta

$$H = E_{cin} + U_{sus} + U_{int}. \quad (6)$$

El modelo

Consideramos un arreglo unidimensional de átomos que interactúan a primeros vecinos a través de un potencial armónico. La cadena está dividida en dos segmentos (I, II) con diferentes constantes de acoplamiento entre elementos K_i y

K_{II} respectivamente. Ambos segmentos también interactúan armónicamente con una constante de acoplamiento K_{int} . El sistema está sujeto a un potencial de sitio periódico y tiene sus extremos fijos a dos reservorios térmicos del tipo Langevin con temperaturas $T_{L,R}$. Una breve descripción de este termostato se presenta más adelante en la sección “Termostato Langevin”. La Fig.9 se muestra el esquema correspondiente al modelo que estudiaremos.

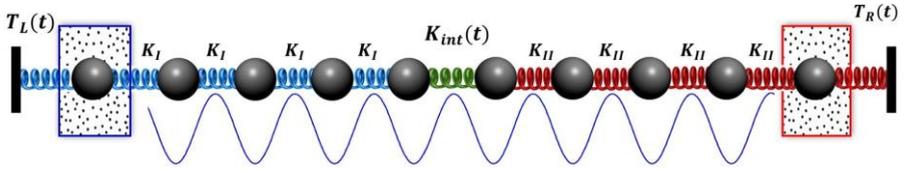


Figura 9: Esquema del sistema compuesto por dos cadenas unidimensionales acopladas por una interacción modulada temporalmente y acoplada en sus extremos a dos reservorios térmicos del tipo Langevin.

Al sistema entonces, se lo aleja del equilibrio por dos mecanismos distintos. El primero se debe a la modulación temporal periódica del acoplamiento entre segmentos con frecuencia ω_K , de forma tal que $K_{int}(t) = K_0(1 + \text{sen}(\omega_K t))$. El segundo, contempla la modulación temporal, también periódica, del valor de la temperatura de los reservorios con una frecuencia ω_{temp} , de forma tal que $T_\beta(t) = T_{\beta,0}(1 + \Delta \text{sgn}(\text{sen}(\omega_{temp} t)))$, siendo $T_{\beta,0}$ la temperatura de referencia de cada reservorio $\beta = L, R$ y donde sgn es la función signo. Más adelante se detallan cada uno de estos casos.

El hamiltoniano del sistema puede ser escrito como:

$$H = H_I + H_{int} + H_{II},$$

donde H_I es el hamiltoniano del segmento izquierdo, H_{II} del segmento derecho y H_{int} representa la interacción entre ambos segmentos.

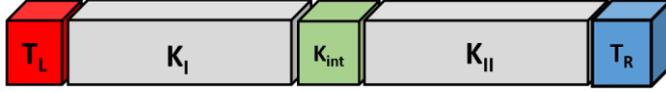


Figura 10: Esquema del modelo resumido. Los cuadrados rojo y azul representan los reservorios térmicos con temperaturas T_L y T_R respectivamente, conectados en los extremos de la cadena central.

$$H_\alpha = \sum_{i=1}^{N_\alpha} \frac{p_{i,\alpha}^2}{2m_{i,\alpha}} + \frac{1}{2} K_\alpha (x_{i+1,\alpha} - x_{i,\alpha} - a)^2 - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos \left(2\pi \frac{x_{i,\alpha}}{a_s} \right), \quad (7)$$

con N_α el número total de átomos del segmento $\alpha = I, II$. a representa la posición de equilibrio de la partícula y a_s es la periodicidad del potencial de sitio, y $p_{i,\alpha}$ es el momento lineal del i -ésimo átomo. K_α es la constante elástica de cada segmento α , y V_0 es la amplitud del potencial de sitio.

El hamiltoniano de la interacción puede ser escrito como:

$$H_{int} = \frac{1}{2} K_{int}(t) (x_{1,II} - x_{N,I} - a)^2, \quad (8)$$

siendo $m_{i,\alpha}$ e $x_{i,\alpha}$ la masa y la posición (absoluta) del i th átomo respectivamente de la cadena α . Sea $X_{i,I} = x_{i,I} - ia$, la posición relativa respecto de la posición de equilibrio de la partícula i perteneciente al segmento I , y $X_{i,II} = x_{i,II} - (N_I a + ia)$, la posición relativa respecto de la posición de equilibrio de la partícula i perteneciente al segmento II , podemos reescribir el hamiltoniano respecto de

dicho sistema:

$$\begin{aligned}
H_I &= \sum_{i=1}^{N_I} \frac{p_{i,I}^2}{2m_{i,I}} + \frac{1}{2} K_I (X_{i+1,I} + a(i+1) - X_{i,I} - ia - a)^2 + \\
&\quad - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos 2\pi \frac{(X_{i,I} + ia)}{a_s} , \\
H_I &= \sum_{i=1}^{N_I} \frac{p_{i,I}^2}{2m_{i,I}} + \frac{1}{2} K_I (X_{i+1,I} + ai + a - X_{i,I} - ia - a)^2 + \\
&\quad - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos 2\pi \frac{X_{i,I}}{a_s} + 2\pi \frac{ia}{a_s} , \\
H_I &= \sum_{i=1}^{N_I} \frac{p_{i,I}^2}{2m_{i,I}} + \frac{1}{2} K_I (X_{i+1,I} - X_{i,I})^2 - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos 2\pi \frac{X_{i,I}}{a_s} , \quad (9)
\end{aligned}$$

ya que $a - a_s = 0$ dado que el sistema es commensurado, es decir, la periodicidad del potencial de sitio coincide con la posición de equilibrio de los átomos. Por otro lado, el hamiltoniano del segmento II respecto de dicho sistema resulta

$$\begin{aligned}
H_{II} &= \sum_{i=1}^{N_{II}} \frac{p_{i,II}^2}{2m_{i,II}} + \\
&\quad + \frac{1}{2} K_{II} [(X_{i+1,II} + N_I a + (i+1)a) - (X_{i,II} + N_I a + ia) - a]^2 + \\
&\quad - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos 2\pi \frac{(X_{i,II} + N_I a - ia)}{a_s} , \\
H_{II} &= \sum_{i=1}^{N_{II}} \frac{p_{i,II}^2}{2m_{i,II}} + \frac{1}{2} K_{II} (X_{i+1,II} - X_{i,II})^2 - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos 2\pi \frac{X_{i,II}}{a_s} , \quad (10)
\end{aligned}$$

De la misma forma, el hamiltoniano de la interacción puede ser escrito como:

$$H_{int} = \frac{1}{2} K_{int}(t) (X_{1,II} - X_{N,I})^2 \quad (11)$$

Los extremos de los segmentos I, II están en contacto con dos baños térmicos $\beta = L, R$, cada uno con una temperatura de T_β , los cuales son simulados a través

de reservorios del tipo Langevin.

Para mayor simplicidad en nuestros cálculos numéricos trabajaremos con variables adimensionales. Consideramos posiciones en unidades de a , constantes elásticas K_i en unidades de K_R , momentos en unidades de $[a(mK_R)^{1/2}]$, frecuencias en unidades de $[(K_R/m)^{1/2}]$ y temperatura en $[a^2K_R/k_B]$. Es interesante notar que el modelo propuesto puede ser realizado experimentalmente para un átomo típico con constante de red $a_s \sim 0.1\text{nm}$, masa $m \sim 10^{-26}\text{kg}$ y frecuencias $\omega \sim 1 - 10\text{GHz}$, que corresponden a rangos de las microondas. La adimensionalización propuesta considera constantes elásticas de referencia $K_{ref} \sim 10\text{nN/nm}$, que son del orden de constantes locales vibracionales de estructuras moleculares o cristalinas. Las temperaturas se expresan en unidades de $T_0 \sim 10^4\text{K}$ elegida como referencia. De esta manera, los valores de temperatura adimensionales considerados en este trabajo, corresponden a temperaturas absolutas $T \sim 5 \times 10^2 - 10^3\text{K}$, que son del orden o mayores que los típicos de la temperatura de Debye, por ejemplo para átomos de C o Si.

Por otro lado, y con el fin de modelar el transporte de energía debido únicamente a fonones, es necesario considerar escalas temporales en las que las interacciones con otros portadores puedan ser despreciadas. Las adimensionalizaciones y parámetros considerados verifican que las frecuencias características de nuestro sistema son menores que la inversa de los tiempos típicos de relajación de la interacción electrón-fonón en semiconductores ($\sim 1\text{fs} - 0.1\text{ps}$).

Reservorios térmicos

Al hablar de un reservorio térmico (también denominado termostato, o baño térmico), nos referimos a un sistema termodinámico grande que posee una temperatura (media) constante en todo momento aún si provee de manera inagotable energía a otro sistema.

Generalmente las simulaciones de *DM* se realizan en el ensamble microcanónico (NVE) donde magnitudes como el número de partículas, volumen y energía se mantiene constante (sistema aislado) y donde la temperatura se estima utilizando promedios termodinámicos [55]. Sin embargo, muchas veces se necesita definir la temperatura a priori, como es el caso de la evolución dinámica de sistemas en contacto con otros sistemas más grandes, o inmersos en otros medios que tienen una dada temperatura. En este caso se requiere hacer simulaciones *DM* en el ensamble canónico (NVT), en el que el sistema intercambia energía con el medio circundante manteniendo su volumen, número de partículas y temperatura constantes. Existe una gran variedad de termostatos que se utilizan en *DM* y que permiten agregar y quitar energía a un sistema de manera realista, aproximándose de gran medida al ensamble canónico. Las técnicas más usuales para controlar la temperatura incluyen el termostato Anderson, el termostato Berendsen, el termostato Nosé-Hoover y termostato Langevin [93–97]. Estos modelos de termostatos se utilizan para simular diferentes tipos de entornos y contactos, pudiendo ser locales o globales dependiendo de que el sistema está totalmente inmerso o localmente en contacto con el reservorio. En esta tesis utilizamos termostatos del tipo Langevin.

Termostato Langevin

En 1908, el físico francés Paul Langevin [98] formuló una descripción fenomenológica del movimiento errático de una partícula pesada inmersa en un fluido de partículas livianas (movimiento browniano). La ecuación propuesta por Langevin da cuenta de la dinámica de dicha partícula pesada debido a las colisiones estocásticas y fuerzas de arrastre viscoso debido a la interacción con las más livianas. Por lo que esta descripción resulta adecuada en aquellos sistemas soluto-solvente donde se desea estudiar solo el comportamiento del soluto, por ejemplo en proteínas, ADN, nanopartículas en solución.

Las simulaciones *DM* basadas en una dinámica de Langevin asumen que los átomos están inmersos en un medio viscoso constituido por partículas mucho más pequeñas, y donde la temperatura del sistema es controlada como si estuviera en contacto con un termostato, siendo una buena aproximación a un ensamble canónico.

Como todo termostato, tiene sus ventajas y desventajas, que según el sistema que se considere deben ser analizadas críticamente al momento de realizar la elección de alguno en particular. Una gran ventaja de realizar simulaciones de *DM* con termostatos de Langevin es que como el solvente es modelado a partir de fuerzas efectivas estocásticas y disipativas, permite simulaciones substancialmente más largas y menos costosas computacionalmente, que aquellas que requieren introducir explícitamente las ecuaciones microscópicas para el solvente. Esta técnica es una excelente alternativa en *DM* para el estudio de diversos sistemas y la aplicaremos en muchas de las simulaciones en esta tesis.

La ecuación de Langevin está dada por

$$m\ddot{x}(t) = f(x(t)) - m\gamma\dot{x}(t) + \zeta(t), \quad (12)$$

que puede reescribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= v(t), \\ m\dot{v}(t) &= f(x(t)) - m\gamma v(t) + \zeta(t). \end{aligned} \quad (13)$$

El primer término de la derecha representa la fuerza que actúa sobre el átomo debido al potencial de interacción definida como $f = -\frac{\partial H}{\partial x}$. El segundo es la fuerza disipativa (fricción viscosa), donde γ es el llamado coeficiente de fricción. Este coeficiente da cuenta de la calidad del acoplamiento entre el reservorio y el sistema en referencia a la eficacia de intercambio de calor entre estos. El último

término, $\zeta(t)$, es la fuerza aleatoria producto de las colisiones estocásticas que pueden sufrir las partículas en el medio, la cual depende de la temperatura y del coeficiente de viscosidad y cuyas características se detallan más adelante.

El acoplamiento de un reservorio térmico del tipo Langevin en cada extremo de un sistema unidimensional consiste en la incorporación de la dinámica dada por la ecuación de Langevin a las partículas en contacto con dicho reservorio ($i = 1$ e $i = N$). Es decir, los reservorios del tipo Langevin se definen principalmente por adicionar una fuerza estocástica y otra disipativa en la ecuación de movimiento de las partículas en contacto con los baños térmicos (L, para el reservorio izquierdo; R, para el derecho). Las ecuaciones de movimiento del sistema estarán dadas por:

$$\begin{aligned}\dot{p}_1 &= f_1 - \nu_L p_1 + \zeta_L(t), \\ \dot{p}_i &= f_i \text{ para } i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \dot{p}_N &= f_N - \nu_R p_N + \zeta_R(t),\end{aligned}\tag{14}$$

Los términos dados por $\zeta_{L,R}$ son los correspondientes al ruido térmico (ruido blanco Gaussiano) de media cero ($\langle \zeta_{L,R}(t) \rangle = 0$), y relacionados con los coeficientes de disipación $\nu_{L,R}$ de la siguiente manera:

$$\langle \zeta_L(t) \zeta_L(t') \rangle = 2k_B T_L \nu_L \delta(t - t'),\tag{15}$$

$$\langle \zeta_R(t) \zeta_R(t') \rangle = 2k_B T_R \nu_R \delta(t - t'),\tag{16}$$

$$\langle \zeta_L(t) \zeta_R(t') \rangle = 0,\tag{17}$$

donde $T_{L,R}$ son las temperaturas de los reservorios izquierdo y derecho respectivamente. Cabe destacar, que no existe correlación entre las fuerzas estocásticas (ruido térmico) y las velocidades de las partículas que conforman el sistema. Por otro lado, tampoco existe correlación entre estas fuerzas estocásticas de cada reservorio, es decir, los reservorios se encuentran descorrelacionados (Ec. 17).

En este trabajo estudiamos el transporte térmico a través de estructuras que están fijas por sus extremos, conectadas a dos sistemas más grandes y en equilibrio termodinámico (reservorios). Para incorporar esta característica, las ecuaciones de Langevin se integran considerando condiciones de contorno de borde fijo. Las partículas en las posiciones $i = 0$ e $i = N + 1$ representan los bordes fijos y mantienen sus posiciones inalteradas durante toda la evolución dinámica.

Para resolver el sistema representado por las Ec.14 debe aplicarse un método de integración numérico que será descrito en una sección posterior.

Flujo de calor

Dado un sistema hamiltoniano, el método más comúnmente utilizado para estudiar el transporte de calor en estado estacionario es el de conectar a dicho sistema a reservorios térmicos o fuentes de calor y estudiar la corriente de calor y la conductividad térmica del sistema usando diferentes técnicas. A continuación abordaremos a la definición formal de la corriente de calor que fluye en un sistema clásico de baja dimensión.

Cálculo de la corriente de calor en un sistema unidimensional

Consideremos un sistema unidimensional compuesto por una cadena de N osciladores acoplados de masa m_i , que interactúan mediante la acción de un potencial armónico U_{int} a primeros vecinos (interacciones locales) y que se encuentran bajo la acción de un potencial externo U_{sus} . La cadena se encuentra además conectada a dos reservorios térmicos Langevin por sus extremos. El hamiltoniano más general para este sistema resulta:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + U_{sus}(x_i) + \sum_{i=1}^{N-1} U_{int}(x_i - x_{i+1}). \quad (18)$$

La ecuación dinámica toma la forma $\dot{p}_i = f_i + \delta_{i,1}f_{1,L} + \delta_{i,N}f_{N,R}$, donde $f_{1,L}$ es la fuerza que realiza el termostato L sobre la partícula 1 y $f_{N,R}$ es la fuerza que realiza el termostato R sobre la partícula N y f_i es la fuerza newtoniana sobre la partícula i . La tasa de trabajo (potencia inyectada) que realizan dichos reservorios térmicos, izquierdo (L) y derecho (R) respectivamente, sobre el sistema es:

$$j_{1,L} = f_{1,L}v_{1L}$$

$$j_{N,R} = f_{N,R}v_{N,R}$$

donde $j_{1,L}$ y $j_{N,R}$ son las corrientes de energía (calor) instantáneas que fluyen desde los reservorios al sistema. La corriente local de energía dentro del sistema la podemos definir a partir de la ecuación de continuidad (discretizada) de la energía dada por:

$$\dot{e}_1 = -j_{2,1} + j_{1,L},$$

$$\dot{e}_i = -j_{i+1,i} + j_{i,i-1}, \quad \text{para } i = 2, 3, \dots, N - 1$$

$$\dot{e}_N = -j_{N,R} + j_{N,N-1},$$

donde e_i es la tasa de cambio de la energía local del sitio i -ésimo de la cadena central. Sea $j_{i,i-1}$ es la corriente que fluye desde el sitio $i - 1$ al sitio i (ver Fig.11) definida por:

$$j_{i,i-1} = f_{i,i-1}v_{i-1} \tag{19}$$

donde $f_{i,i-1}$ es la fuerza que $i - 1$ ejerce sobre la partícula i . Del mismo modo, la corriente que fluye desde el sitio i al sitio $i - 1$ es

$$j_{i-1,i} = f_{i-1,i}v_{i-1} \tag{20}$$

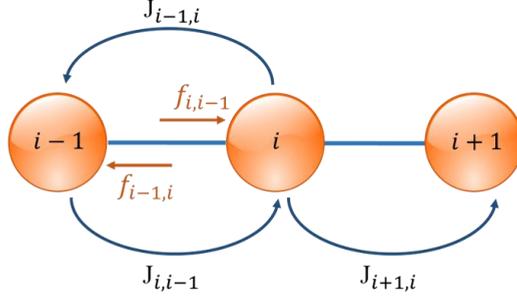


Figura 11: Esquema de la corriente entre elementos de la cadena.

teniendo en cuenta que $j_{i,i-1} = -j_{i-1,i}$ por la ecuación de continuidad y que $f_{i-1,i} = -f_{i,i-1}$, restando las Ec.19 y Ec.20 obtenemos

$$j_{i,i-1} = \frac{1}{2}(v_i + v_{i-1})f_{i,i-1}. \quad (21)$$

Tomando el promedio temporal denotado por $\langle \dots \rangle_t$ de dicha cantidad sobre el promedio en un ensamble de realizaciones denotado por $\langle \dots \rangle$:

$$\langle \langle j_{i,i-1} \rangle \rangle_t = \langle \langle \frac{1}{2}(v_i + v_{i-1})f_{i,i-1} \rangle \rangle_t. \quad (22)$$

Este valor medio en la corriente es el valor medio de la corriente de energía que fluye desde sitio $i-1$ al i . Cuando todo el sistema alcanza un estado estacionario se cumple que los valores medios de la corriente que fluye por cada enlace son iguales entre ellas [47,48], es decir:

$$J = \langle \langle j_{1,2} \rangle \rangle_t = \langle \langle j_{2,3} \rangle \rangle_t = \langle \langle j_{3,4} \rangle \rangle_t = \dots = \langle \langle j_{N,N-1} \rangle \rangle_t = -\langle \langle j_{N,R} \rangle \rangle_t. \quad (23)$$

En el caso de nuestro sistema particular, que consiste en dos cadenas FK acopladas conectadas a los reservorios térmicos en los extremos izquierdo y derecho, ver Fig.9, las corrientes de energía que fluye por cada sitio dentro de cada segmento α es la

misma al llegar al estado estacionario. Por lo que la corriente que fluye hacia o desde cada reservorio es igual a la corriente dentro de cada segmento α :

si $\alpha = I$

$$J_L = \langle \langle j_{1,L} \rangle \rangle_t = \langle \langle j_{2,1} \rangle \rangle_t = \langle \langle j_{3,2} \rangle \rangle_t = \cdots = \langle \langle j_{\frac{N}{2}, \frac{N}{2}-1} \rangle \rangle_t, \quad (24)$$

si $\alpha = II$

$$J_R = \langle \langle j_{\frac{N}{2}+2, \frac{N}{2}+1} \rangle \rangle_t = \langle \langle j_{\frac{N}{2}+3, \frac{N}{2}+2} \rangle \rangle_t = \cdots = \langle \langle j_{N, N-1} \rangle \rangle_t = \langle \langle j_{R, N} \rangle \rangle_t. \quad (25)$$

En nuestras simulaciones, establecemos que hemos llegado al estado estacionario cuando se cumplan las Ecs.24 y 25 dentro de un margen de aproximación razonable, esto es, cuando la diferencia de la corriente de energía que fluye entre los enlaces es menor que un valor establecido ϵ muy pequeño. Es decir, un estado estacionario en el transporte de calor, implica que el flujo de energía local promedio es constante a lo largo de la cadena. En los extremos de la cadena, uno encuentra que, para cualquier elección del baño térmico, el flujo de calor es igual al flujo de energía hacia el reservorio correspondiente.

De la ecuación de continuidad, la corriente de energía que fluye desde y hacia una partícula podría cancelarse una con la otra cuando el sistema se encuentre en el estado estacionario, entonces no hay variaciones locales en el valor medio de la corriente de energía. La corriente de calor local (por enlace) dependiente del tiempo es calculada como:

$$J_i(t) = K_i \dot{x}_i(t) [x_i(t) - x_{i-1}(t)]. \quad (26)$$

Definimos la corriente neta de calor en cada segmento (que fluye desde/hacia los reservorios L, R) $J_{L,R}$ en un régimen estacionario, promediando sobre tiempo τ su-

ficientemente largo. En el caso de que esté presente en el sistema una perturbación periódica, el tiempo τ será un número entero de períodos de la misma.

$$J_{L,R} = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \langle J_i(t) \rangle dt. \quad (27)$$

En estado estacionario la corriente DC $J_{L,R}$ es independiente del sitio en cada segmento, como muestra la Ec.23 (la sigla DC denota corriente directa). De la misma manera, la temperatura cinética efectiva es definida como:

$$T_{eff}(i) = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \langle \frac{1}{2} m \dot{x}'_i(t)^2 \rangle dt. \quad (28)$$

Por otro lado, la conservación de la potencia total implica que la potencia (P) inyectada por los agentes externos hacia dentro del sistema es disipada hacia los reservorios, entonces:

$$P = \dot{W} = \dot{Q}_R + \dot{Q}_L = J_R + J_L, \quad (29)$$

donde \dot{Q}_L y \dot{Q}_R son las tasas de calor absorbido por el reservorio L y R respectivamente (definida positiva cuando el calor fluye hacia el reservorio, ver Fig.12, y \dot{W} es la tasa de trabajo (potencia) realizado por el contacto.

Métodos de simulación

La subsección anterior nos muestra que el cálculo de los flujos de calor implica conocer las posiciones y velocidades de un conjunto de partículas (átomos, moléculas, etc), en términos de su estructura y de las interacciones microscópicas entre ellas. Existen diferentes técnicas numéricas aptas para resolver este tipo de problemas.

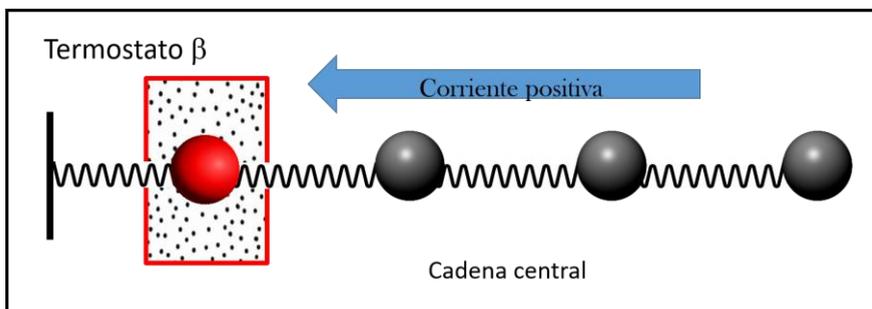


Figura 12: Esquema representativo del flujo de calor. Definido positivo cuando el calor es inyectado hacia el termostato β .

Las dos familias principales son los métodos de Monte Carlo y los de Dinámica Molecular (*DM*) [99–101], siendo esta última determinista, a diferencia de las primeras que tienen una naturaleza estocástica.

La dinámica molecular es aplicable a diferentes escalas, desde las macroscópicas hasta el nivel molecular y/o atómico. Definiendo los campos de fuerzas, estas técnicas permiten simular computacionalmente la evolución temporal de un conjunto de átomos interactuantes para obtener valores medios de propiedades físicas macroscópicas, a partir de la integración de las trayectorias microscópicas de un sistema de muchos cuerpos realizando promedios sobre ensambles de dichas trayectorias.

Esencialmente las simulaciones de *DM* refieren a la integración en tiempo de las ecuaciones de Hamilton usualmente acopladas a reservorios de calor o presión. Es decir, esta técnica involucra el cálculo de las interacciones moleculares con la adecuada incorporación de vínculos y condiciones de contorno.

Mediante las simulaciones numéricas y los promedios sobre los ensambles se puede definir entonces el estado termodinámico del sistema a partir de los valores de variables macroscópicas denominadas funciones de estado que vienen relacionadas por una ecuación de estado.

Métodos Verlet de integración

Hay varias versiones de este método, esencialmente equivalentes, que incluyen el original y la forma *leapfrog* [102,104]. A partir de las trayectorias de las partículas descritas numéricamente por las ecuaciones de movimiento, el método Verlet de velocidades consiste en realizar una expansión de Taylor hasta segundo orden en las trayectorias, y hasta primer orden en las velocidades para definir la evolución de una partícula de masa m , posición $x(t)$, velocidad $v(t)$ y fuerza $f(x, t)$. El método es estable numéricamente y permite calcular la velocidad y la posición en un mismo instante de tiempo, como se observa en la ecuación 30.

$$\begin{aligned}x(t + \Delta t) &= x(t) + v(t)\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2m}f(t), \\v(t + \Delta t) &= v(t) + \frac{\Delta t}{2m}(f(t) + f(t + \Delta t)),\end{aligned}\tag{30}$$

Algunas características importantes del algoritmo Verlet de velocidades son: a) es reversible en el tiempo, es decir, que permanece invariante al intercambiar $\Delta t \rightarrow -\Delta t$, b) es simpléctico; c) es de bajo orden en tiempo, lo que permite pasos temporales mayores; d) es fácil de programar; e) requiere almacenamiento en memoria de las fuerzas en dos pasos de tiempo diferentes lo que implica importantes recursos de memoria al trabajar con sistemas de gran tamaño.

En mecánica estadística, un ensamble muy utilizado es el canónico (N, V, T) , ya que representa una situación real donde la cantidad de partículas N el volumen V y la temperatura T permanecen constantes, aunque su energía puede variar. En los experimentos, generalmente se controla la temperatura en lugar de la energía por lo que este ensamble representa de manera adecuada dicha situación. En simulaciones de dinámica molecular, existen varios métodos o técnicas para mantener la temperatura constante que sirven para modelar sistemas con distribución

canónica. Como este trabajo involucra sistemas en contacto con reservorios térmicos, utilizaremos este ensamble. La idea central es simular de tal manera que obtengamos una distribución canónica: esto significa fijar la temperatura promedio del sistema bajo simulación, pero al mismo tiempo permitir una fluctuación de la temperatura con una distribución típica para una distribución canónica.

La principal dificultad a la hora de desarrollar un integrador para la ecuación de Langevin (Ec.13) radica en la presencia de un término estocástico, lo cual invalida una posible expansión de Taylor comúnmente usada en los algoritmos de los esquemas Verlet. Frente a esto, Vanden-Eijden y Ciccotti en [105] desarrollaron un integrador de segundo orden [106], denominado como método Verlet de las velocidades estocástico:

$$\begin{aligned}
 x(t + \Delta t) &= x(t) + v(t)\Delta t + C(t), \\
 v(t + \Delta t) &= v(t) + \frac{\Delta t}{2} [f(x(t + \Delta t)) + f(x(t))] + \\
 &\quad - \Delta t \gamma v(t) + \sqrt{\Delta t} \xi(t) - \gamma C(t), \\
 C(t) &= \frac{\Delta t^2}{2} [f(x(t)) - \gamma v(t)] + \Delta t^2 \gamma^2 \frac{1}{2} \xi(t) + \frac{1}{\sqrt{3}} \vartheta(t) \quad . \quad (31)
 \end{aligned}$$

El mismo descompone a la fuerza aleatoria $\zeta(t)$ que da cuenta de las colisiones estocásticas (ver sección Termostato Langevin) en dos números aleatorios no correlacionados.

$$\zeta = a\xi + b\vartheta$$

con $\langle \xi\vartheta \rangle = 0$ y $\langle \vartheta^2 \rangle = 1$. Los coeficientes a y b pueden ser determinados estableciendo $\langle \xi\xi \rangle = \frac{1}{2}$ y $\langle \zeta^2 \rangle = \frac{1}{3}$, de lo que se desprende que $a = 1/3$ y $b = 1/(2\sqrt{3})$. Puede notarse que si $\gamma = 0$ el integrador se reduce al integrador Verlet de velocidades.

Implementación numérica

Mediante el algoritmo descrito anteriormente se integraron las ecuaciones dinámicas de nuestro sistema (Ec.14) para poder calcular la corriente de energía local (por enlace) dependiente del tiempo mediante la Ec.26, y posteriormente la corriente estacionaria en cada segmento de la cadena dada por Ecs.24 y 25. Se seleccionó un paso de integración de $\Delta\tau = 0.005$ para una cantidad de intervalos en el rango de $1 \times 10^9 - 1 \times 10^{10}$ unidades de tiempo según el caso a estudiar. Para todos ellos se aplicó un transitorio de 10^8 unidades de tiempo, con el objeto de garantizar la relajación de los modos de frecuencia baja y permitir que el sistema alcance el estado estacionario requerido para el estudio. Esta condición era obtenida cuando el promedio temporal de la corriente de calor local (por enlace) $\langle J_i \rangle_t$ era el mismo para todos los enlaces i dentro de cada segmento, cumpliendo de esta forma la conservación local de la energía.

Una vez obtenido los estadios finales y para cada conjunto de parámetros, se promedió sobre un ensamble de configuraciones iniciales (ver Ecs.24 y 25). Estas configuraciones iniciales se tomaron suponiendo la cadena inicialmente en equilibrio termodinámico a una temperatura $T = (T_L + T_R)/2$ (ensamble canónico).

En tiempos computacionales y con los recursos de hardware disponibles, el cálculo de corriente para un conjunto de parámetros y una configuración inicial demoró aproximadamente 28800 segundos, si los sistemas eran relativamente pequeños ($N < 32$). Para sistemas de mayor tamaño el tiempo de las simulaciones se incrementa linealmente con el número de partículas. Esto hace que este problema sea computacionalmente muy costoso para N grandes. Debido a la esencia misma del método de integración, la posibilidad de realizar una paralelización por dominios se ve impedida, siendo posible solo el uso de paradigmas de memoria compartida. Sin embargo, este modo de paralelización también encuentra rápidamente una saturación, ya que aún para N grandes dentro de este proble-

ma particular, con un número pequeño de *threads* se pierde la escalabilidad. Por ese motivo los barridos exhaustivos de parámetros se realizaron para $N \leq 32$ dejando el estudio de efecto tamaño para casos particulares.

A continuación se explica brevemente los pasos que componen el algoritmo numérico.

Algoritmo numérico cadena clásica

1. Inicializo parámetros: se seleccionan los valores de los parámetros involucrados en el cálculo.
2. Asigno espacio en memoria.
3. Defino Variables.
4. Establezco condiciones iniciales: posiciones, velocidades.
5. Inicializo las fuerzas.
6. Integro transitorio:
 - Desde $t=0$ hasta el tiempo que establezco para el transitorio
 - Llamo al integrador: obtengo posiciones y velocidades en cada paso
 - Se actualizan las fuerzas a cada momento
7. Integro estacionario.
 - Desde que termina el transitorio hasta el tiempo final:
 - Se actualizan las fuerzas a cada momento.
 - Llamo al integrador: obtengo posiciones y velocidades en cada paso.
 - Calculo la corriente por enlace (Ec.26) y la temperatura cinética local (energía cinética local) en cada instante de tiempo.

- En los últimos períodos:
 - Guardo en un archivo las posiciones de las partículas en cada tiempo para luego calcular los espectros de frecuencias.
 - Calculo la corriente por enlace acumulada.
 - Calculo la temperatura cinética acumulada por sitio.
8. Calculo el promedio temporal de la corriente por enlace. Guardo dichos valores.
 9. Calculo el promedio temporal de la temperatura por sitio. Guardo dichos valores.
 10. Repito desde paso 4 para distintos ensambles de configuraciones.
 11. Calculo el promedio sobre el ensamble de la corriente y de la temperatura.
 12. Obtengo entonces las corrientes que fluyen desde/ hacia los reservorios hacia/desde el sistema: Ecs. 24 y 25.

Transporte térmico con una fuente de no equilibrio dependiente del tiempo

Como primera instancia estudiaremos el efecto que tiene sobre la corriente de calor la presencia de una fuente de no equilibrio en el sistema. Esta se trata de la modulación temporal del valor de la intensidad del acoplamiento entre segmentos:

$$K_{int}(t) = K_0 (1 + \text{sen}(\omega_K t)) \quad (32)$$

donde ω_K es la frecuencia de dicha modulación.

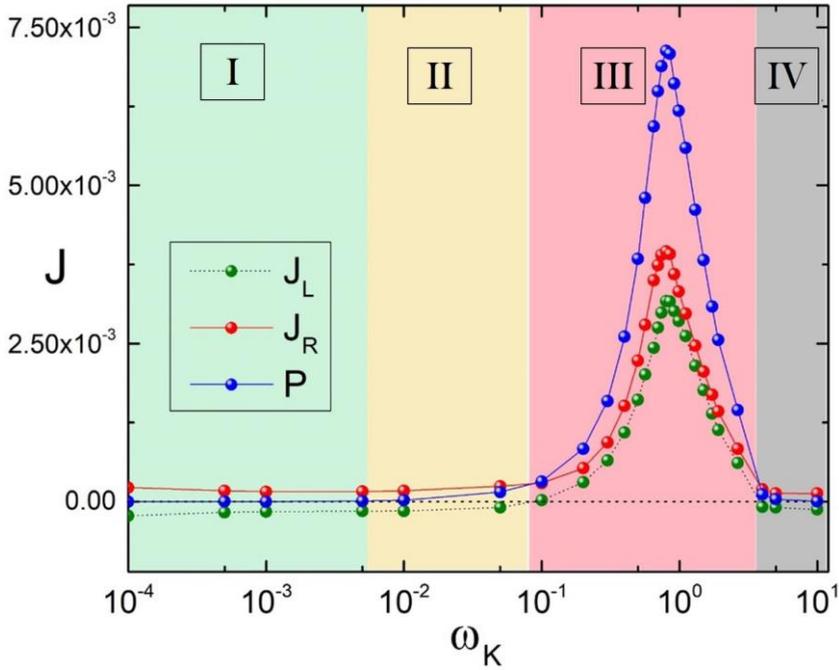


Figura 14: Corriente vs ω_K . J_L (círculo verde) es la corriente que fluye hacia el reservorio L y J_R (círculo rojo) es la corriente que fluye hacia el reservorio R . $P = J_R + J_L$ (círculo azul) es la potencia inyectada al sistema. Las regiones sombreadas (verde, amarillo, rosa y gris) indican diferentes regímenes explicados en el texto. Los parámetros (en unidades adimensionales): $V_0 = 5/2\pi$, $\gamma = 0.5$, $\Delta = 0.5$, $K_I = 2K_{II} = 1$, $K_O = 0.05$, $\omega_{temp} = 10^{-4}$, $T_{L,0} = 0.15$, $T_{R,0} = 0.05$, $N = 30$.

Para estudiar la respuesta del sistema a la modulación del contacto, graficamos en la Fig.14 la corriente de calor que fluye hacia/desde los reservorios L y R desde/hacia la cadena central (J_L , J_R respectivamente) como función de la frecuencia ω_K , cuando las temperaturas de los reservorios se mantienen constantes ($\omega_{temp} \rightarrow 0$). Observamos diferentes regímenes correspondientes a las regiones demarcadas como I , II , III y IV . Se ha elegido arbitrariamente y sin pérdida de generalidad $T_L > T_R$ (valores constantes) ya que el análisis no cambia cualitati-

vamente por esa elección.

En la región *I*, $J_R = -J_L > 0$, el transporte de calor está dominado principalmente por el gradiente de temperatura. La potencia media neta inyectada (ver Ec.29) hacia el sistema es cero (curva color azul) y el calor fluye desde el reservorio caliente al frío. Entonces, cuando $\omega\kappa$ es muy baja (límite adiabático), el sistema se reduce a dos segmentos acoplados con una constante de acoplamiento κ_0 .

En la región *II*, el calor también fluye del reservorio caliente al frío, pero con valores absolutos diferentes en cada segmento debido a una contribución neta de la potencia inyectada al sistema, que según Ec.29, $J_R - |J_L| = P > 0$, con $J_L < 0$.

La separación entre la región *II* y *III* corresponde a frecuencias donde el calor que fluye hacia el reservorio *L* es nulo (el segmento izquierdo de la cadena central se comporta como un aislante). Este es el comienzo del régimen *III* donde ocurre la inversión de corriente hacia el reservorio *L*. El transporte de energía es dominado principalmente por la potencia inyectada en la región de contacto y disipada hacia ambos reservorios. La corriente de energía toma diferentes valores absolutos en ambos segmentos debido a la asimetría del sistema.

Existe una frecuencia para la cual la potencia (P) inyectada hacia el sistema ($P = J_R + J_L$) es siempre positiva, y alcanza un valor máximo como se espera para un comportamiento resonante y depende de la distribución espectral de las frecuencias propias del sistema. Este fenómeno resulta ser robusto para diferentes temperaturas y dirección de los gradientes, encontrándolo incluso en ausencia de gradiente térmico ($T_{R,0} = T_{L,0}$, no se muestra aquí), indicando que se trata principalmente de un bombeo de energía térmica. Este régimen de transporte de calor se debe principalmente a un trabajo realizado sobre el sistema.

En la región *IV* la contribución debido al gradiente de temperatura es nuevamente la dominante y la potencia liberada es casi nula. La corriente aquí corresponde a un régimen donde la intensidad de acoplamiento oscila muy rápido

($\omega_{\kappa} \rightarrow \infty$), convergiendo a un valor medio constante en el tiempo K_0 . Una imagen esquemática de la situaciones descritas en cada caso se puede apreciar en la Fig.15.

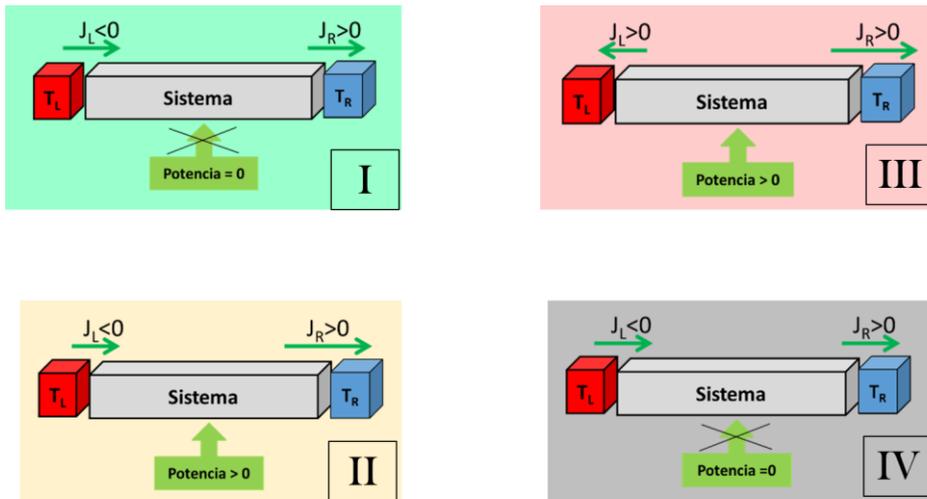


Figura 15: Esquema representativo del flujo de calor y potencia inyectada por el contacto hacia el sistema para las regiones I, II, III, IV presentadas en la figura anterior.

En la Fig.16 se grafica la temperatura cinética efectiva (Ec.28) en función del sitio de la cadena para distintos valores de frecuencias ω_{κ} pertenecientes a cada una de las cuatro regiones antes mencionadas. Dicho perfil de temperatura describe una discontinuidad en la interfase ($i = N/2$), excepto en la región III (ver curva de color verde). Para las regiones I y II el perfil de temperatura tiene una pendiente negativa indicando que el calor fluye desde el reservorio L hacia el sistema (para el segmento izquierdo I de la cadena central, $i/N < 0.5$), y desde el sistema (segmento derecho II de la cadena central, $i/N > 0.5$) hacia el reservorio R (ver curvas roja y negra). Cuando el valor de ω_{κ} es aquel que divide las regiones II y III el perfil de temperatura tiene una pendiente de valor cero

para el segmento L (curva azul), indicando así que se produce una inversión de corriente.

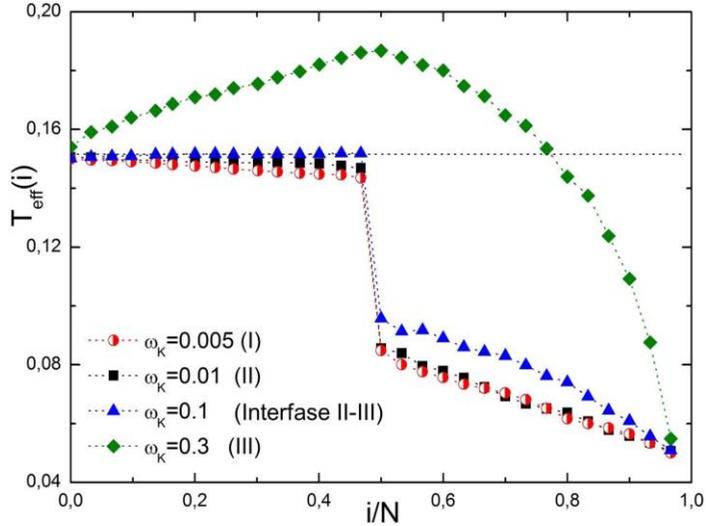


Figura 16: Perfiles de temperatura cinética efectiva T_{eff} vs i/N para cuatro valores de ω_{κ} seleccionados de Fig.14

Con el fin de tener una visión cualitativa del mecanismo físico subyacente de los fenómenos de rectificación e inversión de corriente observados, mostramos en la Fig.17 el espectro de frecuencias (espectro de fonones) (K_0 , K_I , K_{II}) de las partículas que se encuentran a la izquierda y a la derecha de la interfase para diferentes frecuencias ω_{κ} .

El espectro de frecuencias se caracteriza por la distribución de las amplitudes para cada frecuencia ω en las que se puede descomponer el movimiento oscilatorio de una partícula. Matemáticamente el análisis espectral de una señal $x(t)$ se obtiene a partir de la transformada de Fourier: $A(\omega) = \int_{\text{Re}} x(t) e^{2\pi i \omega t} dt$. En la Fig.17 se grafica el espectro de frecuencias (calculado mediante un software de análisis de datos) de la posición en función del tiempo en régimen estacionario, de dos partículas de la cadena central, una perteneciente al segmento izquierdo (I) y la otra

al segmento del derecho (II) (de un lado y del otro de la interfase). Dicho gráfico se realizó para una dirección arbitraria del gradiente de temperatura ($T_L > T_R$) ya que las bandas fonónicas no presentan cambios cualitativamente significativos cuando el gradiente de temperatura es invertido.

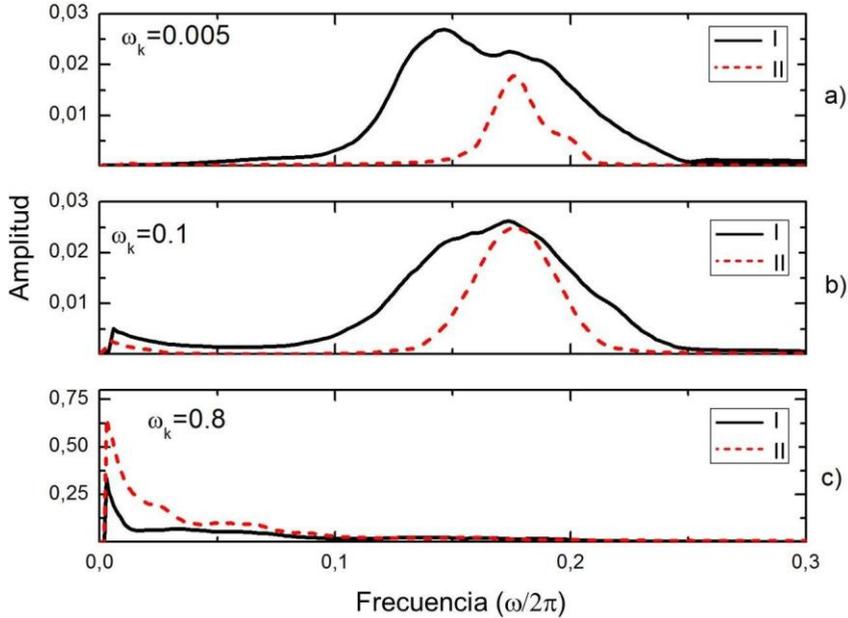


Figura 17: Espectro de frecuencias para una partícula a del segmento de la izquierda (I, línea sólida negra) y a la derecha (II, línea discontinua roja) de la interfase de la cadena. De arriba hacia abajo $\omega_k = 0.005, 0.1, 0.8$. Los parámetros son los mismos que en Fig.14. Para el panel a) las frecuencias de corte mínimas son $\omega_{(I,II)}/2\pi = 0.14$ para ambos segmentos I y II que conforman la cadena central, mientras que las máximas son $\omega_I/2\pi = 0.35$ y $\omega_{II}/2\pi = 0.27$ respectivamente. Para el panel c) las frecuencias de corte mínimas valen cero para ambos segmentos, mientras que las máximas $\omega_I/2\pi = 0.32$, $\omega_{II}/2\pi = 0.22$.(Se grafican frecuencias ω que las frecuencias de corte máximas)

La corriente de energía estará determinada por el rango de frecuencias que correspondan a la superposición de los espectros de dos partículas, cada una per-

teneciente a un segmento de la cadena (I/II), controla la corriente de energía (fonónica) a través del contacto y a lo largo del dispositivo. Estos espectros son diferentes en ambos lados debido a la asimetría y el papel desempeñado por la temperatura debido al potencial no lineal. Como la fuente de alimentación en la interfase ($\sim \omega_K^2$) afecta la energía cinética de las partículas, es de esperar que ω_K podría jugar un rol relevante en el comportamiento de corrimiento de las bandas fonónicas como el producido por las excitaciones térmicas en las bandas de fonones en el modelo FK .

Cuando la temperatura cinética local (definida en Ec.28) es baja tal que $T < T_c$, donde T_c la temperatura (cinética) crítica definida como ($T_c \approx \frac{V_\alpha}{4\pi^2}$), el potencial de sitio no lineal juega un rol fundamental en el confinamiento de las partículas en sus posiciones de equilibrio (mínimo del potencial). Al linealizar las ecuaciones del modelo FK , mediante la expansión de Taylor del potencial a segundo orden, uno puede obtener rangos para las bandas fonónicas. En este caso se obtiene que $\sqrt{V_\alpha} < \omega_\alpha < \sqrt{V_\alpha + 4K_\alpha}$ [12, 13, 107], donde V_α es la amplitud del potencial de sitio y K_α es la constante de interacción de la cadena $\alpha = I, II$. Esta banda corresponde a una única cadena FK (sin estar en contacto con una segunda). En la Fig. 17-a) se grafica el espectro de frecuencias de cada cadena cuando se encuentran conectadas. Los modos de alta frecuencia, son modos más localizados y por lo tanto con una menor contribución a la conductividad térmica y a la corriente térmica (efecto que se incrementa a mayor tamaño de cadenas y con las anarmonicidades), y donde el transporte ocurre solo para frecuencias en las regiones donde las bandas se superponen. Este caso se corresponde con lo observado en la Fig.14 para valores de ω_K muy chicos (región I), donde la corriente dentro de cada segmento es mucho más pequeña que la presente en la región resonante.

La transición de la región II a la III ($\omega_K = 0.1$) se da cuando la altura del po-

tencial (no lineal) de sitio es del orden de la energía térmica local de las partículas ($T \approx T_c$) (debido a la energía inyectada) de modo que la parte de baja frecuencia de las bandas de fonones (principales responsables de la conducción) comienza a poblarse (Fig.17-b). Para $\omega \ll \omega_c$ en la región III (ver Fig.14), las partículas tienen energías cinéticas suficientemente grandes como para superar los pozos del potencial y la zona de bajas frecuencias del espectro se vuelve más importante, situación que se observa en la (Fig.17-c). En dicha figura, el potencial de sitio, que es anarmónico y por lo tanto produce acoplamiento de modos, se vuelve despreciable y el modelo FK degenera a uno armónico con bandas de ancho $0 < \omega_\alpha < 2\sqrt{k_\alpha}$ y donde los fonones no interactúan entre si. La interfaz funciona como un punto de dispersión para los fonones de alta frecuencia pero no para los de baja frecuencia. Estos modos suaves (incluido el modo cero) tienen mayor camino libre medio, que cuando es del orden o mayor que el tamaño característico del sistema, juega un rol fundamental en una conducción de energía balística. El transporte de calor es mediado principalmente por fonones acústicos de baja frecuencia, más deslocalizados. El rol del potencial de sitio es producir un corrimiento en la frecuencia mínima de corte desde cero a $\sqrt{V_\alpha}$.

Debido a la modulación de la interacción (interfase), esta frecuencia mínima de corte también se puede disminuir, por lo que son más los fonones de baja frecuencia que están involucrados en el proceso de transporte incrementando la corriente de calor. De esta manera podemos controlar y ajustar la transferencia de calor *dinámicamente*, superponiendo las bandas de fonones en la parte baja del espectro. También encontramos que este comportamiento de las bandas de fonones es robusto frente a cambios en las direcciones de los gradientes de temperatura.

Por último se ha analizado el efecto del tamaño del sistema en el transporte de energía, el cual se convierte relevante desde un punto de vista práctico, con el fin de controlar el calor en sistemas a diferentes escalas.

En la Fig.18 se muestra la corriente de calor que fluye desde/hacia el reservorio izquierdo L en función de la frecuencia ω_K para diferentes valores de N .

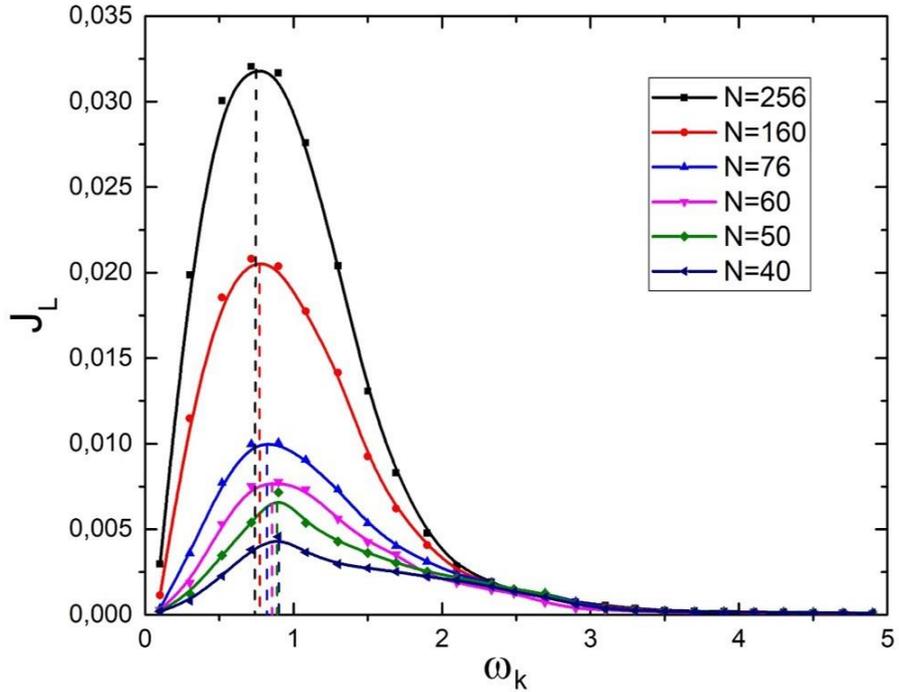


Figura 18: J_L vs ω_K para diferentes N . La línea roja corresponde a $N = 50$, la línea azul a $N = 76$, la línea verde a $N = 160$ y la negra a $N = 256$. El resto de los parámetros son los mismos que los indicados en la Fig.14.

Encontramos que el fenómeno de resonancia es robusto frente al cambio del tamaño del sistema. Esto indica que el sistema siempre presenta una condición de máxima transmisión de calor ($J_{L/R}$ máxima) para alguna frecuencia óptima $\omega_{K,max}$, que dependerá del tamaño del sistema. Observamos que la posición de los picos sufre un desplazamiento a frecuencias más bajas (*corrimiento al rojo*) cuando N aumenta. Este resultado posee un gran interés práctico, ya que sugiere que en la práctica es posible obtener transferencias térmicas óptimas para frecuencias más

bajas aumentando el tamaño del sistema, lo que es más manejable desde un punto de vista experimental.

En la Fig.19 graficamos $\omega_{K,max}$ en función del tamaño N . Cuando el sistema es pequeño, que en nuestro caso corresponde a $N < 100$, la frecuencia resonante $\omega_{K,max}$ presenta un comportamiento decreciente con N . Este corrimiento al rojo

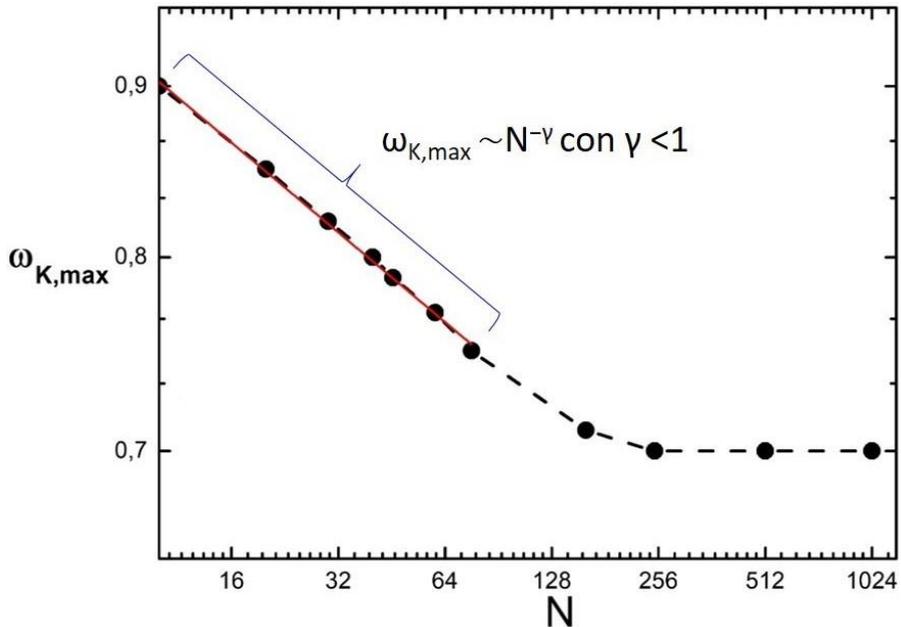


Figura 19: $\omega_{K,max}$ vs N ($\log_2 - \log_2$), donde $\omega_{K,max}$ es el valor de ω_K para el cual la J_L es máxima (ver Fig.18). $\omega_{temp} = 5 \cdot 10^{-4}$. Los demás parámetros son los mismos que en Fig.14.

se debe al tiempo de respuesta τ que caracteriza la escala temporal para la difusión de energía a lo largo del sistema [108] y que puede ser caracterizada a partir de desviación cuadrática media de la energía: $(\sigma(\tau))^2 \sim \tau^\alpha$. Dependiendo del valor del exponente característico α el movimiento microscópico puede ser anómalo o normal y ser clasificado como: superbalístico ($\alpha > 2$), balístico ($\alpha = 2$), superdi-

fusivo ($1 < \alpha < 2$), difusión normal ($\alpha = 1$) o subdifusivo ($\alpha < 1$) [49]. Esto implica que para un sistema de longitud característica N , el tiempo característico para que la energía difunda a través del mismo es $\tau \sim N^{2/\alpha}$.

El transporte superbalístico en sistemas difusivos presenta la aparente contradicción de que un portador random se mueva más rápido que un portador que no cambia la dirección de movimiento. Comportamiento anómalo que se manifiesta en la forma en que la desviación cuadrática media de velocidad (o energía) aumenta en el tiempo. Realizando un fiteo no lineal de los datos de la Fig.19 se desprende que para N chicos, $\omega_{K,max}$ escala con el tamaño del sistema como: $\omega_{K,max} \sim N^{-\nu}$ con $\nu < 1$. Entonces, dado que $(\omega_{K,max})^{-1} \sim \tau$ se obtiene $\tau \sim N^\nu = N^{2/\alpha}$, indicando que la difusión de energía en nuestro sistema se caracteriza por un exponente que es $\alpha > 2$, produciendo un transporte anómalo. Este exponente estaría indicando un régimen superbalístico de transporte.

Numerosos estudios sobre transporte de calor, han mostrado que el desorden, debido a interfases o a la presencia de substratos estáticos suelen disminuir el flujo de calor a lo largo de un sistema debido a la localización de fonones. La pregunta es si en el caso de que estos factores evolucionen temporalmente, será posible no solo romper el efecto de la localización sino también incrementar el transporte más allá del régimen balístico. Ejemplos de transporte superbalístico o superdifusivo se encuentran en sistemas en presencia de potenciales random o no lineales dependientes del tiempo [109], o en experimentos con setups ópticos con desorden [110]. En [111] estudian la difusión superbalística de energía que se produce en un sistema unidimensional debido a una superposición de pulsos de calor de distinta duración temporal originados en los efectos de localización de fonones debido a puntos de desorden, y que se convierten en nuevos focos de emisión de fonones.

Nuestros resultados parecerían indicar que la característica superbalística del

transporte resonante, que ocurre cuando el sistema es pequeño, se debe a los efectos (no lineales) de superposición de fonones originados en ambas fuentes temporales de no equilibrio. En [33], estudian una cadena FK sometida únicamente a una modulación temporal en la temperatura de los reservorios con un gradiente nulo de temperatura en el caso estático. Allí también encuentran un corrimiento al rojo de la frecuencia resonante y una difusión de energía anómala balística para cadenas cortas, mientras que para cadenas largas recuperan el transporte normal. Por otra parte, en [36] estudian un sistema compuesto por cadenas FK donde las fuentes de no equilibrio presentes son dos: un gradiente estático de temperatura y un forzante temporal externo periódico que a diferencia de nuestro caso es aditivo. También observan un fenómeno resonante pero cuya frecuencia característica no depende del tamaño del sistema. Este caso es similar al comportamiento observado en nuestro sistema para cadenas largas. Sin embargo, ninguno de estos trabajos observan un régimen superbalístico de la energía, lo que estaría indicando que la difusión que encontramos se debe a los efectos sinérgicos de más de una fuente de no equilibrio (termomecánicas) dependiente del tiempo. Sin embargo se requiere un análisis formal y exhaustivo de estas conjeturas, lo cual va más allá del objetivo de esta tesis.

Transporte térmico en presencia de dos fuentes de no equilibrio dependientes de tiempo

En una segunda instancia analizamos el transporte de energía cuando dos fuentes de no equilibrio están actuando sobre el sistema de manera independiente. Estas son la modulación temporal de la constante de acoplamiento entre ambos segmentos de la cadena (ver Ec.3.2), y la otra es la modulación periódica en la

temperatura de ambos reservorios térmicos:

$$T_{\beta}(t) = T_{\beta,0}(1 + \Delta \text{sgn}(\sin(\omega_{temp} t))), \quad (33)$$

donde $T_{\beta,0}$ es la temperatura de referencia de cada reservorio $\beta = L, R$, ω_{temp} es la frecuencia de dicha modulación y sgn denota la función signo. En la Fig.20 se encuentra que, cuando el sistema es chico, el fenómeno de *corrimiento al rojo* presentado en la sección anterior, está presente aún para $\omega_{temp} \neq 0$, es decir, cuando están presentes ambas fuentes de no equilibrio.

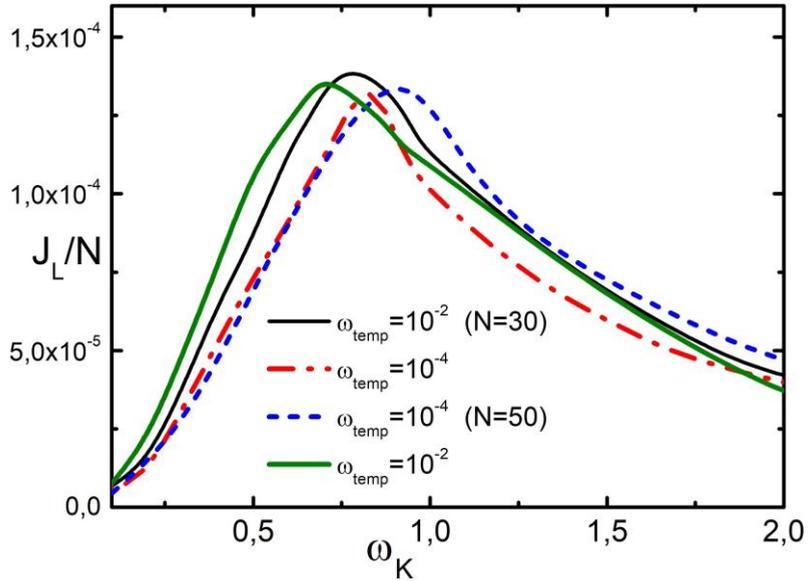


Figura 20: J_L/N vs ω_k para $\omega_{temp} = 1 \times 10^{-4}$ líneas punteadas (roja para N=30 y azul para N=50) y $\omega_{temp} = 1 \times 10^{-2}$ líneas llenas (negra para N=30 y verde para N=50). Los demás parámetros son los mismos que en Fig.14.

En Fig.21 se grafica la corriente J_R en función de ω_{temp} , para distintos valores de ω_k para el caso $T_L > T_R$ (dicha elección es arbitraria y no afecta el análisis).

Si ω_k está por fuera de la región resonante *III* (Fig.14) y ω_{temp} toma valores pequeños cercanos a cero, la corriente presenta un comportamiento decreciente (curva negra y roja de la Fig.21). Para $\omega_{temp} > 0.01$, la corriente presenta un comportamiento independiente dicha frecuencia.

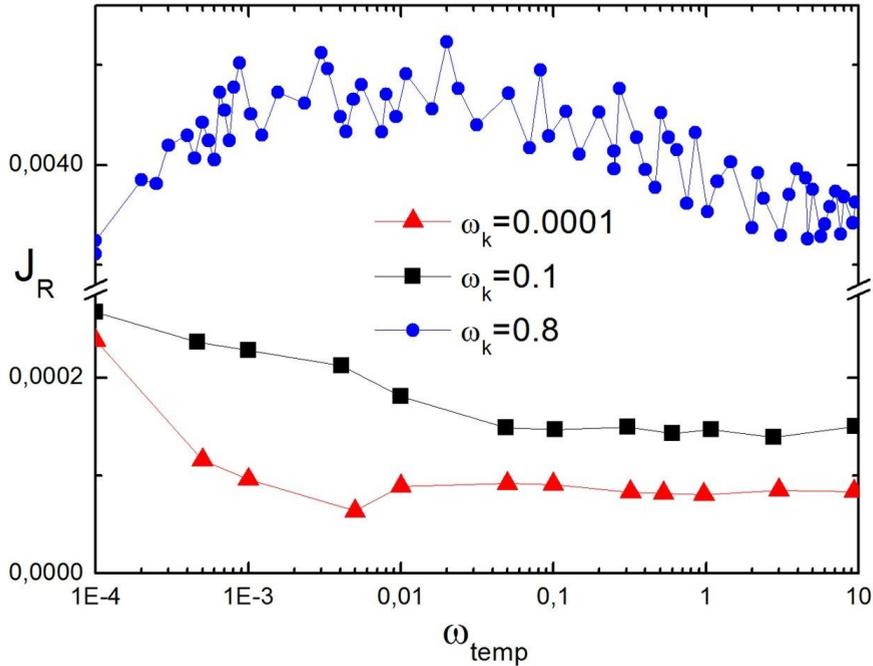


Figura 21: J_R vs ω_{temp} . Línea azul (círculos) para $\omega_k = 0.8$, línea negra (cuadros) para $\omega_k = 0.1$, y línea roja (triángulos) para $\omega_k = 1 \times 10^{-4}$.

En la Fig.22 se grafican los perfiles de temperatura cinética local efectiva $T_{eff}(i)$, para tres valores de ω_{temp} cuando $\omega_k = 1 \times 10^{-4}$. En el límite adiabático ($\omega_{temp} \rightarrow \infty$), las temperaturas corresponden esencialmente a dos valores estáticos opuestos. En este caso la corriente resultante es el promedio de las corrientes para esos dos valores de temperatura. En este límite de baja frecuencia ($\omega_{temp} \rightarrow 0$), hay un mayor gradiente de temperatura en el segmento de la derecha (que es el

segmento con constantes elásticas menores), ver curva negra (cuadrados).

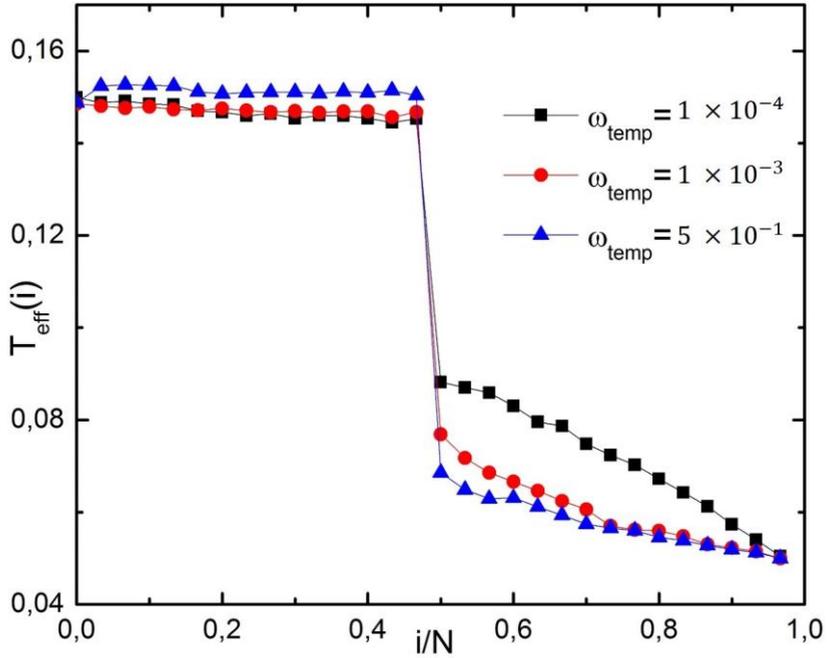


Figura 22: Temperatura cinética local efectiva $T_{eff}(i)$ vs número de sitio para $\omega_{temp} = 1 \times 10^{-4}$, 1×10^{-3} y 5×10^{-1} y $\omega_{\kappa} = 1 \times 10^{-4}$. El resto de los parámetros toman los mismos valores que en Fig.14.

Cuando ω_{temp} aumenta, la modulación de las temperaturas es más rápida y el gradiente de temperatura disminuye. En la Fig.21 esta situación corresponde a una corriente menor. A medida que ω_{temp} se incrementa, la pendiente del perfil de temperatura disminuye hasta un cierto valor a partir del cual ya no cambia. Esta situación corresponde a la región de corriente constante observada en la Fig.21. En otras palabras, cuando la temperatura oscila muy rápidamente, el sistema ya no puede responder a dicha perturbación y esencialmente se comporta como si estuviese en contacto con dos baños a la temperatura promedio constante, es

decir J no cambia. Por otro lado, en la misma figura, en el segmento izquierdo ($i/N < 1/2$), el gradiente de temperatura es pequeño habiendo un flujo de calor hacia el reservorio L (curva negra Fig.14).

Por otra parte, para valores de ω_K pertenecientes a la región resonante $///$ (Fig.14), observamos un cambio cualitativo en las curvas de J_R (y también en las de J_L) cuando varía ω_{temp} (curva azul en Fig.21). En este caso, aparece un comportamiento multiresonante de la corriente de energía (térmica) *pero* dependiente de ω_{temp} . Cuando nos referimos a que la corriente de energía presenta un comportamiento multiresonante, nos referimos a que dicha corriente presenta múltiples frecuencias donde la corriente toma valores que son máximos (locales) para diferentes valores de frecuencia ω_{temp} .

En Fig.23 mostramos dos curvas correspondientes a la corriente que fluye desde/hacia el reservorio de la derecha (J_R), para $\omega_K = 0.4$ y 0.8 en función de ω_{temp} . Encontramos que los valores de J_R están “confinados” entre dos envolventes.

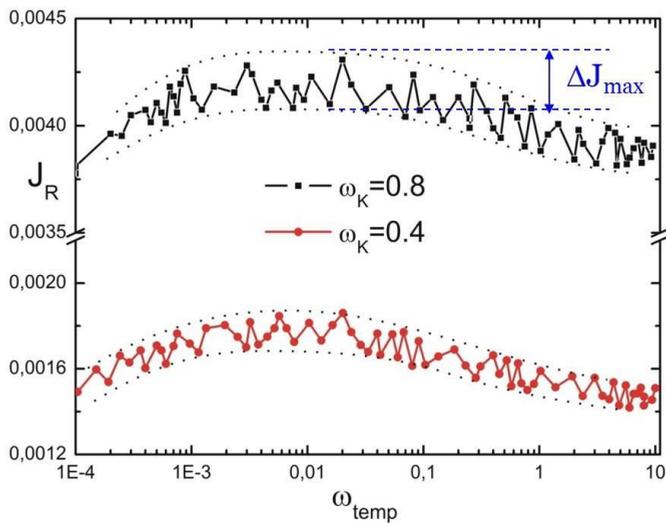


Figura 23: Gráfico de J_R vs ω_{temp} para dos valores de ω_K . Las líneas punteadas indican la proximidad entre las curvas envolventes superior e inferior.

Si graficamos la diferencia máxima (ΔJ_{max}) entre el valor más alto y más bajo de la envolvente como función de ω_K , ver Fig.24, encontramos que esta magnitud presenta una respuesta de resonante.

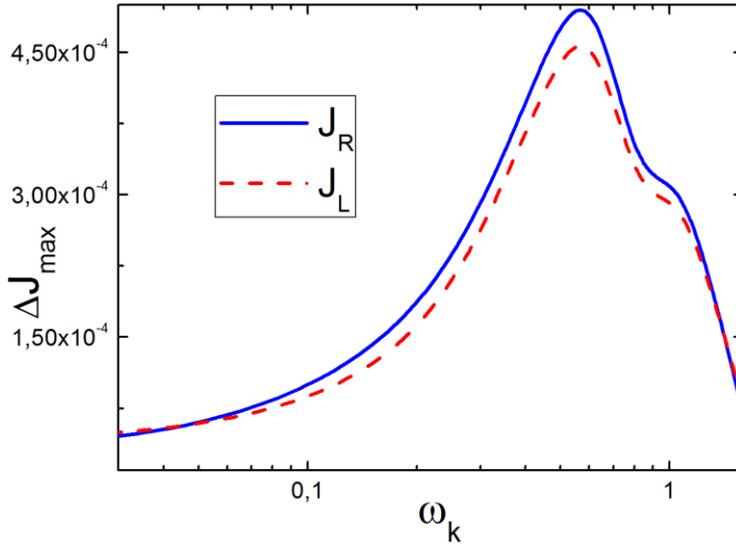


Figura 24: Amplitud (máxima) entre envolventes *versus* ω_K para $\omega_{temp} = 0.01$.

La presencia de un comportamiento multiresonante de la corriente de energía está relacionada con la estructura del espectro de frecuencias propias del sistema, haciéndose más densa a medida que N aumenta.

En Fig.25 comparamos la corriente para el caso de una cadena armónica o una FK versus ω_K . Se aprecia que las posiciones de los picos de ambos modelos son cercanas, pero no idénticos, sugiriendo un mecanismo similar de resonancia [32]. Sin embargo, la corriente es menor en el sistema FK debido a los procesos de dispersión de fonones originados por la la anarmonicidad del potencial.

Cuando ω_K se aleja de $\omega_{K,max}$ los átomos se encuentran más confinados en

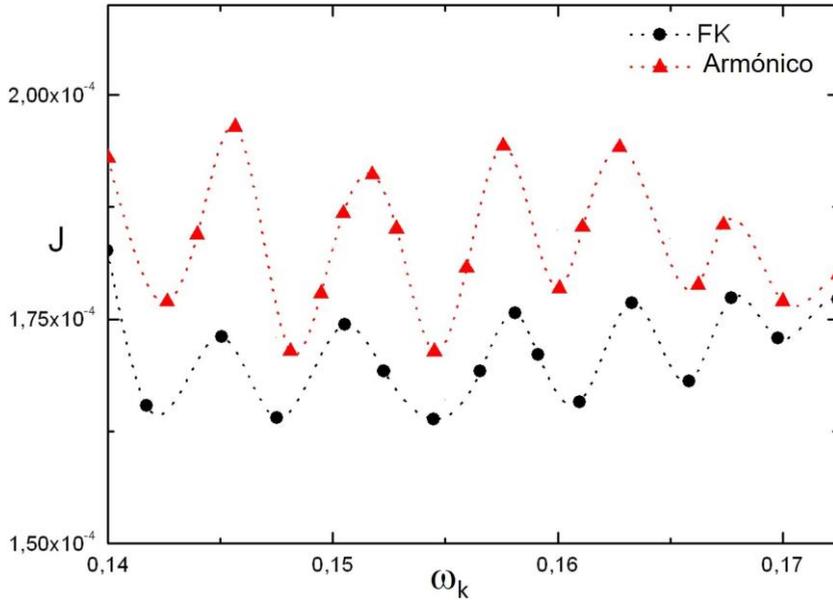


Figura 25: Comparación del caso armónico con el *FK* en en una región de frecuencias elegidas de manera aleatoria. Corriente de calor vs. frecuencia del contacto ω_K para $\omega_{temp} = 5 \times 10^{-4}$ y $T_{L,0} = T_{R,0}$, $N = 64$.

torno a su posición de equilibrio, ya que tienen menos energía, por lo que el potencial de sitio se vuelve más relevante. El comportamiento multiresonante de la corriente de energía todavía se encuentra, pero con los bordes superior e inferior acercándose, como se representa en Fig.23. Entonces, el papel del potencial de sitio no lineal es disminuir la amplitud de las multiresonancias que aparecen como función de ω_{temp} . Esto nos habla de una “resonancia cooperativa” entre ω_K y ω_{temp} . En [32] se encontró un respuesta multiresonante debido a la acción de un forzante externo. Sin embargo, aquí observamos una característica más rica y compleja de este fenómeno, cuando dos fuentes de no equilibrio dependientes del tiempo actúan de manera sinérgica en el sistema.

Conclusiones del capítulo

En este capítulo se estudió la transferencia de calor a lo largo de un sistema clásico unidimensional formado por dos segmentos FK en contacto y sometidos a perturbaciones termomecánicas dependientes del tiempo. Nuestros resultados revelan que con un ajuste adecuado de los parámetros característicos de las perturbaciones, se pueden producir flujos diferentes en distintas partes del sistema logrando un control dinámico mecánico y termodinámico de las corrientes térmicas. Además hemos encontrado que este transporte presenta diferentes regímenes resonantes debido a un efecto sinérgico entre ambas fuentes de no equilibrio. Como hemos trabajado con parámetros adimensionales que corresponden a valores típicos que pueden realizarse experimentalmente, nuestro modelo puede servir como plataforma para explorar propuestas de dispositivos de baja dimensión para una gestión térmica, que por sus tamaños característicos sea suficiente una aproximación clásica.

Capítulo 2: Transporte de calor en un sistema cuántico unidimensional

Introducción

En los últimos años el estudio de sistemas meso y nanoscópicos ha generado un gran interés debido a que por las dimensiones y características, constituyen una conexión entre los sistemas macroscópicos y los de escala atómica, lo que convierte a estos sistemas en plataformas naturales para comprender algunas características del límite macroscópico y cómo se llega a él.

Por un lado, como ya se mencionó en el capítulo anterior, cuando se trabajan con materiales a temperaturas menores o del orden de T_D , se requiere un método o formalismo que considere efectos cuánticos así como una correcta distribución fonónica (Bose-Einstein). El método de *DM* basado en ecuaciones clásicas ya no es adecuado, entrando en escena métodos como el de la función de Green de no equilibrio que son más apropiados para el tratamiento de fenómenos de transporte en escalas mesoscópicas. En esta escala las longitudes típicas van desde decenas

de nanómetros (nm) hasta pocos micrómetros (μm), manifestándose la naturaleza cuántica de los electrones en un metal o de los fonones en un semiconductor. Estos sistemas de pequeña escala en general se encuentran en interacción o acoplados a otros de mayores dimensiones, por lo que los efectos de esa interacción afectan las propiedades de transporte. Un sistema meso o nanoscópico puede estar acoplado a reservorios de partículas, que son considerados macroscópicos y donde la magnitud del acoplamiento entre ambos sistemas determina la intensidad del intercambio de partículas y energía.

Para caracterizar estos fenómenos no es suficiente conocer las dimensiones típicas de los sistemas. Es necesario establecer la relación que existe entre la dimensión característica del sistema L y otras longitudes características, como el camino libre medio y la longitud de coherencia del portador, que en el caso de este trabajo es el fonón. El camino libre medio $\lambda_{MF P}$ es la distancia promedio que recorre el fonón antes de ser dispersado. La longitud de coherencia λ_c es la distancia que recorre antes de que la función de onda pierda su fase luego de sucesivos eventos de scattering. Esta última longitud es la que define el régimen mesoscópico, ya que es necesario que λ_c sea mayor que la longitud característica del sistema para que se observen los fenómenos característicos de la interferencia cuántica. Si bien es muy difícil obtener una expresión cerrada para λ_c , se puede estimar que $\lambda_c \approx (\tau_c D)^{1/2}$, donde τ_c es el tiempo medio entre colisiones inelásticas y D es el coeficiente de difusión. Los principales procesos que pueden dar lugar a colisiones inelásticas son fonón-fonón, fonón-impureza, fonón-interfases. Dentro del transporte coherente pueden distinguirse a la vez tres regímenes de transporte:

- Régimen balístico: cuando el camino libre medio entre colisiones es mayor que L .
- Régimen difusivo: cuando el camino libre medio entre colisiones es menor que L .

- Régimen localizado: cuando el camino libre medio entre colisiones es mucho menor que L .

Bombas cuánticas

El calor fluye de manera espontánea desde los objetos con mayor temperatura hacia los de menor temperatura. Sin embargo, una bomba de calor permite que el calor fluya contra un gradiente térmico gracias al trabajo aplicado por un agente externo. Las bombas de fonones se pueden producir debido a la acción de una fuerza externa dependiente del tiempo o un agente mecánico que module el acoplamiento entre diferentes partes del sistema [23, 31, 32, 34, 36, 44, 112]. Una posibilidad es utilizar bombas fonónicas basadas en dispositivos cuánticos para refrigerar. Se han desarrollado diversas implementaciones experimentales de motores y refrigeradores cuánticos basadas en dispositivos electrónicos en presencia de campos de corriente alterna (AC) [113–116], en electrónica molecular, termometría [66, 117, 118], absorción de fonones (calor) con electrones usando dispositivos nanomecánicos, como un cantilever [66, 117–122]. Como se ha mencionado previamente en la introducción de esta tesis, también se han propuesto diferentes modelos para realizar bombas de fonones, como el movimiento de barreras dentro de una cavidad para bombear fonones desde un reservorio “frío” a uno “caliente”, o mediante el estiramiento/compresión de juntas moleculares en contacto con baños fonónicos [123, 124]. También se han propuesto rectificadores y refrigeradores en regímenes cuánticos en diferentes plataformas como puntos cuánticos, circuitos no lineales de estado sólido y sistemas de pocos niveles [125–128]. En particular, en esta tesis abordaremos el estudio de la rectificación de calor en sistemas cuánticos unidimensionales que se producen debido a roturas de simetrías espacio-temporales en forma dinámica, donde a diferencia de escenarios estáticos, la presencia de perturbaciones temporales en un sistema homogéneo con interac-

ciones lineales puede originar rectificación térmica [129].

Este capítulo está organizado de la siguiente manera. En la primera sección presentamos el modelo microscópico. En la segunda, describimos el marco teórico y la metodología usada para resolver numéricamente el problema. En la tercera sección presentamos diferentes regímenes para el transporte de calor, estudiando el rol de la frecuencia externa y el tamaño del sistema. En la cuarta sección analizamos el régimen de enfriamiento. La última sección está dedicada a resumir los resultados obtenidos.

Formalismo teórico

Una gran cantidad de estudios del transporte electrónico se han realizado en base al formalismo de Landauer - Büttiker [130–132]. La idea básica es que la dinámica de la carga en un canal conductor conectado a electrodos está gobernado por procesos de scattering donde los portadores de carga son transmitidos entre los electrodos a través del canal, o reflejados por el electrodo hacia el canal [133]. Esta aproximación permite obtener una expresión analítica para la corriente a lo largo del canal en términos de probabilidades de transmisión. Este formalismo ha sido generalizado utilizando funciones de Green de Keldysh [134–139] (también conocido como formalismo de Green de no equilibrio, NEGF de sus siglas en inglés), incorporando interacciones entre electrones, voltajes y campos dependientes del tiempo y el rol de las correlaciones iniciales.

Este formalismo no está limitado al transporte electrónico habiendo sido también extendido a sistemas fonónicos [31, 124, 140]. Para el caso de sistemas de partículas interactuantes se ha propuesto la misma metodología para derivar la fórmula de Landauer - Büttiker correspondiente al caso estático, así como la extensión a sistemas dependientes del tiempo a partir del formalismo de Green de

no equilibrio. Estas extensiones han permitido encontrar funciones de transmisión exactas, modelos de transporte de calor para refrigeradores y conductancias térmicas en juntas moleculares, nanotubos y nanobandas (cintas de anchos menores a 50nm) [29, 30, 141–150]. El formalismo de la función de Green de no equilibrio ofrece un marco natural para el estudio de estos efectos en sistemas electrónicos y fonónicos, tanto en regímenes transitorios como estacionarios de no equilibrio [34, 56, 151–155]. El estudio del transporte de energía involucra tanto los regímenes transitorios como estacionarios. El primero es relevante si uno desea estudiar la respuesta del sistema durante el encendido/apagado de fuentes, establecimiento de correlaciones, etc. Mientras que el segundo es relevante cuando se desea conocer el régimen operacional del dispositivo en el largo plazo. Estudiar el régimen transitorio requiere disponer de la evolución temporal de las ecuaciones de movimiento para las funciones de Green fonónicas, lo que computacionalmente puede ser muy costoso. Sin embargo, el estudio del régimen estacionario de no equilibrio, puede realizarse en el espacio de frecuencias siendo mucho más manejable tanto analítica como numéricamente. En esta dirección, en esta tesis estudiamos la transferencia de calor en régimen estacionario en sistemas de pequeña escala alejados del equilibrio conectados a reservorios térmicos [138,156–158]. En las secciones siguientes se desarrolla el formalismo de las funciones de Green para sistemas con muchos grados de libertad, en equilibrio y fuera del equilibrio. Comenzaremos repasando algunos conceptos básicos.

Representaciones en mecánica cuántica

Schrödinger

En esta representación, el estado del sistema evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrödinger [157]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (34)$$

las funciones de onda son dependientes del tiempo

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle, \quad (35)$$

y los operadores son constantes en el tiempo [157].

De esta manera, la dependencia temporal de los valores esperados de una magnitud observable está determinada completamente por el estado del sistema y no por los operadores.

Heisenberg

Esta representación conduce a los mismos resultados que la representación anterior. Es decir, que los valores medios de los operadores en ambas representaciones son iguales. Sin embargo las propiedades de la representación de Heisenberg son:

- Las funciones de onda son independientes del tiempo.
- Los operadores tienen una dependencia en el tiempo de la forma:

$$\hat{O}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{O}(0) e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (36)$$

y hay que resolver la ecuación de movimiento que cumplen los operadores

$$\frac{\partial \hat{O}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}(t)]. \quad (37)$$

Interacción

En esta representación se distribuye la dependencia temporal tanto en los estados del sistema como en los operadores. Los operadores evolucionan sólo por influencia de la parte no perturbativa de H (H_0), mientras que los estados lo hacen según la interacción V (donde V es la parte del hamiltoniano que contiene las interacciones) [157]. Las funciones de onda evolucionan como

$$|\Psi(t)\rangle = e^{(i/\hbar)H_0 t} e^{-(i/\hbar)H t} |\Psi(0)\rangle, \quad (38)$$

y los operadores

$$\hat{O}(t) = e^{(i/\hbar)H_0 t} \hat{O} e^{-(i/\hbar)H_0 t}. \quad (39)$$

Operador evolución

La Ec.38 introduce el operador de evolución temporal

$$\hat{U}(t) = e^{(i/\hbar)H_0 t} e^{-(i/\hbar)H t},$$

el cual obedece a la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{V}(t) \hat{U}(t). \quad (40)$$

Integrando esta ecuación respecto al tiempo se obtiene

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{\hbar^n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n). \quad (41)$$

Esta ecuación puede ser escrita en función del operador de orden temporal

$$\hat{T}[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)] = \Theta(t_1 - t_2)\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2) + \Theta(t_2 - t_1)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1), \quad (42)$$

donde $\Theta(t)$ es la función de Heaviside

$$\Theta(t - a) = \begin{cases} 1 & \text{si } t > a \\ \frac{1}{2} & \text{si } t = a \\ 0 & \text{si } t < a \end{cases}$$

Haciendo tender todos los extremos de integración a t en la expansión de $\hat{U}(t)$ se obtiene

$$\hat{U}(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{k^n} \frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{T}[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\dots\hat{V}(t_n)], \quad (43)$$

la que puede ser escrita en forma compacta como

$$\hat{U}(t) = \hat{T} \exp \frac{-i}{k} \int_0^t dt_1 \hat{V}(t_1) . \quad (44)$$

Dado el operador evolución $\hat{U}(t)$, podemos definir un operador $\hat{S}(t, t') = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t')$ que evoluciona la función de onda $\Phi(t')$ a $\Phi(t) = \hat{S}(t, t')\Phi(t')$. Este operador cumple las siguientes propiedades: a) $\hat{S}(t, t) = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t) = 1$; b) $\hat{S}^\dagger(t, t') = \hat{S}(t', t)$ y c) $\hat{S}(t, t')\hat{S}(t', t'') = \hat{S}(t, t'')$. Si se deriva este operador respecto a t se obtiene una ecuación similar a la Ec.40

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{S}(t, t') = \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t') = -\frac{i}{k} \hat{V}(t)\hat{S}(t, t'),$$

cuya solución es:

$$\hat{S}(t, t') = \hat{T} \exp \frac{-i}{k} \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}_1(t_1) . \quad (45)$$

Funciones de Green

El rol del operador (matricial) \hat{S} es central al momento de construir una teoría perturbativa para las funciones de Green. En condiciones de no equilibrio el sistema no retorna a su estado inicial aún para tiempos suficientemente largos, lo que hace que se necesiten formulaciones teóricas bastantes más complicadas que las usadas para el caso de equilibrio. Sin embargo, mostraremos a lo largo de este capítulo que es posible una teoría de Green de no equilibrio que presente una semejanza a una de equilibrio. La idea general es la siguiente: consideramos un sistema que evoluciona acorde un hamiltoniano $H = H_0 + V(t)$. El término independiente del tiempo se puede dividir en dos contribuciones: una “sencilla” (diagonalizable) y otra “complicada” que contiene los aspectos de muchos cuerpos del problema y requiere un tratamiento especial. Por otra parte, se tiene una contribución de no equilibrio dependiente del tiempo que puede deberse por ejemplo, a campos alternos (AC), pulsos, contactos a diferentes potenciales químicos. Esta última contribución se asume que es nula para tiempos $t < t_0$, que en el caso de excluirse el estudio del transitorio puede simplificarse considerando $t_0 \rightarrow -\infty$.

Antes de encender la perturbación, el sistema se describe a partir de la matriz densidad de equilibrio: $\rho(H_0) = \frac{\exp(-H_0/k_B T)}{\text{Tr}[\exp(-H_0/k_B T)]}$. La idea es calcular el valor de expectación de un dado observable \hat{O} para tiempos $t > t_0$:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \text{Tr}[\rho(H_0)\hat{O}_H(t)],$$

donde el subíndice H indica que la dependencia temporal está gobernada por el hamiltoniano total, esto es \hat{O} está en la representación de Heisenberg. En esta definición, el operador \hat{O} puede ser cualquiera: funciones de Green, correlaciones, etc. Es importante notar que en esta expresión se utiliza una matriz densidad de equilibrio $\rho(H_0)$ y no una matriz ρ dependiente del tiempo. Físicamente esto

significa que los grados de libertad termodinámicos contenidos en H_0 , no siguen instantáneamente las variaciones rápidas contenidas en $V(t)$.

En conclusión, la hoja de ruta es similar a la del caso de equilibrio: transformar la dependencia temporal complicada de O_H a una forma más simple que podríamos llamar O_{H_s} . Esto requerirá eliminar dos operadores: la perturbación temporal $V(t)$ y el término “complicado” de interacción de H_0 , por lo que las transformaciones serán más complicadas que las del caso de equilibrio. Sin embargo, con generalizaciones adecuadas, se logrará un formalismo de no equilibrio que es estructuralmente equivalente al de equilibrio.

Comencemos entonces a recorrer esta hoja de ruta.

Sistemas en equilibrio

Comenzaremos definiendo la función de Green (o propagador) [138] de un sistema perturbado con un hamiltoniano del tipo $H = H_0 + V$ como

$$G(2, 1) = -i\langle\Phi_0|\hat{T}[\hat{\Phi}_H(2)\hat{\Phi}_H^\dagger(1)]|\Phi_0\rangle, \quad (46)$$

donde $\hat{\Phi}_H(i)$ es el operador de campo correspondiente en la representación de Heisenberg, $(i = 2) = (x_2, t_2)$ y $(i = 1) = (x_1, t_1)$. \hat{T} es el operador de orden temporal (Ec.42), que hace que la función de Green esté ordenada temporalmente, la cual se conoce como *función de Green causal*. La dificultad subyacente en esta definición es que involucra el estado fundamental $|\Phi_0\rangle$ del sistema con el hamiltoniano H , cuyos autovalores y autoestados son desconocidos, siendo lo que se debe obtener mediante la función de Green. Una manera de salvar este escollo es expresar el estado fundamental $|\Phi_0\rangle$ (estado fundamental exacto) en término del estado fundamental $|\varphi_0\rangle$ del hamiltoniano sin interacción H_0 , el cual sí es conocido.

Estos dos estados fundamentales se pueden relacionar a través del teorema de

Gell-Mann y Low [159]:

$$|\Phi_0\rangle = \hat{S}(0, -\infty)|\varphi_0\rangle. \quad (47)$$

La idea es que antes de encender la perturbación V (en $t \rightarrow -\infty$) el sistema se encuentra en su estado fundamental $|\varphi_0\rangle$. Posteriormente, cuando la perturbación está completamente encendida a $t = 0$, el sistema estará en el estado fundamental $|\Phi_0\rangle$, al que se arriba a partir de la evolución adiabática de $|\varphi_0\rangle$. Este teorema permite relacionar el estado fundamental de un sistema interactuante con el fundamental del no-interactuante.

Hablar de sistemas en equilibrio, significa referirse a sistemas que son perturbados por potenciales reversibles. Por lo tanto, si el sistema se apaga en $t \rightarrow \infty$, el estado $|\Phi(\infty)\rangle$ vuelve a ser el estado fundamental del hamiltoniano H_0 , a menos de una fase global δ (ver Ref. [160]) tal que

$$|\varphi_0\rangle e^{i\delta} = |\Phi(\infty)\rangle = \hat{S}(\infty, 0)|\Phi_0\rangle = \hat{S}(\infty, -\infty)|\varphi_0\rangle, \quad (48)$$

$$\Rightarrow e^{i\delta} = \langle\varphi_0|\hat{S}(\infty, -\infty)|\varphi_0\rangle. \quad (49)$$

Esta expresión, junto con propiedades del operador \hat{S} , permite escribir $\langle\Phi_0|$ como

$$\langle\Phi_0| = \langle\varphi_0| \hat{S}(-\infty, 0) = e^{-i\delta} \langle\varphi_0| \hat{S}(\infty, -\infty) \hat{S}(-\infty, 0) = \frac{\langle\varphi_0|\hat{S}(\infty, 0)}{\langle\varphi_0|\hat{S}(\infty, -\infty)|\varphi_0\rangle}. \quad (50)$$

A continuación, hay que transformar la función de Green que está definida en la representación de Heisenberg, a la representación de Interacción. Para esto, convertimos los operadores de campo según las Ec.36 y Ec.39

$$\hat{\Phi}_H(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t} \hat{\Phi}_{H_0} e^{iH_0 t} e^{-iHt} = \hat{U}^\dagger(t) \hat{\Phi}_{H_0} \hat{U}(t) = \hat{S}(0, t) \hat{\Phi}_{H_0} \hat{S}(t, 0). \quad (51)$$

El subíndice H_0 en el operador de campo indica que se está en la representación de Interacción, en la que los operadores evolucionan acorde a la componente no

perturbada del hamiltoniano. Por lo tanto, el producto de operadores campo se puede escribir como

$$\hat{\Phi}_H(2)\hat{\Phi}_H^\dagger(1) = \hat{S}(0, t_2)\hat{\Phi}_{H_0}(t_2)\hat{S}(t_2, 0)\hat{S}(0, t_1)\hat{\Phi}_{H_0}^\dagger(t_1)\hat{S}(t_1, 0). \quad (52)$$

Considerando que el operador satisface $\hat{S}(t_2, t_1) = \hat{S}(t_2, t')\hat{S}(t', t_1)$, la Ec.46 puede reescribirse como

$$G(2, 1) = -i \frac{\langle \varphi_0 | \hat{T}[\hat{S}(\infty, -\infty)\hat{\Phi}_{H_0}(2)\hat{\Phi}_{H_0}^\dagger(1)] | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \hat{S}(\infty, -\infty) | \varphi_0 \rangle}. \quad (53)$$

En el caso de sistemas en equilibrio la perturbación no depende explícitamente del tiempo, por lo que es posible definir la variable temporal $\tau = t_2 - t_1$, de forma tal que las magnitudes físicas dependen sólo de la diferencia entre tiempos.

Procediendo con el cálculo de la función de Green se expande la matriz \hat{S} , tanto en el numerador como en el denominador, en potencias de $\hat{V}(t)$:

$$G(2, 1) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n+1} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{\langle \varphi_0 | \hat{T}[\hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n)\hat{\Phi}_{H_0}(2)\hat{\Phi}_{H_0}^\dagger(1)] | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \hat{S}(\infty, -\infty) | \varphi_0 \rangle}. \quad (54)$$

El gran desafío aquí es cómo evaluar los brackets con productos de operadores ordenados temporalmente. Para ello se utiliza el teorema de Wick y las reglas diagramáticas de Feynman [158]. Este teorema tiene en cuenta todas las posibles parejas que se pueden armar entre operadores y todos los ordenamientos temporales, posibilitando escribir cada término de la expansión como una suma de productos de funciones de Green del sistema no perturbado, a las que suelen llamarse propagadores libres y que contienen parejas de operadores de creación y

destrucción.

$$G^0(t_2 - t_1) = -i \langle \varphi_0 | \hat{T} [\hat{\Phi}_H(t_2) \hat{\Phi}_H^\dagger(t_1)] | \varphi_0 \rangle \quad (55)$$

Cuando $t_2 > t_1$ el operador orden temporal \hat{T} permuta la posición de los operadores de campo (sin cambio de signo en el caso bosónico). Por lo tanto, el operador $\hat{\Phi}_H(t_2)$ actuará directamente sobre el estado fundamental $|\varphi_0\rangle$. En el caso de nuestro sistema, un fonón en dicho estado será destruido a un tiempo t_2 y creado a un tiempo posterior t_1 , lo cual es posible si hay fonones en el estado fundamental.

Sistemas fuera del equilibrio

Los sistemas en equilibrio refieren a sistemas que cuando una perturbación se enciende o apaga en $t \rightarrow \infty$ el sistema vuelve a su estado fundamental de H_0 (a menos de alguna fase). En el caso de sistemas fuera del equilibrio, una vez que la perturbación se activa o desactiva (por ejemplo un campo electromagnético, un pulso de luz, un acoplamiento del sistema con reservorios a diferentes potenciales químicos o temperaturas), no hay garantía de que el sistema vuelva al mismo estado inicial para tiempos asintóticamente largos debido a la irreversibilidad de los procesos. Por lo que el estado $t \rightarrow \infty$ debe ser definido cuidadosamente ya que seguramente el estado correspondiente al sistema no interactuante no será una buena descripción. Un método para calcular el límite $t \rightarrow \infty$ en las integrales involucradas en las funciones de Green consiste en pensar que la integral temporal de \hat{S} tiene dos partes: la primera va desde $(-\infty, \tau)$ la segunda va desde $(\tau, -\infty)$. El camino de integración es un loop temporal que empieza y termina en $t = -\infty$ y tiene la ventaja de ser conocido el estado final e inicial. A este camino se lo conoce como contorno de Keldysh (*CK*) y se encuentra ilustrado en la Fig.26.

Sobre la rama superior (+) el ordenamiento temporal es cronológico, mientras que en la rama inferior (-) es anti-cronológico. En este caso la función de Green ordenada en el contorno de Keldysh se define en la representación de Heisenberg

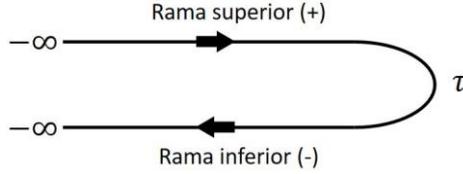


Figura 26: Contorno de Keldysh (CK).

como $G(2, 1) = i\langle \hat{T}_{CK} \Phi_H(2) \Phi_H^\dagger(1) \rangle$ siendo

$$G(2, 1) = \begin{cases} i\langle \Phi_H(2) \Phi_H^\dagger(1) \rangle & \text{si } \tau_2 > \tau_1 \quad \text{en } CK \\ -i\langle \Phi_H^\dagger(1) \Phi_H(2) \rangle & \text{si } \tau_2 < \tau_1 \quad \text{en } CK \end{cases}$$

donde \hat{T}_{CK} es el operador de orden a lo largo de CK , y donde el subíndice H indica que se está en la representación de Heisenberg. En forma análoga al caso de equilibrio, la función de Green puede expresarse en la representación de interacción, lo que requiere transformar estados y operadores mediante el operador \hat{S} sobre el contorno CK .

$$\hat{S}_{CK}(t_2, t_1) = \hat{T}_{CK} \exp \frac{-i}{k} \int_{t_1}^{t_2} d\tau \hat{V}(\tau) .$$

Utilizando esta definición y las relaciones dadas por las Ecs.47 y 52 se llega a

$$G(2, 1) = -i\langle \varphi_0 | \hat{T}_{CK} [\hat{S}_{CK}(-\infty, -\infty) \hat{\Phi}_{H_0}(2) \hat{\Phi}_H^\dagger(1)] | \varphi_0 \rangle, \quad (56)$$

donde la diferencia fundamental con el caso de equilibrio es que el operador de orden temporal no es sobre el eje real, sino que ordena los tiempos sobre el contorno de Keldysh, de acuerdo al orden que tienen en el contorno.

Al igual que en el caso de equilibrio, haciendo una expansión de \hat{S} (o \hat{S}_{CK}) se

arriba a una ecuación cerrada para la función G . Utilizando el teorema de Wick, cada término de la expansión se puede expresar como una suma de productos de funciones de Green correspondientes al sistema no perturbado. Esta expansión da lugar a una ecuación que la función de Green debe satisfacer y que se conoce como *ecuación de Dyson* [158]

$$G(2, 1) = G^0(2, 1) + \int dx_3 \int dx_4 \int_{CK} d\tau_3 \int_{CK} d\tau_4 G^0(2, 3) \Sigma(3, 4) G(4, 1) \quad (57)$$

donde G^0 es la función de Green del sistema sin perturbar. Σ es la autoenergía (definida más adelante) y contiene los efectos de la interacción. En principio esta última consiste en la suma de un número infinito de diagramas distintos. Para acoplamientos débiles, esta suma puede aproximarse por unos pocos términos.

Un inconveniente que aparece al utilizar el bucle temporal del contorno CK , es que el ordenamiento dado por el operador temporal sobre el contorno hace necesario introducir seis funciones de Green diferentes. Por ejemplo, si τ_2 y τ_1 se encuentran sobre la rama superior (+), el ordenamiento sobre el contorno será cronológico. En cambio, si τ_2 y τ_1 se encuentran sobre la rama inferior (-), el ordenamiento sobre el contorno será anti-cronológico. Si τ_2 y τ_1 se encuentran sobre diferentes ramas, estarán automáticamente ordenados. Estos ejemplos muestran que es adecuado definir una función de Green ordenada temporalmente, una anti-temporalmente y otras dos que no tengan ordenamiento temporal, a las que llamaremos respectivamente G^t , G^r , $G^<$, $G^>$.

Función mayor:

$$G^>(2, 1) = -i \langle \Phi_H(2) \Phi_H^\dagger(1) \rangle \quad (58)$$

Función menor:

$$G^<(2, 1) = -i \langle \Phi_H^\dagger(1) \Phi_H(2) \rangle \quad (59)$$

Causal u ordenada temporalmente:

$$G^t(2, 1) = \Theta(t_2 - t_1)G^>(2, 1) + \Theta(t_1 - t_2)G^<(2, 1) \quad (60)$$

Ordenada anti-temporalmente:

$$G^t(2, 1) = \Theta(t_1 - t_2)G^>(2, 1) + \Theta(t_2 - t_1)G^<(2, 1) \quad (61)$$

Fácilmente puede mostrarse que como se cumple que $G^t + G^r = G^< + G^>$, hay solamente tres independientes por lo que hay libertad de elección para elegir diferentes convenciones. Para el estudio de los flujos de calor que desarrollaremos en esta tesis las funciones de Green más adecuadas son $G^<$, $G^>$, y dos funciones que se pueden definir a partir de combinaciones lineales de las cuatro anteriores: la retardada G^R y la avanzada G^A , como combinaciones lineales de las primeras cuatro:

$$\begin{aligned} G^R &= -i\Theta(t_2 - t_1)\langle[\Phi_H(2), \Phi_H^\dagger(1)]\rangle, \\ &= \Theta(t_2 - t_1)[G^>(2, 1) - G^<(2, 1)], \end{aligned} \quad (62)$$

y

$$\begin{aligned} G^A &= i\Theta(t_1 - t_2)\langle[\Phi_H(2), \Phi_H^\dagger(1)]\rangle, \\ &= \Theta(t_2 - t_1)[G^<(2, 1) - G^>(2, 1)]. \end{aligned} \quad (63)$$

donde $[A, B] = AB - BA$ denota el conmutador entre dos operadores. Nuevamente, se puede fácilmente mostrar que entre G^R , G^A , $G^<$ y $G^>$ hay solamente tres independientes. La función de Green y la autoenergía Σ pueden ser escritas en

forma matricial

$$\hat{G}(2, 1) = \begin{pmatrix} G_t(2, 1) & -G^<(2, 1) \\ G^>(2, 1) & -G_{\bar{t}}(2, 1) \end{pmatrix} \quad (64)$$

y

$$\hat{\Sigma}^t(2, 1) = \begin{pmatrix} \Sigma^>(2, 1) & \text{si } t_2 > t_1 \\ -\Sigma^<(2, 1) & \text{si } t_2 < t_1 \end{pmatrix} \quad (65)$$

$$\hat{\Sigma}^{\bar{t}}(2, 1) = \begin{pmatrix} \Sigma^>(2, 1) & \text{si } t_2 < t_1 \\ -\Sigma^<(2, 1) & \text{si } t_2 > t_1 \end{pmatrix} \quad (66)$$

satisfaciendo una ecuación matricial análoga a la ecuación de Dyson dada en la Ec.57

$$\hat{G}(2, 1) = \hat{G}^0(2, 1) + \int dx_3 \int dx_4 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_4 \hat{G}^0(2, 3) \hat{\Sigma}(3, 4) \hat{G}(4, 1). \quad (67)$$

Tanto en la Ec.57 como en la Ec.67, se pueden encontrar términos con la estructura $C = AB$, u otros que involucren productos de dos o más funciones

$$C(t_2, t_1) = \int_c d\tau A(t_2, \tau) B(\tau, t_1), \quad (68)$$

(se suprimieron las variables espaciales). Con el fin de resolver dicha ecuación aplicamos el teorema de Langreth también conocido como reglas de Langreth [138], que permiten expresar los elementos de cualquier producto de matrices en el espacio de Keldysh en función de las componentes retardada, avanzada y menor exclusivamente. Estas reglas transforman las integrales sobre un contorno de Keldysh CK cerrado en integrales ordinarias definidas sobre el eje real (este teorema no

se demuestra aquí, ver Ref. [138, 161]). Si por ejemplo se asume que t_2 está en la rama superior (+) y que t_1 en la rama inferior (-), entonces la componente mayor de C se escribe:

$$C^{>}(2, 1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt A^R(t_2, t) B^{>}(t, t_1) + A^{>}(t_2, t) B^A(t, t_1). \quad (69)$$

Un resultado análogo se obtiene para la componente menor, solo hay que reemplazar $>$ por $<$. Se puede aplicar el mismo procedimiento para la componente avanzada y retardada, que en notación compacta se obtiene (en el eje real):

$$C^{(R,A)} = A^{(R,A)} B^{(R,A)}. \quad (70)$$

Generalizando este resultado a un producto de tres funciones $D = ABC$ se tiene:

$$D^{(>,<)} = A^R B^R C^{(>,<)} + A^R B^{(>,<)} C^A + A^{(>,<)} B^A C^A. \quad (71)$$

Aplicando esta regla a la ecuación de Dyson (Ec.57) y luego de hacer un poco de álgebra, se llega a la siguiente expresión para dicha ecuación

$$G^{(>,<)} = 1 + G^R \Sigma^R G_0^{(>,<)} 1 + \Sigma^A G^A + G^R \Sigma^{(>,<)} G^A.$$

El modelo

Proponemos un modelo microscópico para el transporte de energía asistido por fonones. Consideramos un arreglo o cadena unidimensional de átomos acoplados armónica y bidireccionalmente, ver Fig. 27. La cadena central se encuentra dividida en dos segmentos I (izquierdo) y II (derecho) con diferentes intensidades de acoplamiento K_I y K_{II} entre átomos idénticos (haciendo referencia a las masas) y acopladas entre ellas también armónicamente con una constante de acoplamiento

to $K_{int}(t)$. El sistema se encuentra sujeto a un potencial de sitio armónico que representa el sustrato. La cadena central se encuentra conectada en sus extremos a dos cadenas semi-infinitas, L , para el extremo izquierdo, y R para el extremo derecho de la cadena. Dichas cadenas, están conformadas por partículas de masas m_L y m_R respectivamente que interactúan armónicamente con constantes de acoplamiento K_L y K_R . Estas cadenas juegan el rol de reservorios térmicos (o termostatos) de temperatura T_L y T_R .

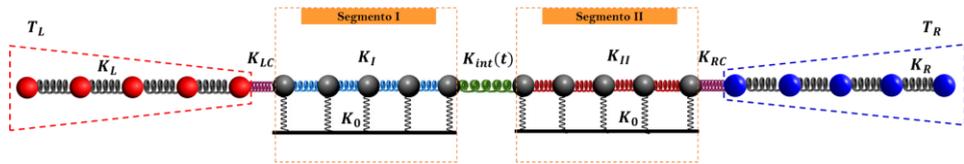


Figura 27: Esquema del modelo microscópico. El sistema está compuesto por dos cadenas unidimensionales acopladas por una interacción dependiente del tiempo. La cadena semi-infinita izquierda es termalizada a una temperatura T_L y la cadena de la derecha a una temperatura T_R .

El hamiltoniano del sistema puede ser escrito como:

$$H = H_L + H_R + H_{central} + H_{int}(t) + H_{contacto}$$

donde $H_{L,R}$ es el hamiltoniano de los reservorios térmicos izquierdo (L)/ derecho (R) respectivamente. $H_{central}$ describe las contribuciones de los segmentos I y II de la cadena central, H_{int} representa la interacción entre estos dos segmentos y $H_{contacto}$ representa el contacto entre la cadena central y los reservorios (L, R).

El hamiltoniano de la cadena central resulta

$$H_{central} = \sum_{\alpha=L,II} \sum_{i=1}^{N_\alpha-1} \frac{p_{i,\alpha}^2}{2m_{i,\alpha}} + \frac{1}{2} K_\alpha (x_{i+1,\alpha} - x_{i,\alpha})^2 + \frac{1}{2} K_0 x_{i,\alpha}^2. \quad (72)$$

Los dos segmentos $\alpha = I, II$ de la cadena central tienen igual longitud $N_\alpha = N/2$.

K_α es la constante de acoplamiento entre elementos de cada segmento α y K_0 es la elástica del resorte del potencial de sitio. Los segmentos de la cadena central están acoplados armónicamente mediante una interacción dependiente del tiempo. Entonces, el hamiltoniano de la interacción puede ser escrito como:

$$H_{int}(t) = \frac{1}{2} K_{int}(t) (x_{N_{I,I}} - x_{N_{II,II}})^2 \quad (73)$$

donde $K_{int}(t) = K_{int}^0 + K_{int}^1(t) = K_0 + K_{int} \cos(\omega_0 t)$. Siendo K_{int}^0 la contribución estática. K_{int}^1 y ω_0 son la amplitud y la frecuencia de la parte con modulación temporal respectivamente. $m_{i,\alpha}$ la masa del i -ésimo átomo de la cadena α , $x_{i,\alpha} = q_{i,\alpha} - ia$ denota el desplazamiento a partir de la posición de equilibrio ia , donde a es la distancia de equilibrio entre las partículas y $p_{i,\alpha}$ es el momento lineal. El índice $i = 1$ identifica al átomo de un segmento que está en contacto con un reservorio.

El contacto entre la cadena central y los reservorios es descrito por el hamiltoniano:

$$H_{contacto} = \frac{1}{2} K_{LC} (x_{1,L} - x_{1,I})^2 + \frac{1}{2} K_{RC} (x_{1,R} - x_{1,II})^2, \quad (74)$$

donde los elementos $(1, I)$ y $(1, II)$ son los sitios de la cadena central en contacto con el reservorio L, R respectivamente. El hamiltoniano del reservorio correspondiente a una cadena semi-infinita es:

$$H_\beta = \sum_{i=1}^{N_\beta} \frac{p_{i,\beta}^2}{2m_\beta} + \frac{1}{2} K_\beta (x_{i,\beta} - x_{i+1,\beta})^2, \quad (75)$$

donde $N_\beta \rightarrow \infty$ es el número de partículas que compone el reservorio β ($\beta = L, R$).

Es conveniente expresar este hamiltoniano en términos de los modos normales

para condiciones de contorno abiertas. La transformación correspondiente resulta:

$$x_{i,\beta} = \frac{S}{N_\beta + 1} \sum_{k_\beta=0}^{N_\beta} \text{sen}(u_{k_\beta} i) x_{k_\beta}, \quad (76)$$

y

$$p_{i,\beta} = \frac{S}{N_\beta + 1} \sum_{k_\beta=0}^{N_\beta} \text{sen}(u_{k_\beta} i) p_{k_\beta}, \quad (77)$$

con

$$u_{k_\beta} = \frac{k_\beta \pi}{N_\beta + 1}, \quad k_\beta = 0, \dots, N_\beta. \quad (78)$$

Con esta transformación el hamiltoniano de los reservorios resulta:

$$H_\beta = \sum_{k_\beta=0}^{N_\beta} \frac{p_{k_\beta}^2}{2m_{k_\beta}} + \frac{1}{2} K_\beta [1 - \cos(u_{k_\beta})] x_{k_\beta}^2, \quad (79)$$

con $\omega_{k_\beta} = \sqrt{\frac{K_\beta}{2m_{k_\beta}[1 - \cos(u_{k_\beta})]}} = \frac{q}{2\Omega_0} [1 - \cos(u_{k_\beta})]$ la frecuencia de cada modo.

Corriente de energía

Dado el hamiltoniano H_β y las frecuencias ω_{k_β} , la corriente de energía a lo largo de los contactos se obtiene a partir de:

$$\frac{dE_\beta}{dt} = -i \langle [H, H_\beta] \rangle = J_\beta(t), \quad (80)$$

donde hemos considerado que no existen perturbaciones temporales actuando en el contacto entre el sistema y el reservorio. El flujo de calor también puede ser

calculado a partir de la siguiente expresión

$$J_{\beta}(t) = \sum_{k_{\beta}, l_{\alpha}} \gamma_{k_{\beta}, l_{\alpha}} \langle x_{k_{\beta}} p_{l_{\alpha}} \rangle, \quad (81)$$

donde k_{β} es el modo k del reservorio β , l_{α} denota el sitio de la cadena central (α) que se halla en contacto con el reservorio β . $\omega_{k_{\beta}}$ las frecuencias de los modos normales del reservorio β y $\gamma_{k_{\beta}, l_{\alpha}}$ los parámetros de acoplamiento (elementos de la matriz de acoplamiento cadena central-reservorio). Para el caso particular de nuestro modelo estos coeficientes se pueden escribir en términos de amplitudes de modos normales (Ecs.76-79)

$$\gamma_{k_{\beta}, l_{\alpha}} = \frac{K_{\beta c}}{m_{\alpha}} \frac{\mathbf{S}}{(N_{\beta} + 1)} \frac{2}{\text{sen}(u_{k_{\beta}})} \quad (82)$$

Las correlaciones involucradas en la corriente, pueden reescribirse utilizando funciones de Green que dependen de los operadores fonónicos $x_k(t)$, que denotan coordenadas espaciales y temporales. Para el cálculo de esta corriente será necesario definir

$$G_{l_{\alpha}, k_{\beta}}^{<}(t, t') = i x_{k_{\beta}}(t') x_{l_{\alpha}}(t) , \quad (83)$$

$$G_{k_{\beta}, l_{\alpha}}^{<}(t, t') = i x_{l_{\alpha}}(t') x_{k_{\beta}}(t) , \quad (84)$$

que al ser reemplazadas en la expresión de la corriente deben ser evaluadas a tiempos iguales ($G_{l_{\alpha}, k_{\beta}}^{<}(t, t) = -[G_{k_{\beta}, l_{\alpha}}^{<}(t, t)]^*$)

$$J_{\beta}(t) = \sum_{k_{\beta}, l_{\alpha}} \lim_{t \rightarrow t'} \gamma_{k_{\beta}, l_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial t'} x_{k_{\beta}}(t) x_{l_{\alpha}}(t') , \quad (85)$$

$$J_{\beta}(t) = - \sum_{l_{\alpha}, k_{\beta}} \lim_{t \rightarrow t'} \text{Re} \ i \gamma_{k_{\beta}, l_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial t'} G_{l_{\alpha}, k_{\beta}}^{<}(t, t') . \quad (86)$$

Para calcular la corriente, se necesita entonces poder calcular $\tilde{G}_{\alpha, k\beta}^< (t, t')$. Como la teoría para sistemas fuera del equilibrio es estructuralmente similar a la de no equilibrio, la derivación se basará en la técnica de la ecuación de movimiento (ver Apéndice I) pero con un ordenamiento sobre CK . Siguiendo los desarrollos del apéndice se puede escribir la ecuación de movimiento para la función de Green retardada como

$$\begin{aligned} -\partial_t^2 + F_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}} G_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}}^R(t, t') + F_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}+1} G_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}+1}^R(t, t') + F_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}-1} G_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}-1}^R(t, t') &= \\ = \frac{1}{m_{\alpha}} \delta_{k_{\alpha}, k'_{\alpha}} \delta(t-t') + F_{k_{\alpha}, l_{\alpha}} G_{k_{\alpha}, l_{\alpha}}^R(t, t') \delta_{k'_{\alpha}, l_{\alpha}} - F_{k_{\alpha}, l_{\beta}} G_{k_{\alpha}, l_{\beta}}^R(t, t') \delta_{k'_{\alpha}, l_{\alpha}} \end{aligned} \quad (87)$$

considerando que l_{α} refiere al sitio de la cadena central conectado al reservorio β y que l_{β} es el primer sitio del reservorio β . La representación integral para la ecuación de Dyson correspondiente a la función $G_{\alpha, k\beta}^R$ es

$$G_{\alpha, k\beta}^R(t, t') = \sum_{k_{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 v_{k_{\beta}, k_{\alpha}}^2 G_{l_{\alpha}, k_{\alpha}}^R(t, t_1) g_{k_{\beta}}^R(t_1, t'), \quad (88)$$

donde $g_{k_{\beta}}$ es la función de Green de equilibrio del reservorio β cuando está desacoplado del sistema central

$$g_{k_{\beta}}^R(t-t') = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho_{k_{\beta}}(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\xi} e^{-i\omega(t-t')}, \quad (89)$$

con $\rho_{k_{\beta}}(\omega) = 2\pi(\omega - \omega_{k_{\beta}})$ y $\xi = 0^+$. Reemplazando la ecuación 88 en la ecuación 87 se puede definir la autoenergía

$$\Sigma_{\beta}^R(t, t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \Sigma_{\beta}^R(\omega) e^{-i\omega(t-t')}, \quad (90)$$

donde

$$\Sigma_{\beta}^R(\omega) = \int_{\beta} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Gamma_{\beta}(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\xi} \quad \text{con } \xi = 0^+, \quad (91)$$

con $\Gamma_\beta(\omega)$ la función espectral definida como

$$[\Gamma_\beta(\omega)]_{l,l'} = \sum_{k_\beta} \rho_{k_\beta}(\omega) \nu_{k_\beta,l} \nu_{k_\beta,l'}^* \quad (92)$$

y donde $\Sigma_{k_\alpha,k'_\alpha}^R(t,t') = \delta_{k'_\alpha,l'_\alpha} \delta_{k_\alpha,l_\alpha} \Sigma_\beta^R(t,t')$. La autoenergía Σ_β contiene los efectos de los reservorios, y dependen solamente de la estructura espectral del sistema β y de la intensidad del parámetro de contacto $\nu_{k_\beta,l}$. En nuestro modelo la densidad espectral toma la siguiente forma

$$\Gamma_\beta(\omega) = \lim_{N_\beta \rightarrow \infty} \frac{2\pi K_{\beta c}^2}{m_\beta m_\alpha (N_\beta + 1)} \sum_{k_\beta=0}^{N_\beta} \sin^2 u_{k_\beta} \frac{1}{\omega_{k_\beta}} \delta(\omega - \omega_{k_\beta}) + \delta(\omega + \omega_{k_\beta}) ,$$

$$= \text{sgn}(\omega) \frac{\Theta}{m_\beta} \left[1 - \frac{\beta c}{K_{\beta c}} \frac{\beta}{\omega^2} \right] \frac{1}{K_{\beta c}} \frac{\beta}{\omega^2} . \quad (93)$$

De esta forma la ecuación 87 puede ser escrita en forma matricial como

$$-\partial_t^2 \hat{G}^R(t,t') + \hat{G}^R(t,t') \hat{F}(t') - \int dt_1 \hat{G}^R(t,t_1) \hat{\Sigma}^R(t_1,t') = \delta(t,t') \mathbf{I} \quad (94)$$

Por otra parte, la ecuación de Dyson para la función de Green menor se puede obtener utilizando recursivamente la regla de Langreth (Ecs.68-71). Para dos sitios de la cadena central es

$$G_{k_\alpha,k'_\alpha}^<(t,t') = \sum_{l_\alpha} \int dt_1 \int dt_2 G_{k_\alpha,l_\alpha}^R(t,t_1) \Sigma_\beta^<(t_1-t_2) G_{l_\alpha,k'_\alpha}^A(t_2,t'), \quad (95)$$

y para una coordenada en la cadena y la otra en el reservorio

$$\begin{aligned} G_{k_\alpha, k_\beta}^< (t, t') &= \sum_{k_\beta} |V_{l_\alpha, k_\beta}|^2 \int dt_1 [G_{k_\alpha, l_\alpha}^R (t, t_1) g_{k_\beta}^< (t_1 - t') + \\ &+ G_{k_\alpha, l_\alpha}^< (t, t_1) g_{k_\beta}^A (t_1 - t')], \end{aligned} \quad (96)$$

donde $\Sigma_\beta^<(t - t')$ es la transformada de Fourier de

$$\Sigma_\beta^<(\omega) = i\eta_\beta(\omega)\Gamma_\beta(\omega), \quad (97)$$

donde hemos llamado $\eta_\beta(\omega)$ a la distribución Bose-Einstein $\eta(\omega, T_\beta) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T_\beta} - 1}}$, la cual depende de la temperatura T_β del reservorio β . En estas expresiones se han introducido las siguientes funciones de Green de los reservorios desacoplados [138, 162]

$$g_{k_\beta}^<(t - t') = i\langle x_{k_\beta}^\dagger(t') x_{k_\beta}(t) \rangle = i\eta_\beta(\omega_{k_\beta}) e^{-i\omega_{k_\beta}(t-t')}, \quad (98)$$

$$g_{k_\beta}^{R,A}(t - t') = i\Theta(\pm t \mp t') \langle [x_{k_\beta}^\dagger(t'), x_{k_\beta}(t)] \rangle = \pm i\Theta(\pm t \mp t') e^{-i\omega_{k_\beta}(t-t')}. \quad (99)$$

Las funciones dadas por las ecuaciones 98 y 99 son las transformadas de Fourier de

$$g_{k_\beta}^<(\omega) = \frac{i}{2\pi} \eta_\beta(\omega_{k_\beta}) \rho_{k_\beta}(\omega) \quad (100)$$

y

$$g_{k_\beta}^{R,A}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho_{k_\beta}(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\xi}, \quad \text{con } \xi = 0^+ \quad (101)$$

Por otra parte en nuestro modelo la matriz de constantes de fuerza $\hat{F}(t)$ es definida como: $\hat{F}(t) = \hat{F}^{(0)} + F_0^0 + \hat{F}^{(1)}(t)$ donde $\hat{F}^{(0)}$ incluye las interacciones interpartículas (sin dependencia temporal (orden cero)), F_0^0 hace referencia a la interacción con el potencial de sitio y $\hat{F}^{(1)}(t)$ contiene los términos de las interacciones entre segmentos que dependen explícitamente del tiempo (término perturbativo). De

esta forma los elementos de la matriz resultan:

$$\begin{aligned}
 & \square \frac{K_I}{m_I} [2\delta_{k,k'} - \delta_{k',k\pm 1}] && 1 < k < N/2 \\
 & \square \frac{K_{II}}{m_{II}} [2\delta_{k,k'} - \delta_{k',k\pm 1}] && N/2 + 1 < k < N \\
 & \square \frac{K_I}{m_I} + \frac{K_{LC}}{m_L} \delta_{k,k'} - \frac{K_I}{m_I} \delta_{k',k\pm 1} && k = 1 \\
 F_{k,k'}^{(0)} = & \frac{m_R}{m_{II}} && , \quad (102) \\
 & \square \frac{K_{II}}{m_{II}} + \frac{K_{RC}}{m_R} \delta_{k,k'} - \frac{K_{II}}{m_{II}} \delta_{k',k\pm 1} && k = N \\
 & \quad + \frac{K_{int}^0}{m_{int}} [\delta_{k,k'} - \delta_{k',k\pm 1}] \\
 & \square \frac{K_I}{m_I} && k = N/2 \\
 & \quad + \frac{K_{II}^0}{m_{II}} [\delta_{k,k'} - \delta_{k',k\pm 1}] && k = N/2 + 1 \\
 & \quad + \frac{m_I}{m_{II}} \frac{K_{int}^0}{m_{int}} \\
 & \quad F_{k,k'}^{(0)}(t) = -K_0 \delta_{k,k'} && (103)
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 & \square \frac{1}{2} \frac{K_I}{m_I} + \frac{K_{int}^1}{m_{int}} [\delta_{k,k'} - \delta_{k',k\pm 1}] && k = N/2 \\
 F_{k,k'}^{(1)}(t) & \square \frac{1}{2} \frac{K_{II}}{m_{II}} + \frac{K_{int}^1}{m_{int}} [\delta_{k,k'} - \delta_{k',k\pm 1}] && k = N/2 + 1 \\
 & \square && (104)
 \end{aligned}$$

Los estudios de esta tesis requieren solo el cálculo de la corriente a través del contacto sistema-reservorio. Realizando un procedimiento similar se pueden obtener las expresiones correspondientes para el flujo de energía a lo largo de la cadena central, desarrollos que no se presentan ya que no son necesarias para los estudios de esta tesis. Sin embargo se puede explicar brevemente. La idea es calcular la corriente a partir de la tasa de cambio de la energía en un volumen del sistema, que en nuestro caso engloba dos átomos interactuantes (ver Fig.28). Considerando un volumen de la cadena central que contiene a las partículas k y

$k + 1$ y a partir de la ecuación de Heisenberg (Ec.36), podemos escribir la tasa de cambio de la energía en dicho volumen (variación local de la energía) en función de conmutadores:

$$\frac{dE_{k+1,k}}{dt} = -i \langle [H, H_{k,k} + H_{k+1,k+1} + H_{k,k+1}] \rangle + \frac{\partial H_{k+1,k}(t)}{\partial t}, \quad (105)$$

donde $H_{k,k}$ corresponde al hamiltoniano del sitio k de la cadena central y $H_{k+1,k}(t)$ al hamiltoniano de interacción entre k y $k + 1$ respectivamente. Esto puede ser expresado como

$$\frac{dE_{k+1,k}}{dt} = J_{k,k-1}(t) - J_{k+2,k+1}(t) + P_{k+1,k}(t), \quad (106)$$

donde $J_{k,k-1}$ es la energía proveniente del sitio $k - 1$ hacia el sitio k y $J_{k+2,k+1}$ es el flujo desde el sitio $k + 1$ al $k + 2$ (Fig.28) y $P_{k+1,k}$ es la potencia desarrollada por la perturbación mecánica temporal sobre dicho volumen (si la hubiere). Se ha definido signo positivo cuando el flujo apunta de izquierda a derecha. Los cálculos

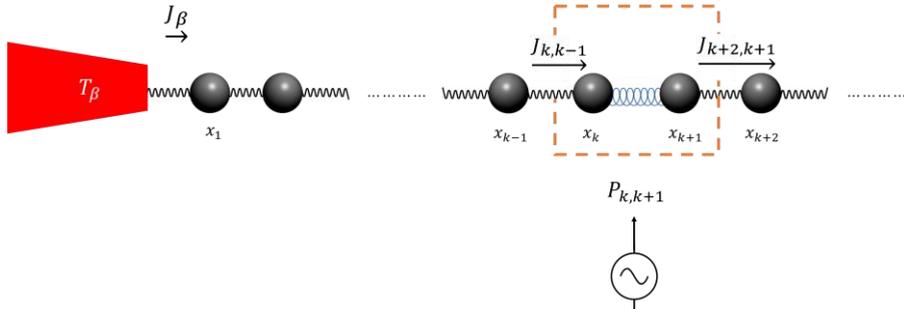


Figura 28: Esquema del flujo de energía entre elementos del sistema.

explícitos del flujo de calor $J_{k,k-1}$ y la potencia entregada en el contacto $(k - 1, k)$

se realizan respectivamente a partir de las siguientes expresiones

$$J_{k,k-1}(t) = \frac{K_\alpha}{m_\alpha} \langle x_{k-1} p_k \rangle, \quad (107)$$

$$P_{k,k-1}(t) = \frac{\partial K_{int}(t)}{\partial t} \langle (x_k - x_{k-1})^2 \rangle, \quad (108)$$

que independientemente del volumen seleccionado a lo largo del sistema central, requiere evaluar correlaciones entre operadores, las cuales serán obtenidas a partir del cálculo de las funciones de Green correspondientes que para los sitios k_α y k'_α de la cadena central.

Ecuación de Dyson. Solución perturbativa.

A partir de la ecuación 94 es posible obtener una solución para la función de Green retardada, la cual será importante al momento de calcular la corriente a través del contacto sistema-reservorio (Ec.86). Un camino es trabajar con una representación de la ecuación de Dyson [138, 162], que conduce a un conjunto de ecuaciones lineales para G^R que puede ser resuelto numéricamente. Escribiendo las ecuaciones 94 en una representación integral

$$\hat{G}^R(t, t') = \hat{G}^0(t - t') + \int_{t'}^t dt_1 \hat{G}^R(t, t_1) F^{(1)}(t_1) G^0(t_1 - t'), \quad (109)$$

donde $\hat{G}^0(t - t')$ es la función de Green retardada no perturbada correspondiente a la solución del problema central acoplado a los reservorios sin perturbación temporal.

Las definiciones de las funciones de Green Ec.62 y Ec.63 muestran que $\mathcal{G}_i^A(t, t') = [G_{i,i}^R(t', t)]^*$, por lo que entonces la función de Green retardada de la ecuación 109 brinda la solución de la ecuación menor dada por las Ecs.95 y 96. De esta manera, todo el problema queda circunscripto a encontrar una forma práctica para

calcular la función de Green retardada. Siguiendo la estrategia descrita en [138] y [124], en primer lugar se realiza la transformada de Fourier para la componente retardada:

$$\hat{G}^R(t, \omega) = \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(\omega+i0^+)(t-t')} \hat{G}^R(t, t'), \quad (110)$$

que junto con la forma integral de la ecuación de Dyson (Ec.109) conduce a un conjunto de ecuaciones lineales para G^R

$$\hat{G}^R(t, \omega) = \hat{G}^{(0)}(\omega) + \sum_{k=0}^{\infty} e^{-ik\omega_0 t} \hat{G}^R(t, \omega + k\omega_0) \hat{F}_k^{(1)} \hat{G}^{(0)}(\omega), \quad (111)$$

$$\hat{F}_k^{(1)}(t) = \sum_{K=0}^{\infty} \hat{F}_k^{(1)} e^{ik\omega_0 t}, \quad (112)$$

que en nuestro caso dado que la perturbación contiene un único armónico, hace que esta expansión solo contenga los términos $K = \pm 1$.

Para problemas estacionarios, la transformada de Fourier de la Ec.110 se reduce a la transformada que usualmente se utiliza en el formalismo de Green de no equilibrio. Es decir, si se utiliza la Ec.94 pero sustituyendo $\hat{F}(t)$ por \hat{F}^0 , y se realiza la transformación usual en $\hat{G}^0(t-t')$ y $\hat{\Sigma}^R(t-t')$, se llega a la siguiente ecuación cuya solución nos da la función buscada:

$$\hat{G}^0(\omega)[\omega^2 \mathbf{I} - \hat{F}^0 - \hat{\Sigma}^R(\omega)] = \mathbf{I} \quad (113)$$

que es la componente estacionaria de la función de Green retardada de la cadena central conectada a los reservorios, cuando no hay perturbación dependiente del tiempo (I es la matriz identidad).

El sistema lineal Ec.111, que nos lleva a la solución completa del problema, posee la misma estructura que la dinámica de un problema en el que los fonones con una energía $k\omega$ interactúan con un potencial $\hat{F}^{(1)}$ emitiendo o absorbiendo

paquetes de energía $k\omega_0$, teniendo un estado final de energía $k(\omega \pm \omega_0)$.

Debido a la estructura periódica en el tiempo de la Ec. 111, la función de Green retardada es también una función periódica en el tiempo con período $2\pi/\omega_0$. Por este motivo es muy útil trabajar en la expansión:

$$\hat{G}^R(t, \omega) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\omega_0 t} \hat{G}(k, \omega), \quad (114)$$

donde a las funciones $\hat{G}(k, \omega)$ se las denomina componentes de Floquet.

Generalmente el sistema de ecuaciones Ec.111 debe ser resuelto numéricamente. Sin embargo, puede ser conveniente realizar expansiones sistemáticas de H_{int} en potencias de $\hat{F}^{(1)}$ que permitan obtener expresiones analíticas. Considerando que $H_{int}(t)$ es pequeño comparado con el hamiltoniano independiente del tiempo, una solución a bajo orden en este parámetro puede resultar una buena aproximación. Por ejemplo, escribiendo la ecuación de Dyson para $\hat{G}^R(t, \omega + k\omega_0)$ se puede obtener una solución a segundo orden

$$\begin{aligned} \hat{G}^R(t, \omega + k\omega_0) = & \hat{G}^0(\omega + k\omega_0) + \\ & + \sum_{k'=-\infty}^{\infty} \hat{G}^0(t, \omega + (k+k')\omega_0) \hat{F}_{k'}^{(1)} \hat{G}^0(\omega + k\omega_0) \exp(-ik'\omega_0 t). \end{aligned} \quad (115)$$

Si se reemplaza esta ecuación en la Ec.111 y se reagrupan los coeficientes con $\exp(-i\omega_0 kt)$ en la expresión resultante se obtiene:

$$\hat{G}^R(t, \omega) \approx \sum_{k'=-\infty}^{\infty} e^{-ik'\omega_0 t} \hat{G}(k', \omega), \quad (116)$$

donde

$$\hat{G}(0, \omega) = \hat{G}^0(\omega) + \sum_{k=0} \hat{G}^0(\omega) \hat{F}_{-k}^{(1)} \hat{G}(k, \omega), \quad (117)$$

$$\hat{G}(\pm k, \omega) = \hat{G}^0(\omega \pm k\omega_0) [\hat{F}_{\pm k}^{(1)} \hat{G}^0(\omega) + \sum_{k'=0} \hat{F}_{\pm k-k'}^{(1)} \hat{G}(k', \omega)], \quad (118)$$

donde se ha definido $\hat{G}(k, \omega) = \hat{G}^0(\omega + k\omega_0) \hat{F}_k^{(1)} \hat{G}^0(k, \omega)$. Como en nuestro caso la perturbación dependiente del tiempo contiene sólo un armónico ($k = \pm 1$), las sumatorias contendrán sólo los términos $k = \pm 1$.

Como sólo consideramos procesos que involucran el intercambio de un solo fonón ω_0 y perturbaciones muy débiles estas expresiones (Ecs.117 y 118) se reducen a:

$$\hat{G}(0, \omega) = \hat{G}^0(\omega) \quad (119)$$

$$\hat{G}(\pm 1, \omega) = \hat{G}^0(\omega \pm \omega_0) \hat{F}_{\pm 1}^1 \hat{G}^0(\omega) \quad (120)$$

En la Fig.29 se muestran los diagramas que representan los procesos de este último caso.

Los paneles de dicha figura muestran en forma esquemática los procesos de más bajo orden involucrados en el transporte térmico, correspondientes a las expresiones 117 y 118 y que bajo nuestras aproximaciones se reducen a las Ecs.119 y 120. Estas expansiones pueden pensarse como una combinación de evoluciones libres con interacciones con el forzante periódico, donde lo último genera cambios en la frecuencia de propagación (en nuestro caso correspondientes a un fonón ω_0).

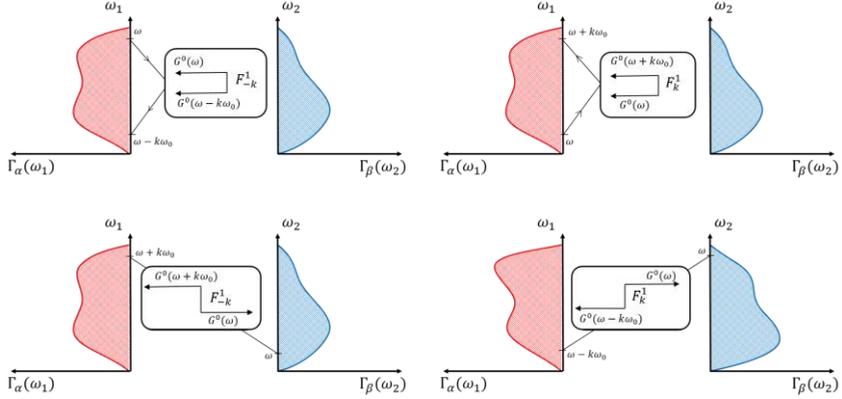


Figura 29: Diagramas ilustrativos de los procesos, de más bajo orden, de intercambio de energía entre los reservorios α y β , correspondientes a 1 fonón.

Cálculo de la corriente DC de calor

Partiendo de la expresión de la Ec.86 para la corriente de energía desde el sistema hacia los reservorios y teniendo en cuenta la Ec.96 y la representación Ec.114 se puede escribir el flujo de calor como

$$\begin{aligned}
 J_{\beta} = & - \sum_{k\beta} \Omega^2 \gamma^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re}[\omega G_{l_{\alpha}l'_{\alpha}}(0, \omega) g_{k\beta}^<(\omega) + \\
 & + \sum_{\beta'=1}^{\mathcal{N}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\omega + k\omega_0) |G_{l_{\alpha}l'_{\alpha}}|^2 \Sigma_{\beta}^<(\omega) g_{k\beta}^A(\omega + k\omega_0)] \quad (121)
 \end{aligned}$$

donde para nuestro modelo $l_{\alpha} = 1, N$, es el sitio de la cadena central α conectado al reservorio β y $l'_{\alpha} = 1, N$ es el sitio de la cadena central conectado al reservorio β' . Utilizando las definiciones de las ecuaciones 90, 97, 100 y 101 para las autoenergías

menor y avanzada y transformando Fourier-Floquet, se obtiene que

$$J_{\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [\text{Im}[2\omega G_{I_{\alpha}, I_{\alpha}}(0, \omega)] \Gamma_{\beta}(\omega) \eta_{\beta}(\omega) + \sum_{\beta'=1}^N \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\omega + k\omega_0) |G_{I_{\alpha}, I_{\alpha'}}(k, \omega)|^2 \Gamma_{\beta'}(\omega) \Gamma_{\beta}(\omega + k\omega_0) \eta_{\beta}(\omega)] \quad (122)$$

Utilizando la siguiente identidad recursiva [163]

$$G_{j,j'}(k, \omega) - G_{j',j}^*(-k, \omega + k\omega_0) = i \sum_{k'} \sum_{\beta} G_{j', I_{\beta}}(k + k', \omega - k'\omega_0) \times \Gamma_{\beta}(\omega - k'\omega_0) G_{j, I_{\beta}}^*(k', \omega + k'\omega_0) \quad (123)$$

la expresión 122 puede reescribirse como

$$J_{\beta} = \sum_{\beta'=L,R} \sum_{k=-1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (\omega + k\omega_0) [\eta_{\beta'}(\omega) - \eta_{\beta}(\omega + k\omega_0)] \times \Gamma_{\beta}(\omega + k\omega_0) \Gamma_{\beta'}(\omega) \cdot G_{I_{\alpha}, I_{\alpha'}}(k, \omega)^2 \quad (124)$$

donde el flujo positivo se define positivo cuando la corriente de calor J_{β} fluye desde el sistema hacia el reservorio. Definimos la función transmisión entre los reservorios β y β' correspondiente al modo k como

$$T_{\beta, \beta'}^k(\omega, \omega_0) = T^k(\omega, \omega_0) = (\omega + k\omega_0) \Gamma_{\beta}(\omega + k\omega_0) \Gamma_{\beta'}(\omega) \cdot G_{I_{\alpha}, I_{\alpha'}}(k, \omega)^2. \quad (125)$$

La conservación de la energía del sistema implica que la potencia total entregada por todos los campos o agentes mecánicos externos puede ser disipada hacia los reservorios a una tasa dada por $P_{total} = J_L + J_R$ donde J_L y J_R son la tasa de calor absorbido por los reservorios L y R respectivamente. Es interesante observar

que la corriente DC dada por la Ec.124 podría no ser cero incluso en ausencia de gradiente de temperatura, ya que $\eta_{\beta'}(\omega) \neq \eta_{\beta}(\omega + k\omega_0)$, aún cuando $T_{\beta} = T_{\beta'}$, esto es gracias a la contribución de energía debido al trabajo realizado por los campos o agentes mecánicos periódicos, disipado hacia los reservorios.

La fórmula de Landauer - Büttiker [141, 163] aplicada al caso de transporte de calor en sistemas fonónicos sin la acción de una perturbación se puede obtener a partir de la ecuación 124 considerando sólo los términos con $k = 0$

$$J_{\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\beta'=L,R} T_{\beta,\beta'}^0 [\eta_{\beta}(\omega) - \eta_{\beta'}(\omega)] \quad (126)$$

con

$$T_{\beta,\beta'}^0(\omega) = \omega \Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta'}(\omega) \cdot G_{I_{\alpha}, I_{\alpha'}}(0, \omega)^2 \quad (127)$$

el coeficiente de transmisión de fonones de frecuencia ω a través del sistema, entre los reservorios β y β' , y donde $G_{I_{\alpha}, I_{\alpha'}}(0, \omega)$ es la función de Green del sistema sin perturbación.

Implementación numérica

En la figura 30 se presenta un esquema ilustrativo del procedimiento numérico llevado a cabo para integrar las ecuaciones presentadas en los apartados anteriores, así como el necesario para calcular las magnitudes derivadas como la corriente estacionaria y la función transmisión.

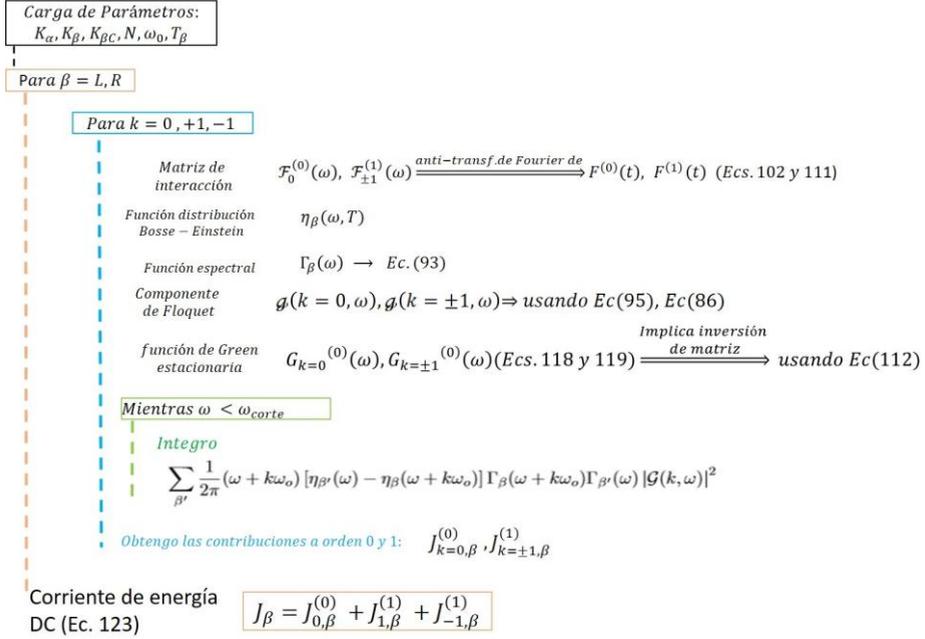


Figura 30: Esquema ilustrativo del método de integración

Cuando el sistema está perturbado temporalmente, la corriente de energía que fluye desde/hacia los reservorios β está dada por la expresión Ec.124 y la función transmisión es Ec.125. A partir de estas definiciones se puede apreciar que la expresión para el cálculo de la corriente involucra a simple vista tres funciones, la primera es la función distribución Bose-Einstein,

$$\eta_\beta(\omega) = \eta(\omega, T_\beta) = \frac{1}{e^{k\omega/k_B T_\beta} - 1}$$

la cual depende de la temperatura T_β del reservorio β . La segunda es la función espectral $\Gamma_\beta(\omega)$ dada por Ec.93, y por último, aparece la función $G_{\omega, \alpha'}(k, \omega)$ que son las denominadas componentes de Floquet de la función de Green (Ec.119), que dan cuenta de los procesos de intercambio de un fonón entre los reservorios.

El producto de estas últimas dos funciones involucradas en la función transmisión definida en Ec.125, contiene toda la información sobre los canales fonónicos de transmisión disponibles.

Es importante destacar, que las componentes de Floquet a orden cero, Ec.119 y a orden uno, Ec.120, se definen a partir de la función de Green del sistema sin perturbar (Ec.113), siguiendo el desarrollo realizado en la sección *Formalismo de Green*.

Entonces, para obtener las componentes de Floquet que aparecen en la ecuación para la corriente, es necesario obtener la función de Green sin perturbar $\hat{G}^0(\omega)$ y $\hat{G}^0(\omega + \omega_0)$ para cada valor de ω a integrar. Por lo tanto, es necesario invertir una matriz (Ec.113), en cada paso de integración. Esto último conlleva un costo numérico elevado que escala además con el tamaño del sistema (N).

Para calcular la corriente de energía J_β que fluye desde/hacia el reservorio β hacia/desde el sistema (Ec.124) hay que integrar sobre todo el espectro de frecuencias posibles ω (acotado por las frecuencias de corte máxima), y sumar sobre todas las contribuciones k posibles, que en nuestro caso particular son tres ($k = 0, 1$ y -1) ya que sólo consideramos el intercambio de un fonón. La inversión de matrices tamaño $N_\alpha \times N_\alpha$ para cada valor de ω a integrar es un punto crucial en referencia a los costos numéricos que intervienen en el cálculo de la corriente. Dado el gran número de pasos de integración incluso para sistemas de N bajo, el costo computacional resulta limitante para este problema. Por este motivo se restringieron los parámetros analizados a rangos acotados. Igualmente el análisis de efecto tamaño resulta muy costoso respecto de los tiempos de ejecución.

A continuación se explica brevemente los pasos que componen el algoritmo numérico que acompañan a la figura 30.

Algoritmo numérico cadenas cuánticas

1. Asigno espacio en memoria.
2. Defino Variables.
3. Defino las Funciones involucradas:
 - Matriz de interacción a orden cero (Ec.102)
 - Matriz de interacción a orden uno (términos perturbativos) (Ec.104)
 - Función distribución Bose-Einstein de los reservorios (η_θ): depende de la temperatura de cada reservorio.
 - Función distribución espectral (Γ_θ) para cada reservorio θ (Ec.93) Inicializo parámetros: se seleccionan los valores de los parámetros involucrados en el cálculo.
 - Función (rutina) para la inversión de una matriz: Utilizada para el cálculo de la función de Green del sistema sin perturbar $\hat{G}^0(\omega)$ (Ec.113).
4. Para cada θ
 - Calculo la contribución a orden cero de la corriente del reservorio θ ($k = 0$).
 - Mientras $\omega < \omega_{corte}$
 - Calculo la contribución de J_θ a orden cero: Para ello debemos calcular la componente de Floquet a orden cero (Ec.119) Lo cual implica calcular la función de Green del sistema sin perturbar $\hat{G}^0(\omega)$. Para calcular esta última, hay que realizar la inversión de la matriz (Ec.113).

- Calculo y acumulo

$$\sum_{\beta'} \frac{1}{2\pi} \int_{\omega} [\eta_{\beta'}(\omega) - \eta_{\beta}(\omega)] \Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta'}(\omega) \cdot G_{I_{\alpha} I_{\alpha'}}(0, \omega) \cdot^2$$

- Obtengo entonces $J_{0,\beta}^{(0)}$ contribución a orden cero de la corriente del reservorio β .
- Calculo la contribución a orden uno de la corriente del reservorio β ($k = +1$).

- Mientras $\omega < \omega_{corte}$

- Calculo la contribución de J_{β} a orden uno: Para ello debemos calcular la componente de Floquet a orden uno (Ec.120), lo cual implica calcular la función de Green del sistema sin perturbar $\hat{G}^0(\omega)$. Para calcular esta última, hay que realizar la inversión de la matriz (Ec.113).

- Calculo y acumulo

$$\sum_{\beta'} \frac{1}{2\pi} \int_{\omega} (\omega + \omega_0) [\eta_{\beta}(\omega) - \eta_{\beta}(\omega + \omega_0)] \Gamma_{\beta}(\omega + \omega_0) \Gamma_{\beta'}(\omega) \cdot G_{I_{\alpha} I_{\alpha'}}(1, \omega) \cdot^2$$

- Obtengo entonces $J_{+1,\beta}^{(1)}$; contribución a orden uno de la corriente del reservorio β con $k = +1$.
- Calculo la contribución a orden uno de la corriente del reservorio β ($k = -1$).

- Mientras $\omega < \omega_{corte}$

- Calculo la contribución de J_{β} a orden uno: Para ello debemos calcular la componente de Floquet a orden uno (Ec.120), lo cual implica calcular la función de Green del sistema sin perturbar $\hat{G}^0(\omega)$. Para calcular esta última, hay que realizar la inversión de la matriz (Ec.113).

• Calculo y acumulo

$$\sum_{\beta'} \frac{1}{2\pi} (\omega - \omega_{\beta}) [\eta_{\beta}(\omega) - \eta_{\beta}(\omega - \omega_{\beta})] \Gamma_{\beta}(\omega - \omega_{\beta}) \Gamma_{\beta}(\omega) \cdot G_{\beta\alpha}(-1, \omega) \cdot^2$$

- Obtengo entonces $J_{-1,\beta}^{(1)}$: contribución a orden uno de la corriente del reservorio β con $k = -1$.

5. Calculo la corriente estacionaria DC (Ec. 124):

$$J_{\beta} = J_{0,\beta}^{(0)} + J_{+1,\beta}^{(1)} + J_{-1,\beta}^{(1)}$$

Regímenes de transporte

En la cadena lineal, la energía que fluye desde/hacia el reservorio puede ser calculada por Ec.124 y requiere conocer las funciones $\hat{G}(k, \omega)$.

La solución exacta del conjunto de ecuaciones dada por la Ec.115 se puede resolver numéricamente. Sin embargo, en el límite de un acoplamiento temporal débil o bajas frecuencias, se pueden resolver estas ecuaciones aproximadamente considerando sólo los primeros órdenes. Estas serán las aproximaciones consideradas en esta tesis.

El estudio se realiza con las ecuaciones expresadas en magnitudes adimensionales utilizando valores típicos de un átomo: $m \sim 10^{-26}$ kg, constantes de red $a \sim 0.1$ nm, frecuencias $\omega \sim 10 - 100$ GHz. Las temperaturas están en unidades de $T_0 \sim 50$ K. A partir de estos valores de referencia, los estudios numéricos consideran parámetros adimensionales cuyos valores aseguran un régimen cuántico.

Estudiamos diversas situaciones para nuestro sistema. Primero, exploramos el caso donde la intensidad de la interacción entre segmentos toma valores constantes. En ausencia de perturbaciones dependientes del tiempo, el flujo de calor dc es únicamente producido por un gradiente de temperaturas constante entre ambos

reservorios, obtenido a partir de la fórmula de Landauer - Büttiker para sistemas fonónicos Ec.126.

Antes de introducir la perturbación temporal, es importante comprender cómo la presencia del potencial de sitio y la constante de acoplamiento afecta la función transmisión $T_{\beta,\beta'}^0(\omega)$ entre los reservorios β y β' (Ec.127).

En general la transmisión es principalmente mediada por los modos de baja frecuencia, que son los más deslocalizados y típicamente presentes en sistemas lineales. Como nuestro modelo solamente considera interacciones armónicas, el potencial de sitio juega un rol crucial sobre el transporte térmico, ya que como mencionamos anteriormente es una fuente de localización de fonones. El potencial de sitio produce un corrimiento en la frecuencia de corte mínima de las bandas fonónicas desde cero a V_0 , donde V_0 es la amplitud del potencial de sitio (o sustrato). Entonces, la función transmisión toma valores en $\sqrt{V_0} < \omega < \sqrt{V_0 + 4K_{max}}$ [27].

Para poder ejemplificar el rol del potencial de sitio en la conducción de calor, en la Fig.31 graficamos $T_{L,R}^0(\omega)$ (Ec.127) el caso de un acoplamiento débil y uno fuerte entre ambos segmentos, con y sin presencia de potencial de sitio.

Las oscilaciones en la función transmisión $T_{\beta,\beta'}^0(\omega)$ están originadas por el tamaño finito de un sistema acoplado a reservorios, las cuales se harán más densas a medida que N aumenta. Por otra parte, al incrementar la intensidad del potencial de sitio, la amplitud de la función transmisión $T_{L,R}^0(\omega)$ disminuye. Esta disminución da cuenta de la localización de fonones que se produce por la presencia de un potencial de sitio, lo cual afectará la transferencia térmica a través del sistema. En ausencia de potencial de sitio, la función de transmisión para $\omega \rightarrow 0$ (modo acústico “cero”) es independiente del valor del acoplamiento local entre segmentos K_{int} (ver curvas roja y negra). En conclusión, el efecto del potencial de sitio es abrir un gap en las bajas frecuencias mientras que el de K_{int} es incrementar o reducir la contribución de los modos localizados. Esto indica que el contacto actúa

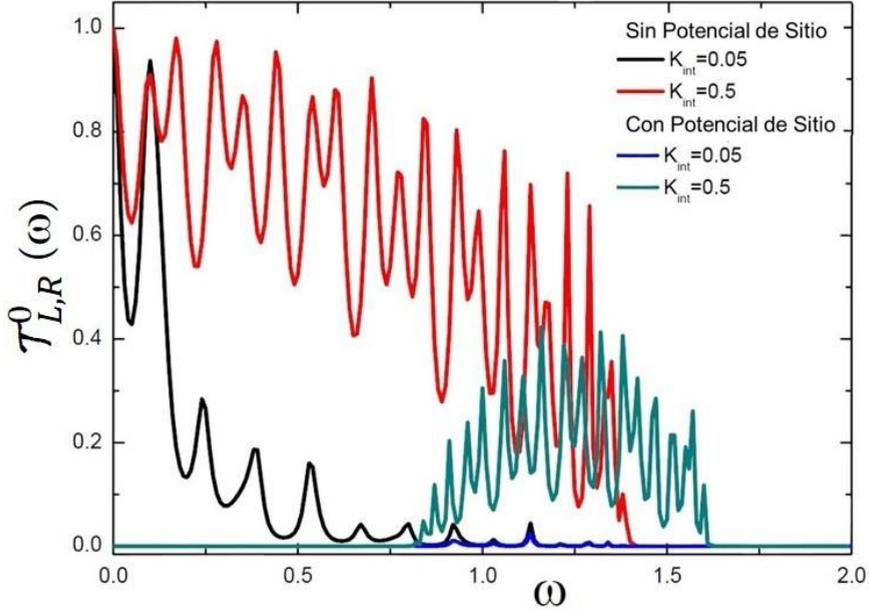


Figura 31: La función transmisión $T_{L,R}^0(\omega)$ del sistema sin perturbar definida en Ec.127 para dos segmentos acoplados con y sin potencial de sitio. La curvas roja y negra (verde y azul) corresponden al caso sin (con) potencial de sitio con valores de $N = 30$, $K_{int} = 0.05, 0.5$ respectivamente, $\omega_0 = 0$, $K_I = 2.5$, $K_{II} = 1.5$, $K_{LC} = 1.0$, $K_{RC} = 0.5$, $K_L = 4.5 = K_R$, $K_0 = 0.63$ y $K_0 = 0$ en caso de presencia/ausencia de potencial de sitio.

como un punto de dispersión y localización de los fonones de alta frecuencia.

La función transmisión $T_{\beta,\beta'}^k$, dada por la ecuación Ec.125, para nuestro sistema tomará valores cuando $k = \pm 1$ denotando las contribuciones debidas a los procesos de intercambio de un fonón. Es interesante notar que a diferencia del caso estático, la presencia de las perturbaciones dependientes del tiempo generan una asimetría en el transporte de calor respecto de la dirección del gradiente, es decir, los coeficientes de transmisión son distintos en una dirección o en otra. Esta asimetría dinámica es la que subyace en el fenómeno de rectificación.

En la Fig.32 se compara la $T^{k=1}(\omega, \omega_0)$ (Ec.125), normalizada para dos valores de frecuencias ω_0 diferentes. Cambiando la frecuencia de la modulación ω_0 , $T^{k=1}(\omega, \omega_0)$ el espectro puede estrecharse o ensancharse, permitiendo respectivamente la inactivación o activación de fonones de mayor frecuencia. En otras palabras ω_0 actúa como un parámetro que permite ajustar dinámicamente la localización de fonones. Respecto de las bajas frecuencias, también se observa este efecto, sin embargo la presencia del gap debido al potencial de sitio no se ve afectado.

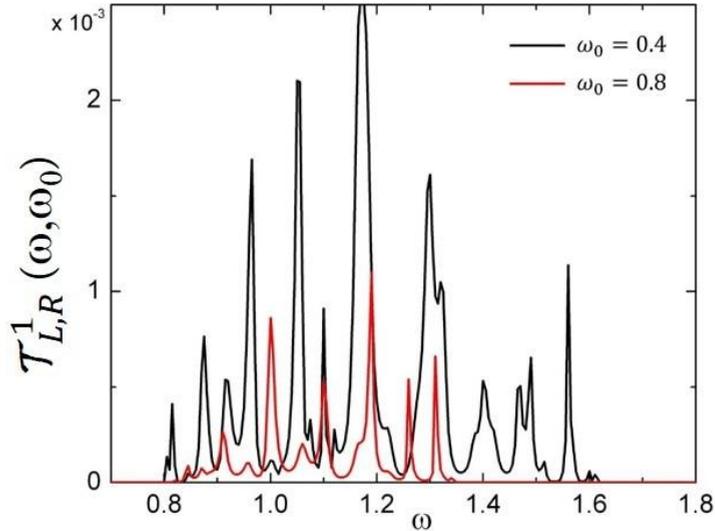


Figura 32: Componente de la función transmisión del sistema perturbado $T_{L,R}^{k=1}(\omega, \omega_0)$ definido en Ec.125, para $\omega_0 = 0.8, 0.4$. El resto de los parámetros: $N = 30, K_{int} = 0.05, \omega_0 = 0, K_I = 2.5, K_{II} = 1.5, K_{LC} = 1.0, K_{RC} = 0.5, K_L = 4.5 = K_R, K_0 = 0.63$.

Es interesante analizar qué ocurre en el caso del límite adiabático, y cuando $K_{int}(t)$ oscila muy rápido, es decir el período es mucho mayor que otros tiempos característicos del sistema. En el límite adiabático $\omega_0 \rightarrow 0$, el acoplamiento se puede expresar como el promedio de dos valores estáticos opuestos $1/2[(k_{mt}^0 +$

$\mathcal{K}_{int}^1) + (\mathcal{K}_{int}^0 - \mathcal{K}_{int}^1)]$. El sistema se reduce a dos segmentos conectados vía un acoplamiento constante \mathcal{K}_{int}^0 . En el límite de oscilaciones muy rápidas ($\omega_0 \rightarrow \infty$) el sistema siente una perturbación constante promedio $\langle \mathcal{K}_{int}(t) \rangle = \mathcal{K}_{int}^0 + \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \mathcal{K}_{int}^1(t) dt = \mathcal{K}_{int}^0$. Nuestro interés está enfocado en los regímenes que ocurren entre estos dos límites estáticos.

La función de transmisión, guarda la información de los “múltiples canales” (frecuencias) del sistema cadena + reservorios a través de los cuales se podrá transmitir la energía. Desde ya que, cómo y cuánto contribuyen cada uno de estos canales dependerá de si son o no activados a partir del intercambio de fonones con energía $k\omega_0$ y del número de ocupación de estados de energía $\eta_\theta(\omega)$ de los reservorios. De esta forma la transferencia de calor a lo largo del dispositivo puede ser mejorada o restringida controlando y ajustando *dinámicamente* los canales fonónicos.

Otro aspecto importante es analizar el rol del gradiente de temperatura sobre la corriente de calor. Para ello tomamos (sin pérdida de generalidad) T_R como la temperatura de referencia, y permitimos que T_L sea la única temperatura que varíe. Definimos $\Delta T = T_R - T_L$ y calculamos J_R y J_L desde Ec.124, donde el signo para la corriente es positiva cuando el calor fluye desde el sistema hacia el reservorio (ver Fig.12). En la Fig.33 mostramos los flujos de calor $J_{L,R}$ como función de $\Delta T/T_R$ para una determinada frecuencia ω_0 .

La Fig.33 presenta cuatro regímenes de transporte diferenciados:

■ **Régimen I** ($T_L > T_R$, $J_R > 0$ y $J_L < 0$):

Gobernado principalmente por el gradiente de temperatura, donde el calor fluye desde el reservorio de mayor temperatura al de menor temperatura. Aunque las corrientes tienen diferentes valores absolutos, la potencia inyectada que es la suma $J_R + J_L$, es suficientemente baja para que la dirección de los flujos quede determinado fundamentalmente por ΔT . El sistema se

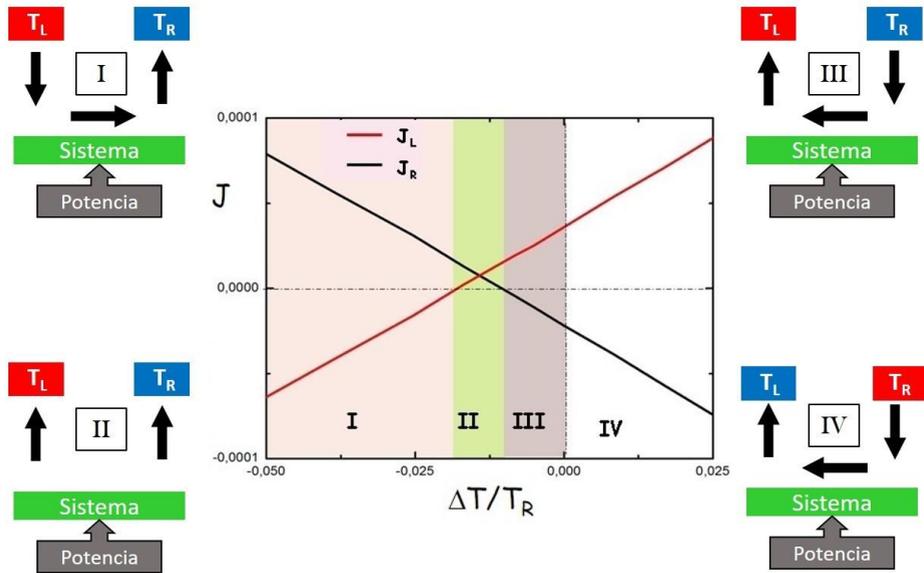


Figura 33: Panel central: Corriente $J_{L,R}$ versus $\Delta T/T_R$ para $\omega_0 = 0.8$ ($\Delta T = T_R \mathcal{F}_L$). Los paneles laterales muestran mediante el uso de flechas la dirección de flujo en cada régimen: a) Régimen I, b) Régimen II, c) Régimen III, d) Régimen IV. Parámetros: $N = 30$, $K_I = 2.5$, $K_{II} = 1.5$, $K_{int} = 0.05$, $K_{LC} = 1.0 = 2K_{RC}$, $K_L = K_R = 4.5$, $K_0 = 0.63$.

comporta como un conductor de calor en presencia de un gradiente de temperatura.

- **Régimen II** ($T_L > T_R$, $J_{R,L} > 0$):

Gobernado principalmente por la potencia inyectada que es disipada hacia los reservorios. El sistema funciona en su conjunto esencialmente como un disipador de energía. El origen de este régimen está dado por la inversión de la corriente en uno de los segmentos de la cadena central (L). En condición estacionaria, el valor de la corriente local en cada segmento debe ser independiente del sitio, Cuando J_R o J_L son iguales a cero como ocurre en los

dos extremos de este régimen (ver Fig.33), la corriente será cero a lo largo de todo el segmento que está en contacto con dicho reservorio. En esta situación el sistema puede operar como un aislante térmico local, no habiendo transferencia de calor a través de alguna parte del sistema.

■ **Régimen III** ($T_L > T_R$, $J_R < 0$ y $J_L > 0$):

El sistema actúa como un enfriador bombeando energía contra gradiente de temperatura. El calor fluye desde el reservorio frío hacia el más caliente. Las corrientes J_R y J_L son distintas, porque se requiere entregar una potencia neta.

■ **Régimen IV** ($T_L < T_R$, $J_R < 0$ y $J_L > 0$):

El calor fluye desde el reservorio de mayor temperatura hacia del de menor temperatura, es decir transporte está determinado por el gradiente de temperatura. Este régimen es idéntico en comportamiento al régimen I, con la única diferencia de que el gradiente de temperatura tiene sentido inverso. Dado que en los regímenes I y IV, las J_R y J_L toman diferentes valores para el mismo $|\Delta T|$, el sistema presenta una rectificación térmica *dinámica*.

Dependiendo de la frecuencia del acoplamiento, el sistema podría presentar alguno de estos comportamientos. Entonces, al ajustar el gradiente de temperatura y la frecuencia del acoplamiento es posible cambiar de un régimen de conducción a otro [164]. Así mismo, la función transmisión del sistema depende fuertemente de los parámetros estructurales como K_{int} , el cual juega un rol importante en los posibles regímenes y las transiciones entre ellos.

En la Fig.34 se muestran los diagramas de fase de los regímenes posibles en función $\Delta T/T_R$ y K_{int} para $\omega_0 = 0.8$ y 0.4 y verificando la condición de acoplamiento débil. Encontramos que el sistema sólo puede bombear energía contra gradiente de temperatura en cierta región de parámetros. Para $\omega_0 = 0.8$ el régimen

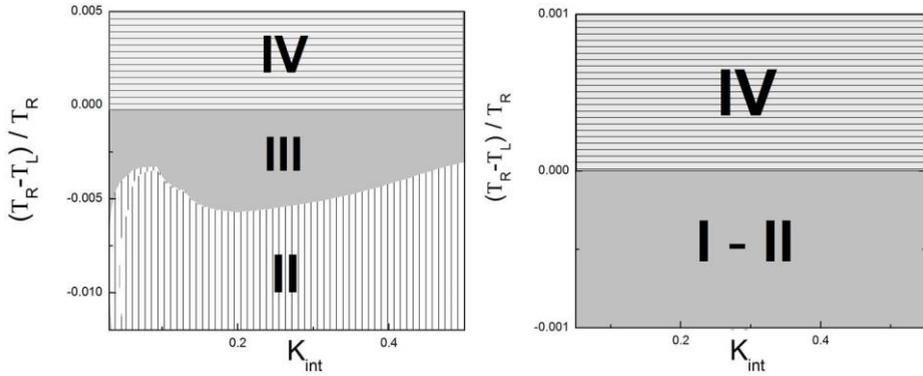


Figura 34: Izquierda: $\omega_0 = 0.8$. Derecha: $\omega_0 = 0.4$. La región III corresponde al fenómeno de refrigeración. En ambos casos se utilizó $N = 30$, $K_I = 2.5$, $K_{II} = 1.5$, $K_{LC} = 1.0 = 2K_{RC}$, $K_L = K_R = 4.5$, $K_0 = 0.63$

de enfriamiento se extiende a lo largo de una región considerable del espacio de parámetros (ver región III de la Fig.34 izquierda). Por otro lado para $\omega_0 = 0.4$ este régimen no existe. Como mencionamos anteriormente, una posible razón se debe a las diferencias entre las funciones transmisión. Por ejemplo, en la Fig.32 mostramos $T_{k=1}(\omega, \omega_0)$ para ambos valores de ω_0 . Se observa que los canales de alta frecuencia asociados a modos más localizados no están disponibles para $\omega_0 = 0.8$. Esto indicaría que la menor presencia de estos modos, o de un espectro de modos más acotado, favorece procesos de intercambio de fonones de R a L ($T_R > T_L$) del tipo $k\omega \rightarrow (k\omega + \omega_0)$ (absorción de un fonón), frente a los de $k\omega \rightarrow (k\omega - \omega_0)$ (emisión).

Existe otra característica interesante que está relacionada con la estructura. Para un valor de referencia T_R , hay una temperatura $T_{L_{min}}$ para el cual se encuentra un régimen de enfriamiento correspondiente a una diferencia de temperatura entre los reservorios dada por $\Delta T_{cooling} = T_R - T_{L_{min}}$. Esta última depende fuertemente del tamaño del sistema (N), como se muestra en la Fig.35. Cuando N varía, la distribución espectral de la función transmisión también lo hace, y por

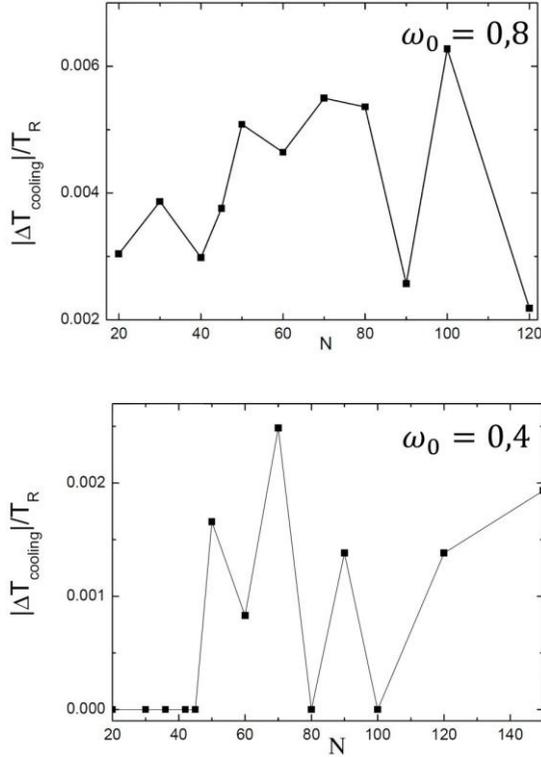


Figura 35: $\Delta T_{cooling}$ versus el tamaño del sistema N para $\omega_0 = 0.8$ (superior) y $\omega_0 = 0.4$ (inferior). El resto de los parámetros son los mismos que Fig.34. Los valores nulos indican que el efecto de enfriamiento no es posible.

lo tanto los canales posibles de conducción. Desde un punto de vista experimental puede ser crucial decidir la forma en la cual se ajustan los intervalos de temperatura requeridos para producir un efecto refrigerante. Esta “ingeniería fonónica” presenta dos alternativas: una relacionada con las características estructurales, por ejemplo variando el tamaño del sistema o ajustando los parámetros característicos asociados a las interacciones o tipos de átomos mediante una adecuada selección de los materiales de fabricación del dispositivo. Otra posibilidad está relacionada

con las características operativas del dispositivo, por ejemplo ajustando la intensidad o las frecuencias de las perturbaciones dependientes del tiempo. Las Figs.33, 34 y 35 son una clara evidencia de la segunda alternativa.

Rendimiento del refrigerador fonónico

Desde un punto de vista microscópico es posible proponer un mecanismo de refrigeración que se basa en un ciclo *dinámico* dado por la modulación periódica de K_{int} el cual produce la activación (o inactivación) de los modos fonónicos o canales térmicos. Como se mencionó anteriormente, la estructura espectral de las funciones transmisión $T^{k=\pm 1}(\omega, \omega_0)$ del sistema acoplado cadena + reservorios, guarda la información de los canales de transmisión posibles (frecuencias). Estos se activarán dependiendo de las temperaturas de los reservorios (y por lo tanto del número de ocupación de los niveles de energía de cada uno), favoreciendo procesos no simétricos $\omega \Leftrightarrow (\omega \pm \omega_0)$ que permitan un bombeo a contra gradiente de temperatura. Estos procesos de enfriamiento podrían deberse a efectos meramente cuánticos, sin embargo, no podemos afirmarlo sin hacer un barrido exhaustivo de parámetros en el caso clásico anteriormente estudiado.

Para caracterizar el rendimiento del sistema cuando opera como refrigerador, definimos el coeficiente CP que cuantifica la performance (rendimiento) de refrigeración o enfriamiento

$$CP = \frac{|\dot{Q}_{cold}|}{|\dot{Q}_{hot} + \dot{Q}_{cold}|} \quad (128)$$

donde \dot{Q}_{cold} es la corriente extraída del reservorio frío y \dot{Q}_{hot} es la corriente inyectada hacia el reservorio caliente entregando una potencia media $\dot{Q}_{hot} + \dot{Q}_{cold}$.

En la Fig.36 se grafica el coeficiente CP como una función del calor extraído desde el baño frío hacia el sistema.

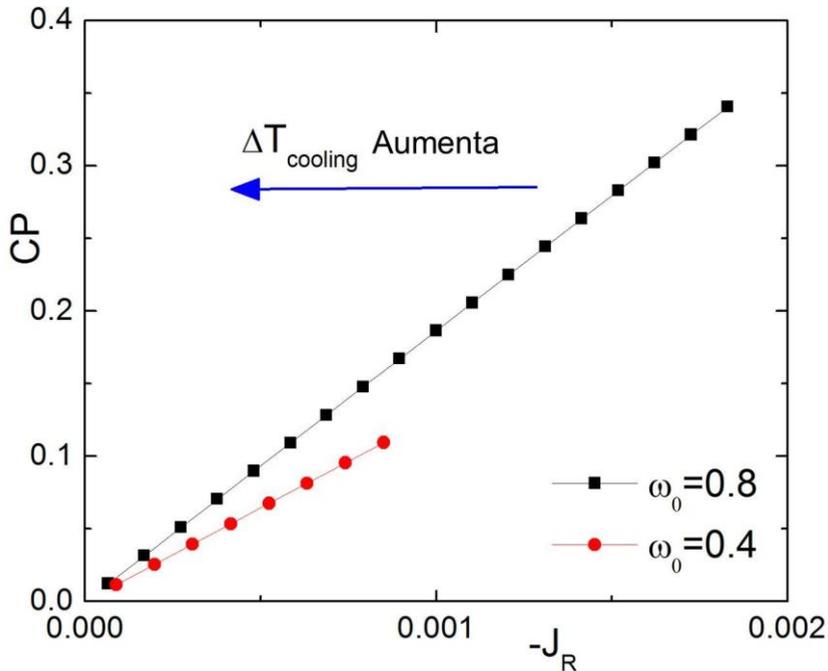


Figura 36: Gráfico de la performance de refrigeración CP (Ec.128) versus el calor extraído desde el reservorio frío hacia el sistema para distintas frecuencias $\omega_0 = 0.8$ y 0.4 con $N = 150$. El resto de los parámetros son los mismos que Fig.35.

En nuestro sistema ω_0 es un parámetro de control operacional para la eficiencia cuando el dispositivo está sujeto a una diferencia de temperatura. Las curvas muestran el comportamiento esperado: cuanto más grande es el calor extraído, más grande es la eficiencia del dispositivo. Sin embargo, la eficiencia presenta un límite superior e inferior para el calor que se puede extraer. El calor máximo y mínimo extraído para un dado ω_0 corresponden a un $\Delta T_{cooling}$ que va de cero al valor máximo respectivamente, obtenido del diagrama de fases (Fig.34). Además, el CP presenta un comportamiento monótonico, disminuyendo más rápido cuando es menor el calor extraído.

En la Fig.37 graficamos CP en función de N . Dado que para sistemas pequeños, el espectro de la función transmisión presenta un número finito (y discreto) de canales, el CP es sumamente sensible al valor de N . A pesar de ello, encontramos que aún para cadenas cortas, el CP puede tomar valores considerables, lográndose una muy buena performance de refrigeración.

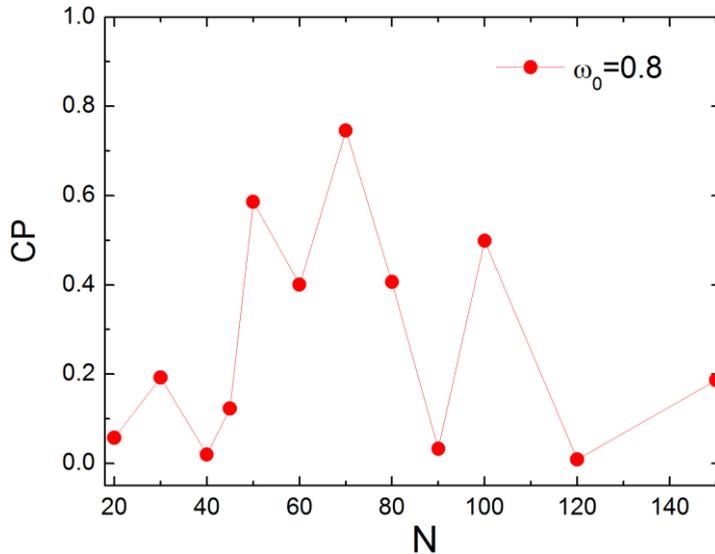


Figura 37: Coeficiente de performance CP (Ec.128) versus N para $\omega_0 = 0.8$, $K_I = 2.5$, $K_{II} = 1.5$, $K_{LC} = 1.0 = 2K_{RC}$, $K_L = K_R = 4.5$, $K_0 = 0.63$.

Conclusiones del capítulo

Es este capítulo propusimos un modelo microscópico cuántico para el transporte de calor asistido por fonones longitudinales bajo la acción de dos fuentes de no equilibrio. La primera es la presencia de un gradiente de temperatura constante entre dos reservorios térmicos. La segunda, es la modulación temporal de la

intensidad del acoplamiento entre segmentos de la cadena. A diferencia de otros trabajos en donde la perturbación temporal se introdujo mediante un potencial externo [29, 30], el mecanismo aquí propuesto supone que es la interacción entre átomos la que depende del tiempo. Este es el caso típico de sistemas de cadenas cortas compuestas, donde la aplicación de campos externos AC, o estiramientos y compresiones bajo algún protocolo temporal definido afecta los espectros vibracionales (fonones) de la estructura [43, 165, 166]. El estudio se realizó numéricamente a partir del formalismo de Green de no equilibrio de Keldysh. Se observó que el sistema presenta diferentes regímenes dinámicos de transporte como aislante, difusor térmico, motor térmico y un régimen de refrigeración y cuya eficiencia caracterizamos.

Capítulo 3: Transporte de calor en un sistema cuántico con interacciones no locales

Introducción

Las interacciones no locales originan una gran variedad de fenómenos naturales que se encuentran en escalas muy diversas, desde las macroescalas hasta las atómicas. Del mismo modo, el transporte de calor en sistemas de baja dimensión también se ve afectado por interacciones no locales. Sin embargo, a diferencia de la gran variedad de estudios basados en interacciones locales o a primeros vecinos, los estudios que contemplan interacciones no locales son, además de escasos, relativamente recientes.

En términos generales las interacciones no locales son caracterizadas por un potencial $V(r)$ que decae con la distancia r entre dos partículas de acuerdo con una ley de potencia, $V(r) \propto r^{-\nu}$, donde ν es un número real no negativo que representa el rango de la interacción y nos permite establecer el alcance de la misma. Es decir, el rango determina hasta qué “distancia” son efectivas dichas

interacciones. Cuando el rango $\nu \rightarrow \infty$, las interacciones resultan ser a primeros vecinos o locales mientras que si $\nu \rightarrow 0$ las interacciones se consideran de muy largo alcance, tendiendo a las correspondiente a campo medio.

Recientemente han surgido diversos estudios numéricos sobre el rol de las interacciones de largo alcance en el transporte térmico mediado por fonones, pero limitadas a sistemas estáticos, es decir en ausencia de perturbaciones dependientes del tiempo. Por ejemplo, Chen y col. [167] estudiaron el efecto de las interacciones de largo alcance en una cadena clásica anarmónica unidimensional con gradación de masas. En dicho trabajo encuentran que las interacciones de largo alcance favorecen el flujo de calor debido a la adición de nuevos enlaces entre átomos, es decir, nuevos canales para el transporte de calor. Estas interacciones no locales, conectan partículas distantes con masas muy diferentes, por lo que aumentan la asimetría del sistema, lo que a su vez, favorece el aumento de la rectificación. Además, como se crean nuevos canales asimétricos (debido al aumento del número de átomos distintos que interactúan con uno dado), la rectificación térmica aumenta con el tamaño del sistema, resolviendo así los problemas existentes en las propuestas habituales de rectificadores con interacciones a primeros vecinos [15], donde un incremento del tamaño “lava” este fenómeno.

Por otra parte, Olivares y col. [168], estudiaron el rol del rango de las interacciones sobre el transporte de energía, en el caso de una cadena clásica de rotores alineados unidireccionalmente. Ellos encuentran que dentro del rango de interacciones de corto alcance el sistema posee un comportamiento de conducción normal mientras que al aumentar el rango de la interacción el sistema se comporta como aislante térmico.

En el mismo año, Zhou y col. [169], investigaron el efecto de las interacciones de largo alcance en una cadena armónica unidimensional con dos tipos de ordenamientos de masas atómicas. Estudiaron el caso de un sistema homogéneo

(masas iguales) y un sistema no homogéneo donde las masas (distintas) están ordenadas de manera aleatoria. Encontraron que para los sistemas homogéneos, la interacción de largo alcance puede reducir la transmisión de fonones de baja frecuencia (modos más deslocalizados) y, por lo tanto, reducir la conductividad térmica. En contraste, para un sistema con desorden de masas, encuentran que la no localidad aumenta la capacidad de transmisión de los modos más localizados, respecto del caso de primeros vecinos: la incorporación de interacciones no locales, habilita a que átomos más lejanos pueden interactuar abriendo nuevos canales de conducción. De esta forma, fonones localizados pueden “deslocalizarse” y mejorar la posibilidad de transmisión, aumentando la conductancia térmica.

Recientemente se ha estudiado también el efecto del rango de las interacciones en cadenas del tipo Fermi-Pasta-Ulam (anarmónicas) y su dependencia con el tamaño del sistema [170, 171]. En ambos trabajos encuentran que la incorporación de interacciones no locales afectan el transporte de calor aumentando la conductividad térmica del sistema respecto del caso de primeros vecinos dependiendo fuertemente del rango de la interacción.

Es importante mencionar, que independientemente del sistema que se considere y a diferencia de los sistemas con interacciones a primeros vecinos, el estudio del efecto tamaño con interacciones no locales presenta grandes desafíos computacionales ya que puede resultar muy costoso en referencia a los recursos numéricos como lo expresan Iubini y col. en [172].

Todos estos trabajos teóricos-numéricos de primeros principios presentan resultados que explican los mecanismos subyacentes del transporte térmico en estructuras unidimensionales que involucran interacciones no locales.

Sin embargo, hasta donde tenemos conocimiento, no hay estudios de primeros principios que analicen el rol de las interacciones no locales sobre el transporte de calor cuando los sistemas dependen del tiempo. En este capítulo extendemos

el análisis del transporte térmico a cadenas unidimensionales con interacciones no locales, comparando con el caso local. Con este fin, proponemos un modelo microscópico unidimensional de tres segmentos sometido a la presencia de perturbaciones temporales en diferentes partes del sistema. El objetivo de este modelo de varias estructuras acopladas es incorporar una característica que se encuentra en muchas implementaciones experimentales, como lo es la aplicación de campos o acciones mecánicas en forma no local o distribuidas espacialmente. El estudio se realiza numéricamente a partir del formalismo de Green de no equilibrio de Keldysh.

El modelo

Consideramos un arreglo unidimensional de átomos, acoplados armónica y bi-direccionalmente. Dicha cadena está constituida por tres segmentos (I, II y III). La cadena central (II), está acoplada a los otros dos segmentos (I, y III), mediante una interacción dependiente del tiempo, ver Fig.38. Asumimos que nuestro siste-

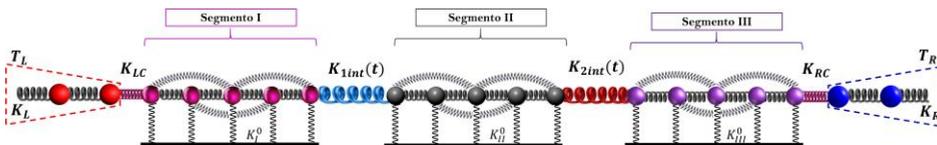


Figura 38: Esquema del modelo microscópico con interacciones no locales.

ma puede vibrar solo longitudinalmente, es decir, modelamos un bombeo de calor asistido únicamente por modos vibracionales longitudinales. Nuestro sistema está sujeto a un potencial de sitio armónico que modela la eventual interacción del sistema con un sustrato. A su vez, se encuentra conectado en sus extremos izquierdo (L) y derecho (R) a dos reservorios térmicos, modelados a partir de dos cadenas semi-infinitas de partículas de masas m_L y m_R acopladas armónicamente por

resortes con constantes elásticas K_L y K_R respectivamente (modelo de Rubin). Estas cadenas se asumen en equilibrio termodinámico con temperaturas T_L y T_R . El modelo incorpora interacciones no locales dentro de cada uno de los segmentos que componen la cadena central.

El hamiltoniano del sistema puede escribirse como:

$$H(t) = H_{central} + H_{int}(t) + H_{contacto} + H_{\beta} \quad (129)$$

donde $H_{central}$ describe la contribución de los segmentos (*I*, *II*, *III*), H_{int} la interacción entre los segmentos *I* - *II* y *II* - *III*, $H_{contacto}$ el contacto entre la cadena central y los reservorios *L*, *R*. H_{β} se refiere a la contribución de los reservorios $\beta = L, R$

$$H_{central} = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \frac{p_{i,\alpha}^2}{2m_{i,\alpha}} + \sum_{j=1, j \neq i}^{N_{\alpha}} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \frac{1}{2} K_{i,j}^{\alpha,\nu} (x_{j,\alpha} - x_{i,\alpha})^2 + \sum_{i=1}^{N_{\alpha}-1} \frac{1}{2} K_{\alpha}^0 x_{i,\alpha}^2 \quad (130)$$

donde $K_{\alpha,\nu}$ son las constantes elásticas en cada segmento

$$K_{i,j}^{\alpha,\nu} = \frac{K_{\alpha}}{|i-j|^{\nu}}, \quad (131)$$

K_{α} es alguna constante de referencia, K_{α}^0 es la constante elástica del potencial de sitio, N_{α} el número total de partículas del segmento $\alpha = I, II, III$ respectivamente. Cuando $\nu = 0$, la interacción es tipo campo-medio, mientras que cuando $\nu \rightarrow \infty$ corresponde a una interacción a primeros vecinos.

El modelo también puede ser generalizado para cualquier número de segmentos, sin embargo, nosotros sólo estudiaremos el caso de tres segmentos $\alpha = I, II$ y *III*, cada uno de longitud $N_{\alpha} = \frac{N}{4}, \frac{N}{2}, \frac{N}{4}$ respectivamente. $m_{i,\alpha}$ es la masa del *i*-ésimo átomo del segmento α , $x_i = q_i - ia$ representa el desplazamiento desde la posición de equilibrio *ia*, donde *a* es la distancia de equilibrio entre partículas y p_i es el

momento lineal de la partícula i .

En la Fig.39 se grafica $\frac{1}{|i-j|^\nu}$ versus $|i-j|$, la distancia entre los átomos i, j para distintos valores de ν . Este factor afecta la intensidad de los acoplamientos entre partículas y da cuenta del alcance de la interacción.

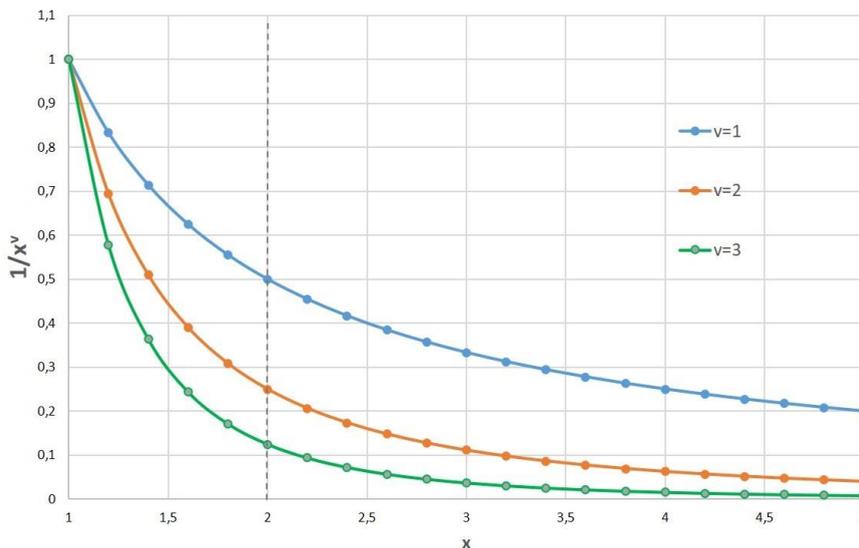


Figura 39: Gráfico del alcance de la interacción para distintos valores del parámetro de rango ν . $x = |i-j|$ representa la distancia entre las partículas i, j .

En dicha figura se puede observar que cuando, la distancia entre los átomos i, j es $x = |i-j| = 2$, la intensidad de las interacciones no locales son un 50 % más débiles que las locales cuando $\nu = 1$, un 25 % cuando $\nu = 2$ y un 12 % aproximadamente cuando $\nu = 3$. Cuando $x = |i-j| = 4$ la intensidad de las interacciones no locales son un 25 % de las de corto alcance cuando $\nu = 1$, resultan de un 6.25 % cuando $\nu = 2$ y de un 1.56 % aproximadamente cuando $\nu = 3$. Si se trabaja con cadenas cortas, la interacción de un átomo con algunos pocos vecinos, puede considerarse como una buena aproximación a una interacción de más largo alcance. A los efectos de comparar los efectos de localidad / no localidad,

elegiremos $\nu = 2$ como rango de las interacciones. Con este valor las interacciones más allá de segundos vecinos se reducen considerablemente.

Otra cuestión que es importante notar de los estudios realizados hasta la fecha, es que no sólo involucran sistemas estáticos, sino condiciones de contorno periódicas en la dirección del flujo. Estas condiciones, en realidad son adecuadas para modelar sistemas de gran tamaño, ya que la periodicidad elimina efectos de bordes o tamaño finito. En este trabajo modelamos sistemas de pocos átomos y condiciones de contorno no periódicas, por lo que los efectos de borde o tamaño finito no son despreciables. Además, como se acaba de mencionar, debido al número acotado de átomos consideraremos interacciones no locales a aquellas que vayan hasta segundos vecinos $x = |i - j| = 2$. Para los tamaños de nuestro sistema, esta suposición implica que cada átomo interactúa con otros en una “celda” de volumen $N_{int}/N_\alpha \approx 2/37 - 2/3$, donde N_α es el tamaño de cada segmento $\alpha = I, II, III$

Las interacciones que están presentes entre partículas de un mismo segmento α pueden ser locales y no locales. Los contactos entre estructuras y con los reservorios se modelarán como interacciones locales, según se esquematiza en la Fig.38.

Los segmentos I y III están acoplados al segmento II con una interacción cuya intensidad varía periódicamente en el tiempo. Definimos las constantes de acoplamiento entre los segmentos $I-II$ y $II-III$ respectivamente como:

$$K_{1,int}(t) = K_{1,int}^0(1 + \epsilon \cos(\omega_0 t)) \quad (132)$$

$$K_{2,int}(t) = K_{2,int}^0(1 + \epsilon \cos(\omega_0 t + \varphi)) \quad (133)$$

Incorporamos un desfase entre ambas modulaciones para modelar la presencia de campos o agentes mecánicos aplicados en distintos puntos del sistema. El hamiltoniano de la interacción puede ser escrito como:

$$H_{int} = \frac{1}{2} K_{1,int}(t)(x_{N_I-1,I} - x_{1,II})^2 + \frac{1}{2} K_{2,int}(t)(x_{N_{II}-1,II} - x_{1,III})^2 \quad (134)$$

El contacto con los reservorios térmicos es descrito por el hamiltoniano

$$H_{contacto} = \frac{1}{2} K_{L_c} (x_{1,L} - x_{1,I})^2 + \frac{1}{2} K_{R_c} (x_{1,R} - x_{N_{III}-1,III})^2 \quad (135)$$

donde los elementos $(1, I)$ y $(N_{III} - 1, III)$ son los átomos del sistema en contacto con el átomo 1 de los reservorios L/R . Por último, el Hamiltoniano de los reservorios se modela a partir de una cadena semi-infinita de átomos:

$$H_\beta = \sum_{i=1}^{N_\beta} \frac{p_{i,\beta}^2}{2m_{i,\beta}} + \frac{1}{2} K_\beta (x_{i,\beta} - x_{i+1,\beta})^2 \quad (136)$$

con $N_\beta \rightarrow \infty (\beta = L, R)$ el número de partículas. Como se mostró en la sección anterior, este Hamiltoniano se puede reescribir en términos de modos normales de vibración (Ec.79).

Como ya discutimos en el capítulo anterior, para estudiar la corriente de calor que fluye entre el sistema y los reservorios, consideramos que la potencia total inyectada por todas las fuentes externas o agentes mecánicos es disipada hacia los reservorios a una tasa dada por $P_{total} = J_L + J_R$, donde J_L y J_R son las corrientes media de calor hacia/desde los reservorios L, R respectivamente definidas en la Ec.124, recordando que la corriente es definida positivo cuando el calor entra al reservorio.

Efectos del driving en el transporte de calor

Como ya mencionamos, se requiere un trabajo neto para bombear calor desde un reservorio a otro. En nuestro sistema, el trabajo se realiza sobre los átomos en los contactos que están sometidos a las perturbaciones dependientes del tiempo.

Cuando el driving está ausente en el sistema, es decir, cuando la intensidad de la interacción entre segmentos toma valores constantes, la función transmisión

está dada por la Ec.127. En la Fig.40 se grafica la función transmisión local y no local, para los casos con y sin potencial de sitio. Cuando el sistema está débil-

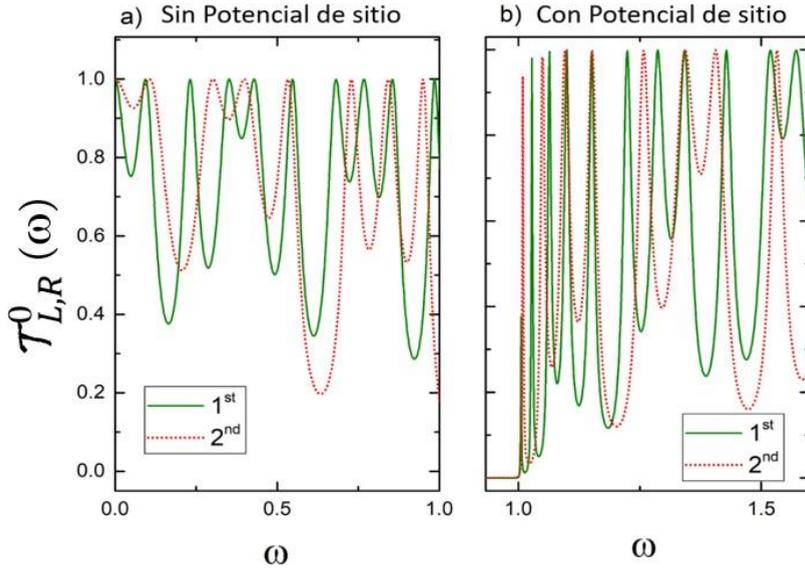


Figura 40: La función transmisión $T_{L,R}^0(\omega)$ definida en Ec.127 para el sistema no dependiente del tiempo: a) sin potencial de sitio, b) con potencial de sitio. Las curvas verdes (llenas) y rojas (punteadas) corresponden al caso con interacciones a primeros y segundos vecinos respectivamente.

mente acoplado a los reservorios, los picos correspondientes a las frecuencias de resonancia del sistema aislado son prácticamente coincidentes con los del sistema acoplado. Cuando el acoplamiento se vuelve más intenso, los picos comienzan a ensancharse sufriendo corrimientos debido a las energías propias de los reservorios. Por lo tanto, las oscilaciones observadas se deben a la interferencia entre los modos de resonancia del sistema y los modos de los reservorios. Los modos propios del sistema filtran y seleccionan los modos entrantes desde los contactos, afectando la función de transmisión cuyos picos sufren corrimientos dependiendo del rango de

las interacciones. Este es el caso que analizaremos, en donde estamos considerando un acoplamiento fuerte entre el sistema y los reservorios.

En estas figuras se observa que $T_{L,R}^0(\omega)$ depende tanto del potencial de sitio como del grado de localidad. Cuando los átomos no interactúan con el potencial de sitio (Fig.40-a), el espectro presenta modos de baja frecuencia, más deslocalizados. Son modos que tienen caminos libres medios mayores que el tamaño del sistema, pero que eventualmente podrán sufrir procesos de scattering debido a los contactos entre diferentes partes del sistema. Sin embargo, cuando de potencial de sitio está presente (sustrato) las partículas se encuentran confinadas cerca de los mínimos de potencial. El espectro vibracional presenta un gap desde una frecuencia $\omega = 0$ hasta $\omega = 1$ en Fig.40 b), y por lo tanto los modos de más baja frecuencia (que son los más deslocalizados) desaparecen del espectro. El modo balístico (modo cero), totalmente deslocalizado desaparece. Al incorporar interacciones no locales el gap persiste, pero $T_{L,R}^0(\omega)$ toma valores mayores. Por otra parte, los modos más localizados son los que presentan mayores desplazamientos y diferencias entre el caso local y no local. Esto ocurre porque la localización de modos se ve afectada por las interacciones entre átomos más alejados. A futuro será interesante explorar qué ocurre con el comportamiento de la función transmisión y el gap correspondiente, en el límite de $\nu \rightarrow 0$ (campo medio), lo que requerirá trabajar con sistemas de mucho mayor tamaño.

Es interesante entender qué sucede cuando el sistema es perturbado temporalmente. Para ello analizamos el efecto que tiene la modulación temporal de los contactos que unen las cadenas centrales cuando hay interacciones no locales entre átomos de un mismo segmento. En otras palabras, cuando la potencia inyectada en cada contacto, se transfiere al sistema en forma no local. Comenzamos nuestro estudio sobre el rol del desfase φ entre las modulaciones temporales de las intensidades de los acoplamientos. La Fig.41 presenta la corriente de calor J_L , que

fluye desde/hacia el reservorio izquierdo (elegido de manera arbitraria) versus φ . El análisis se realiza para distintos valores de ω_0 , para interacciones a 1º y 2º vecinos respectivamente (locales y no locales), y para diferentes tamaños del sistema.

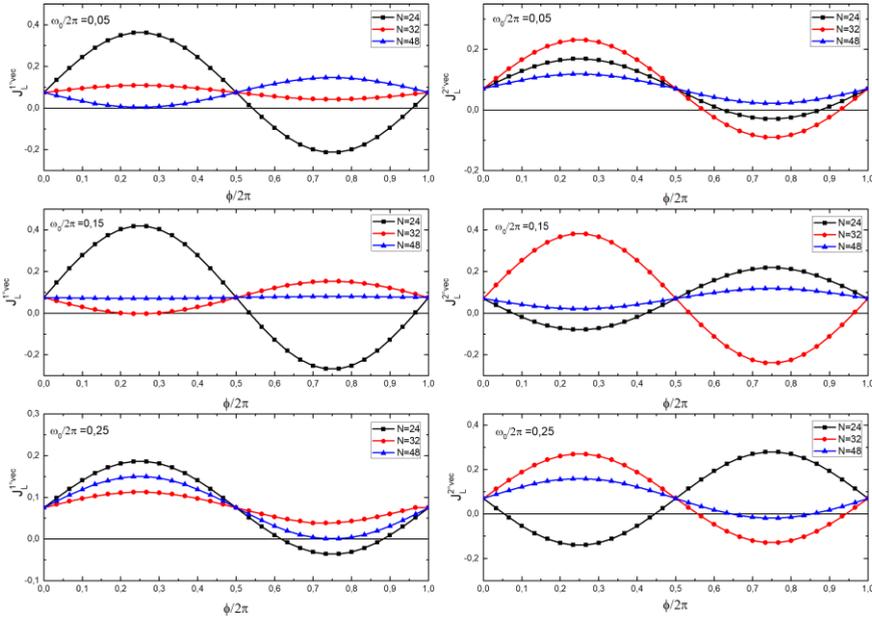


Figura 41: J_L vs $\varphi/2\pi$, cuando están presentes interacciones locales a 1º vecinos (columna izquierda) e interacciones no locales a 2º vecinos (columna derecha), para $\omega_0/2\pi = 0.05, 0.15; 0.25$ $T_L = 1.0$ y $T_R = 1.1$.

Como puede observarse en la Fig.41 la corriente depende no monótonicamente del desfase. A primeros vecinos (columna izquierda), existen diferentes combinaciones de valores de $\omega_0/2\pi$ y de $\varphi/2\pi$ donde, dependiendo del largo del sistema, no hay flujo de calor hacia el reservorio L cuando las interacciones son sólo locales, haciendo que una parte del sistema se comporte como aislante térmico. El valor de la fase φ para el cual $J_L = 0$ cambia al incorporar interacciones no locales. A

continuación se comentan algunas situaciones interesantes que se encuentran:

Para $N = 32$ (curva roja), $J_L = 0$ a primeros vecinos sólo cuando $\omega_0/2\pi = 0.15$. Sin embargo, al incorporar no localidad esta situación aparecen nuevos valores de φ para los cuales no hay flujo térmico.

$N = 24$ (curva negra) nos presenta otro escenario posible dependiendo del grado de localidad. Encontramos que a primeros vecinos, no sólo existen distintos valores de $\varphi/2\pi$ para los cuales el segmento se comporta como aislante, sino que la no localidad produce una inversión de corriente, es decir un cambio en la dirección del flujo.

Por último, el caso $N = 48$ (curva azul) nos presenta una situación interesante en la que las interacciones locales producen una corriente igual a la del caso estático para todo valor de φ . Esto significa que independientemente del desfase entre los contactos, la potencia media entregada es nula. Esta situación se rompe al introducir no localidad. Todos los perfiles de corriente observados en la Fig.41 ocurren en torno a un valor medio de J_L correspondiente a la corriente *DC* del sistema estático. Analizando J_R se observan comportamientos análogos, lo que indica que tanto la frecuencia como el desfase entre ambas fuentes de no equilibrio tienen un efecto substancial sobre la corriente de calor disipada hacia ambos reservorios.

Como ya se mencionó en la introducción de este capítulo, la presencia de interacciones no locales en sistemas no homogéneos estáticos aumenta la asimetría del sistema, lo cual implica incrementar la rectificación térmica. Aún en el caso de sistemas homogéneos, puede haber una rectificación magnificada por las interacciones de largo alcance debido a la presencia de los contactos. Nuestros resultados muestran que la presencia de interacciones no locales sumada a una perturbación temporal afecta la rectificación térmica, donde la frecuencia y la fase, son los parámetros que pueden ser ajustados para producir una rotura de simetría de origen

dinámico que afecte la rectificación.

Definimos la rectificación térmica $R_{\alpha,j}$ que se produce en el segmento α a j vecinos como

$$R_{\alpha,j} = \frac{|J_{\alpha,j}^- + J_{\alpha,j}^+|}{\max |J_{\alpha,j}^-|; |J_{\alpha,j}^+|} \quad (137)$$

donde los superíndices “+” y “-”, representan la dirección del gradiente térmico. El símbolo “+”, significa $\Delta T > 0$ y “-”, significa $\Delta T < 0$. Siendo $\Delta T = T_R - T_L$. Dicho estudio se realizó en una primera instancia con interacción local ($j = 1$), incorporando luego interacciones no locales a segundos vecinos ($j = 2$). En la Fig.42, se muestran los resultados obtenidos para el segmento l de la cadena central para distintos valores de ω_0 y N . La elección del segmento fue arbitraria ya que se encontraron comportamientos similares para el segmento lll .

Lo primero que se observa es que hay rectificación térmica para todo $\varphi/2\pi$ excepto para $\varphi/2\pi = 0.0, 0.5$ y 1.0 . Para estos tres valores $R_{l,j} = 0$, para todo N e independientemente del valor de ω_0 . Es decir que en estos tres casos el sistema no presenta una dirección privilegiada del flujo de calor, tal como ocurre en sistemas simétricos. Por otra parte $R_{l,j}$ no es simétrico respecto de $\varphi = \pi$.

Es interesante analizar qué ocurre cuando el valor del acoplamiento entre segmentos toma valores constantes, es decir, en el límite estático cuando $\omega_0/2\pi = 0$ (ver Ec.132 y Ec.133). En la Fig.43 se grafica J_L versus $\varphi/2\pi$ cuando no hay modulación temporal, tanto para interacción local como no local.

Se observa que la corriente J_L no depende de la fase y que presenta el mismo valor (en módulo) para un dado ΔT y el correspondiente $-\Delta T$. En otras palabras el sistema no rectifica, aún en presencia de una fase que hace que el valor de la constante de acoplamiento entre segmentos, ahora estática, sea distinta. Es decir, el caso estático que presenta una asimetría L/R espacial no rectifica. El sistema rectifica sólo cuando está presente la modulación temporal, lo que evidencia la importancia de la sinergia entre la fase y la frecuencia para producir la rotura de

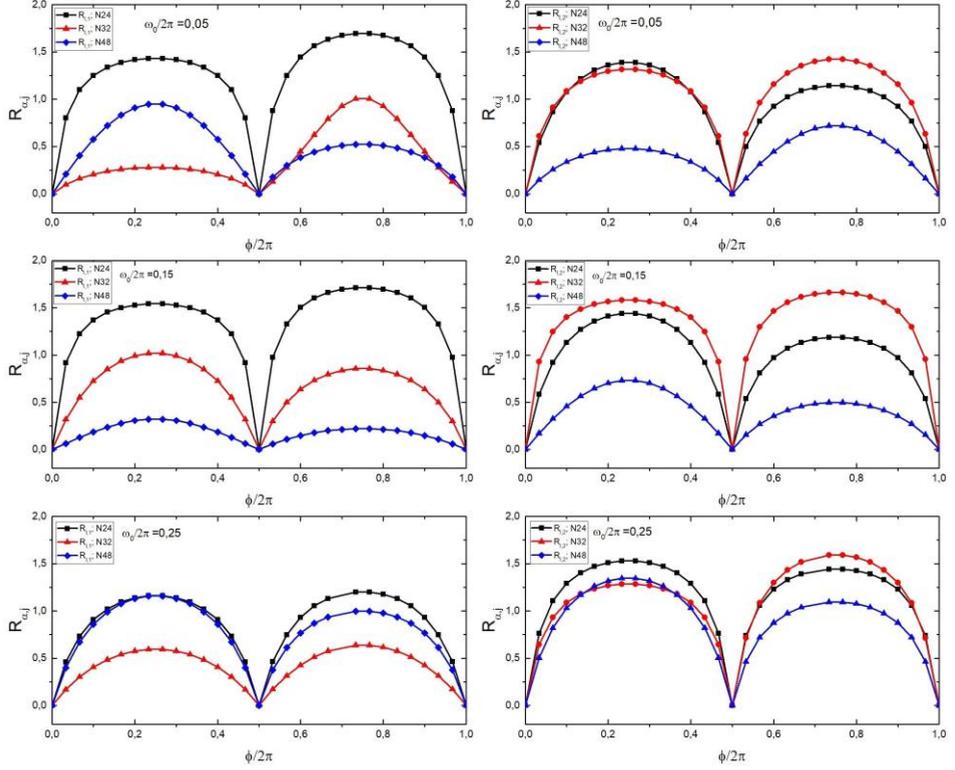


Figura 42: Rectificación $R_{\alpha,1}$ y $R_{\alpha,2}$ vs $\varphi/2\pi$, con $\alpha = I$ y $\omega_0/2\pi = 0.05, 0.15, 0.25$. $|\Delta T| = 0.1$ Siendo $\Delta T = T_R - T_L$. $K_I = 1.0, K_{II} = 2.0, K_{III} = 1.0, \nu = 2, K^0_I = K^0_{II} = K^0_{III} = 0.1, K^0_{1,int} = 2.0, K^0_{2,int} = 2.0, K_{L_c} = 1.0, K_{R_c} = 1.0, K_L = 4.5, K_R = 4.5$.

simetría L/R que posibilite el funcionamiento del sistema como un diodo térmico dinámico.

Además la Fig.43 muestra que los valores de J_L convergen a medida que N crece, tanto para el caso local como no local. Para tener una mejor comprensión de la distribución espectral de canales fonónicos involucrados en estos comportamientos, calculamos la matriz de transferencia dinámica de calor [129], enfocándonos en los elementos fuera de la diagonal. Estos dan cuenta de la transmisión a lo largo

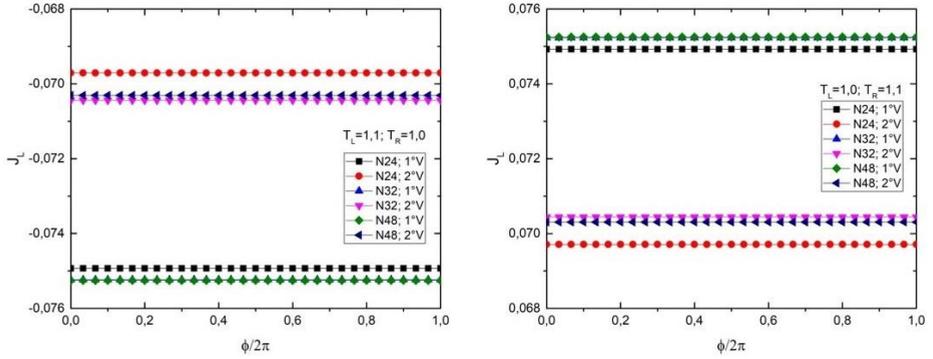


Figura 43: J_β vs $\phi/2\pi$ con $\beta = L$. $\omega_0/2\pi = 0.0$. Panel izquierdo: $T_L = 1.1; T_R = 1.0$. Panel derecho: $T_L = 1.0; T_R = 1.1$. El resto de los parámetros son los mismos que los de la Fig.42.

de todo el sistema, entre los reservorios L y R :

$$T_{\beta,\beta'}(\omega, \omega_0) = \sum_{k=-1}^{\pm 1} T_{\beta,\beta'}^k(\omega, \omega_0) \quad (138)$$

donde $T_{\beta,\beta'}^k(\omega, \omega_0)$ son los k -ésimos términos de dicha matriz de transferencia dados por Ec.125. β y β' hacen referencia a alguno de los reservorios L o R .

Cuando $k = 0$ (orden cero), la expresión se reduce a la matriz de transferencia estática dada en la Ec.127. Las componentes $k \neq 0$ son las contribuciones debidas a la perturbación temporal, que en en nuestro caso sólo contempla dos componentes: $k = \pm 1$. En la Fig.44 graficamos los elementos no diagonales $T_{\beta,\beta'}(\omega, \omega_0)$ (Ec.138), para dos juegos de parámetros previamente analizados: $\phi/2\pi = 0.8, 0.15$ y $\omega_0/2\pi = 0.25$ con $N = 24$ y que corresponden a dos situaciones en donde el sistema rectifica la corriente (ver Fig.42).

En cada uno de los recuadros se representan las matrices de transmisión desde el reservorio L hacia el R ($T_{L,R}(\omega, \omega_0)$) y desde el reservorio R al L ($T_{R,L}(\omega, \omega_0)$), tanto para el caso local (indicado como $T_{\beta,\beta'}^{(1)}(\omega, \omega_0)$ en la figura) y no local (indi-

cado por $T_{\beta, \beta'}^{(2)}(\omega, \omega_0)$.

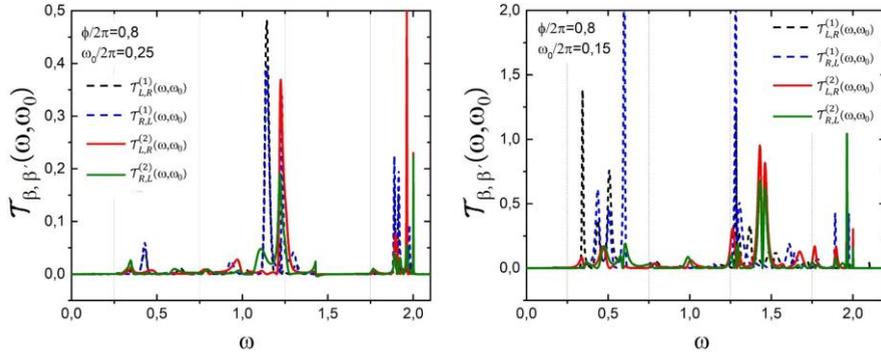


Figura 44: Elementos no diagonales de la matriz de transmisión dinámica a primeros vecinos $T_{\beta, \beta'}^{(1)}(\omega)$ y para el caso no local $T_{\beta, \beta'}^{(2)}(\omega)$ definida en Ec.138. Los paneles corresponden a: $\omega_0/2\pi = 0.25$, $\varphi/2\pi = 0.8$ (izquierda), y $\omega_0/2\pi = 0.15$, $\varphi/2\pi = 0.8$ (derecha). En todos los casos $N = 24$.

El panel izquierdo de la Fig.44, muestra picos en la zona de bajas y altas frecuencias. Cuando la interacción es local hay una buena coincidencia en la posición e intensidad de los picos RL y LR $T_{R,L}^{(1)}(\omega, \omega_0)$ y $T_{L,R}^{(1)}(\omega, \omega_0)$, lo que no ocurre para el caso no local. Esta asimetría es lo que explica la mayor rectificación cuando las interacciones son no locales observada en la Fig.42.

En el panel derecho de la Fig.44, también se encuentran picos en la zona de bajas y altas frecuencias. Pero al contrario del caso anterior, cuando la interacción es local no hay una buena coincidencia en la posición e intensidad de los picos RL y LR , especialmente en las bajas frecuencias (modos más extendidos) donde $T_{\beta, \beta'}^{(1)}(\omega)$ toma valores considerables en relación al caso no local. La asimetría, más notoria en el caso local, es lo que subyace en la mayor rectificación observada en la Fig.42.

Como ya mencionamos anteriormente, el desfase φ es un parámetro muy significativo a la hora de poder controlar el flujo de calor. De hecho, $\varphi = 0$ no

permite rectificación ni para el caso local ni no local, independientemente del valor de ω_b (ver Fig.42). En la Fig.45 graficamos los elementos $T_{\beta,\beta'}^{k=\pm 1}(\omega, \omega_b) = T_{\beta,\beta'}^{\pm}(\omega)$ (Ec.125) que contribuyen a matriz de transferencia dinámica (Ec.138). Las funciones corresponden al caso de ausencia de fase ($\varphi = 0$), un dado valor de ω_0 e interacciones tanto locales como no locales (panel superior (I) e inferior (II) respectivamente). Encontramos que los elementos $T_{\beta,\beta'}^+(\omega)$ y $T_{\beta,\beta'}^-(\omega)$ son idénticos si la oscilación del acoplamiento entre segmentos de la estructura se produce en fase. La fase, produce por un lado una rotura dinámica de simetría, además de que permite que se produzca una respuesta diferenciada en función de ω_0 , tanto para el caso de interacciones locales como no locales.

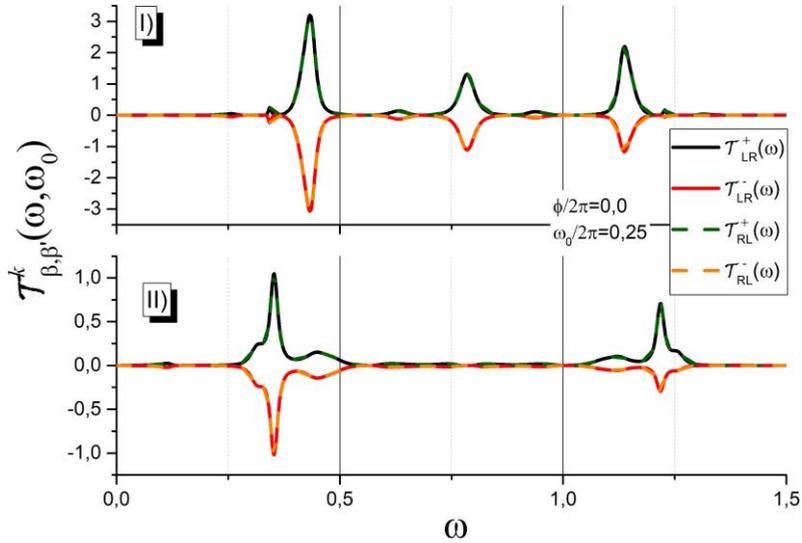


Figura 45: Términos $T_{\beta,\beta'}^{k=\pm 1}(\omega)$ de la matriz de transmisión dinámica $T_{\beta,\beta'}(\omega, \omega_0)$ (Ec.138). El panel superior I) contempla solo a interacciones a primeros vecinos mientras que II) contempla además interacciones a segundos vecinos. $\varphi/2\pi = 0.0$; $N = 24$, $\omega_0/2\pi = 0.25$.

Claramente los canales fonónicos habilitados (frecuencias) en la matriz de transmisión dependen del número de átomos de la estructura. Para analizar la dependencia con el tamaño del sistema, en la Fig.46 graficamos el coeficiente de rectificación térmica definido en Ec.137, en función de N para una dada diferencia de temperatura entre los reservorios. El estudio lo realizamos eligiendo un conjunto de valores de ω_0 y de φ tal que haya una buena rectificación tanto para el caso local como no local.

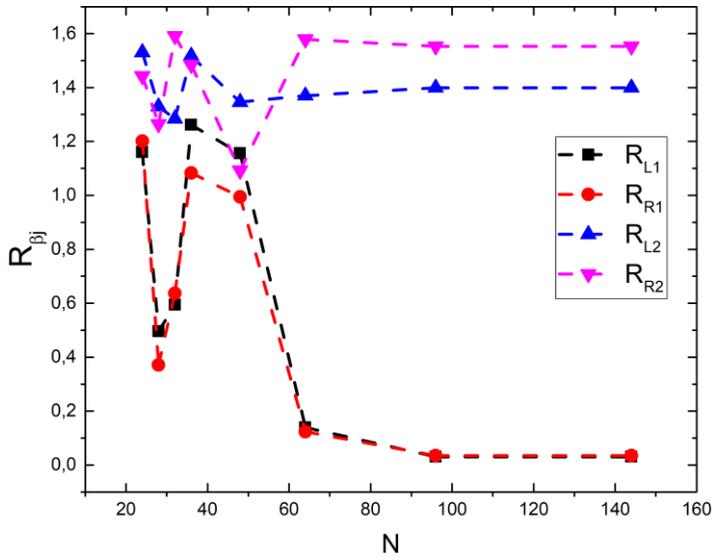


Figura 46: Rectificación R_{β_j} vs N , para $\omega_0/2\pi = 0.25$ y $\varphi/2\pi = 0.23$, $|\Delta T| = 0.1$. Siendo $\Delta T = T_R - T_L$. $K_I = 1.0$, $K_{II} = 2.0$, $K_{III} = 1.0$, $K_I^0 = K_{II}^0 = K_{III}^0 = 0.1$, $K_{1,int}^0 = 2.0$, $K_{2,int}^0 = 2.0$, $K_{L_c} = 1.0$, $K_{R_c} = 1.0$, $K_L = 4.5$, $K_R = 4.5$

Se observa que cuando las interacciones son locales, a medida que aumenta el tamaño del sistema, el efecto de rectificación desaparece, análogamente a lo que se observa en situaciones estáticas. Es decir, R_{β_1} tiende a cero al aumentar N . Sin embargo, es llamativo que cuando están presentes las interacciones no locales, R_{β_2} converge a un valor no nulo. La no localidad produce una asimetría en el

flujo de calor que se mantiene aún para cadenas largas y que se observa siempre y cuando φ y ω_0 sean no nulos.

Regímenes de transporte en función del gradiente de temperatura

La Ec.124 evidencia que el valor de la corriente depende no sólo de la frecuencia y la fase, sino también de las temperaturas de los reservorios las que determinan el nivel de ocupación de sus estados de energía.

En el capítulo anterior se mostró que un sistema perturbado temporalmente con interacciones a primeros vecinos, presenta distintos regímenes de transporte dependiendo del valor de la diferencia de temperatura $\Delta T = T_R - T_L$ entre reservorios. Con el objeto de realizar un estudio comparativo entre el caso local y no local, en la Fig.47 se grafica la corriente de calor como función de la diferencia de temperatura ΔT , tomando una temperatura de referencia a T_R elegida en forma arbitraria. Se seleccionaron para este estudio valores de ω_0 y φ discutidos previamente. Se discute el caso de una cadena corta ($N = 24$) para magnificar el rol de la no localidad. Las curvas negras (J_L) representan la corriente de calor que fluye hacia/desde el reservorio de la izquierda, y las curvas rojas (J_R) representan la corriente de calor que fluye hacia/desde el reservorio de la derecha. Se observa que para los diferentes valores de ω_0 y φ , las corrientes en ambos segmentos (L,R) dependen linealmente de ΔT , tanto a primeros como a segundos vecinos. Es interesante observar que, a diferencia de lo que ocurre en un sistema estático, cuando $\Delta T = 0$ existe una corriente no nula en ambos segmentos debido a la potencia inyectada en la región de los contactos y disipada hacia los reservorios. Para $\Delta T \neq 0$, las corrientes en los segmentos L y R son distintas (en valor absoluto) debido a la potencia inyectada. Más aún, el sistema rectifica el flujo de calor ya

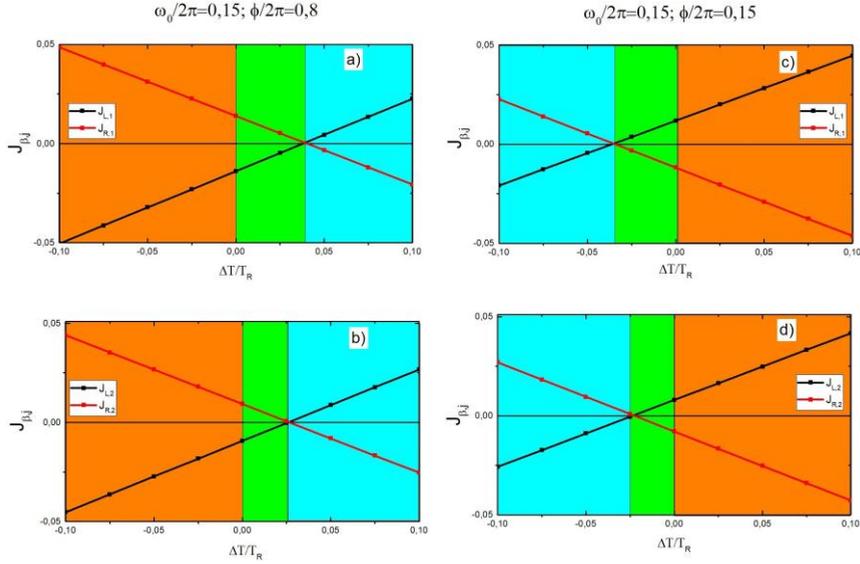


Figura 47: J vs $\Delta T/T_R$ con $\Delta T = (T_R - T_L)$ y $T_R = 0.1$; para $N = 24$. Las columnas corresponden (de izquierda a derecha) : $\frac{\omega_0}{2\pi} = 0.15, 0.15$ y $\frac{\psi}{2\pi} = 0.8, 0.15$ respectivamente. Paneles superiores a), c) corresponden a interacciones locales, mientras que los inferiores b) y d) incluyen además interacciones no locales. Las curvas corresponden a J_L (negro), J_R (rojo). Las constantes de acoplamiento son: $K_I = 1.0, K_{II} = 2.0, K_{III} = 1.0, K_I^0 = K_{II}^0 = K_{III}^0 = 0.1, K_{1,int}^0 = 2.0, K_{2,int}^0 = 2.0, K_{L_c} = 1.0, K_{R_c} = 1.0, K_L = 4.5, K_R = 4.5$.

que $|J_{L,R}(\Delta T)| = |J_{L,R}(-\Delta T)|$.

Las regiones coloreadas demarcan regímenes cuyo origen se debe fundamentalmente a la presencia de la perturbación temporal, y por lo tanto no se encuentran en una situación estática. Las regiones con sombreado en color naranja y celeste, demarcan el rango de ΔT donde J fluye desde el reservorio de mayor al de menor temperatura. Estas situaciones corresponden a los esquemas I y III de la Fig.48. Las regiones anaranjadas corresponden al esquema I, donde se extrae trabajo del sistema. En este régimen el sistema opera como una máquina térmica. Las regiones celestes corresponden al esquema III, hay corriente de energía a favor del

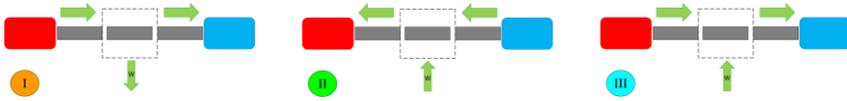


Figura 48: Diagramas de los diferentes circuitos de flujo de calor-trabajo correspondiente a los regímenes de transporte indicados en Fig.47.

gradiente térmico y con una inyección de energía al sistema. Las regiones coloreadas en verde, demarcan el rango de $\Delta T/T_R$ donde las corrientes J_L y J_R son tales que el flujo de calor se produce en contra del gradiente de temperatura. Esta situación corresponde al esquema II de la Fig.48. La fila superior de la Fig.47 (caso local) corrobora que el tipo y rango de los diferentes regímenes dependerán del valor de $\frac{\omega_0}{2\pi}$ y $\frac{\varphi}{2\pi}$. Por otra parte, los gráficos en la fila inferior, muestran que el hecho de incorporar interacciones no locales (Fig.47 b) y d)), produce cambios en los rangos de ΔT en donde se produce refrigeración. Por ejemplo, en el gráfico a), a primeros vecinos, la corriente en contra del gradiente térmico ocurre para $0.0 < \Delta T/T_R < 0.04$. Al incorporar interacciones no locales (Fig.47 c)), dicha región se reduce a $0.0 < \Delta T/T_R < 0.025$. Es importante destacar que independientemente del tipo de interacción, existen determinados valores de ΔT donde la corriente se hace nula, no habiendo transferencia de calor entre reservorios, aún en presencia de gradiente térmico. El sistema se comporta esencialmente como aislante térmico asistido por el trabajo realizado por el agente externo en cada contacto, cuya suma resulta en una potencia media nula.

El dispositivo presenta la capacidad de refrigerar, régimen representado en el esquema II de la Fig.48. Para caracterizar la performance de enfriamiento, utilizamos el coeficiente de performance de refrigeración CP definido en la Ec.128. En la Fig.50 se grafica CP como función de la diferencia de temperatura entre los reservorios para una cadena con $N = 24$, considerando interacciones locales y no locales. Se han elegido valores de $\frac{\omega_0}{2\pi} = 0.05, 0.15$ y $\frac{\varphi}{2\pi} = 0.15, 0.8$, para los que ya

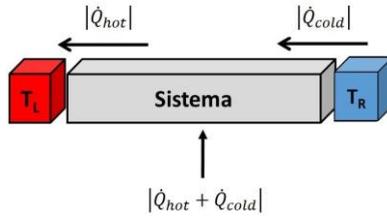


Figura 49: Diagrama del refrigerador térmico.

hemos discutido previamente diferentes aspectos del transporte.

En dicha figura se puede observar que CP decrece con $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ tanto para el caso local como no local y para todos los sets de parámetros considerados. Cuando $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ crece, CP disminuye hasta un valor mínimo que corresponde al $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ máximo para el cual el sistema actúa como refrigerador. Además presenta un rango de variación que depende fundamentalmente de $\omega_0/2\pi$ y $\varphi/2\pi$, y que puede alcanzar a varios órdenes de magnitud. Por ejemplo, en la Fig.50, se observa que para $\omega_0/2\pi = 0.05$ barre aproximadamente tres órdenes de magnitud, mientras que para $\omega_0/2\pi = 0.15$ aproximadamente dos órdenes.

Por otro lado, encontramos que CP depende del grado de localidad. A medida que aumenta $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ la diferencia entre el caso local y no local se incrementa pudiendo tomar valores considerables. Un ejemplo claro es $\omega_0/2\pi = 0.15$, para el cual esta diferencia llega a ser de casi un orden de magnitud. Por otra parte, las curvas correspondientes a una misma frecuencia y grado de localidad pero con diferente fase también pueden presentar diferencias, cuando $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ aumenta. El caso $\omega_0/2\pi = 0.05$ es un claro ejemplo. Los resultados presentados en el análisis previo corresponden a una temperatura de referencia $T_H = 0.1$. Sin embargo, para chequear generalidad el análisis se repitió para otros valores de T_H . Estos resultados, que aquí no se presentan, mostraron comportamientos cualitativamente similares. La Fig.50 muestra además que para cierto rango de $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ (que dependerá de cada conjunto de parámetros), CP se puede aproximar por una función que obedece

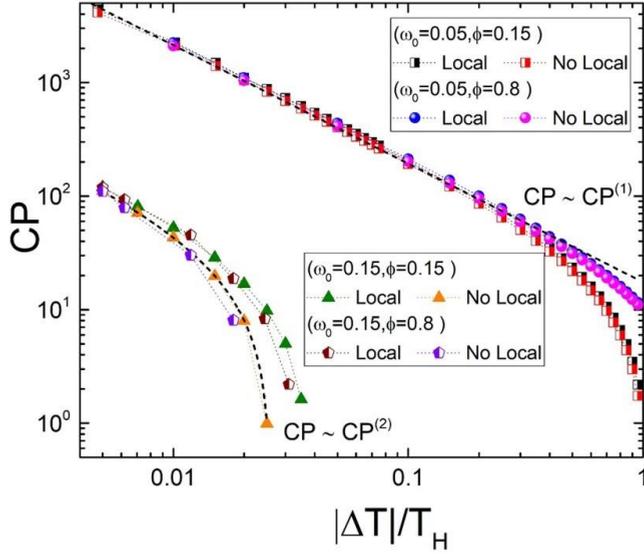


Figura 50: Coeficiente de performance de enfriamiento CP vs $\frac{|\Delta T|}{T_H}$ con $|\Delta T| = |T - T_H|$ y $T_H = 0.1$, para el caso de interacción local y no local con $N = 24$. En nuestro caso H corresponde al reservorio R, a), b) y c) y d) corresponden respectivamente a los siguientes pares de parámetros $(\frac{\omega_0}{2\pi}, \frac{\phi}{2\pi}) = (0.05; 0.15), (0.05; 0.8), (0.15; 0.15), (0.15; 0.8)$.

una ley de potencias: $CP \propto \frac{|\Delta T|}{T_H}^{-\alpha}$, con α un exponente característico que dependerá fundamentalmente de la frecuencia y la fase. Más allá de este rango, CP presenta una dependencia con $|\Delta T|/T_H$ que no responde a una ley de potencias. En la próxima sección se analizarán estos comportamientos, a partir de una aproximación en el límite de baja frecuencias, con el objeto de comprender la fenomenología subyacente.

Expansión de la corriente de calor para bajas frecuencias ω_0

Para comprender los mecanismos detrás de los regímenes encontrados nos centraremos el límite adiabático, con el fin de obtener aproximaciones analíticas,

desarrollamos la corriente J_β , definida en la Ec.124, hasta segundo orden en ω_0 . En un régimen de bajas frecuencias, podemos hacer las siguientes aproximaciones (recordar que hemos definido $\eta_\beta(\omega) = \eta(\omega, T_\beta)$):

$$\Gamma_L(\omega + k\omega_0) \div \Gamma_L(\omega) + k\omega_0 \frac{d\Gamma_L(\omega)}{d\omega}, \quad (139)$$

$$\eta_L(\omega + k\omega_0) \div \eta_L(\omega) + \frac{\partial \eta_L(\omega)}{\partial \omega} k\omega_0. \quad (140)$$

Además, podemos aproximar la diferencia entre las distribuciones de Bose-Einstein de cada reservorio como:

$$\eta_R(\omega) - \eta_L(\omega + k\omega_0) \div \frac{\partial \eta_L}{\partial T} \Delta T - \frac{\partial \eta_L(\omega)}{\partial \omega} k\omega_0 \quad (141)$$

Luego, utilizando que

$$\partial_T \eta_L(\omega) = -\frac{\omega}{T} \partial_\omega \eta_L(\omega),$$

la Ec.141 se puede reescribir como

$$\eta_R(\omega) - \eta_L(\omega + k\omega_0) \approx \frac{\partial \eta_L(\omega)}{\partial \omega} - \frac{\omega}{T_L} \Delta T - k\omega_0. \quad (142)$$

A partir de estos desarrollos, podemos expresar la corriente de calor J_β en forma aproximada como

$$J_\beta \approx \sum_{\beta'=R,L} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} (\omega + k\omega_0) \left[\frac{\partial \eta_{\beta'}}{\partial \omega} - \frac{\omega}{T_{\beta'}} \Delta T - k\omega_0 - \Gamma_{\beta'}(\omega) \right] \times \\ \times \Gamma_\beta(\omega) + k\omega_0 \frac{d\Gamma_\beta(\omega)}{d\omega} |G_{f_{\alpha,\alpha'}}(k, \omega)|^2, \quad (143)$$

donde $G_f(k, \omega)$ es la transformada de Fourier de la función de Green *congelada* (el subíndice f hace referencia a *frozen*), ver apéndice II.

$$\hat{G}_f(t, \omega) = \hat{G}^{(0)}(\omega)^{-1} - \hat{F}^{(1)}(t) \hat{G}^{(0)}(\omega)^{-1}, \quad (144)$$

donde $F^{(1)}(t)$ es la componente de la matriz de fuerza que da cuenta de la perturbación temporal. Esta función de Green congelada se obtiene de considerar la ecuación de Dyson (Ec.115) en el límite de bajas frecuencias, donde se puede obtener una solución exacta hasta orden ω_0 expandiendo dicha ecuación como

$$\hat{G}(t, \omega) \sim \hat{G}^{(0)}(\omega) + \hat{G}(t, \omega) \hat{F}^{(1)}(t) \hat{G}^{(0)}(\omega) + i \partial_\omega \hat{G}(t, \omega) \frac{d\hat{F}^{(1)}(t)}{dt} \hat{G}^{(0)}(\omega). \quad (145)$$

Luego, considerando la definición dada en la Ec.144, la solución exacta de la ecuación de Dyson a orden ω_0 es

$$\hat{G}^{(1)}(t, \omega) = \hat{G}_f(t, \omega) + i \partial_\omega \hat{G}_f(t, \omega) \frac{d\hat{F}^{(1)}(t)}{dt} \hat{G}^{(0)}(\omega). \quad (146)$$

Así, la función de Green congelada describe el régimen en el que un fonón ω se ajusta instantáneamente a la excitación AC externa [29]. Desarrollando la Ec.143 en términos del orden ω_0^0 , ω_0^1 y orden dos ω_0^2 y descartando los términos de orden superior $o(\omega_0^3)$, la corriente J_θ se puede aproximar por:

$$J_\theta \approx J_\theta^{(0)} + J_\theta^{(1)} + J_\theta^{(2)}, \quad (147)$$

donde $J_\theta^{(0)}$ es la componente a orden cero, y corresponde a la contribución puramente térmica debida al gradiente de temperatura (Landauer).

$$J_\theta^{(0)} \approx \sum_{\theta'} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[-\frac{dn_\theta}{d\omega} \frac{\omega^2 \Delta T}{T_\theta} \Gamma_{\theta'}(\omega) \Gamma_\theta(\omega) |G_{f_{\theta\alpha}, \theta\alpha'}(0, \omega)|^2 \right]. \quad (148)$$

El segundo término de la Ec.147, corresponde a la contribución a primer orden en ω_0 y se escribe de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 J_{\beta}^{(1)} \approx & \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} - \frac{d\eta_{\beta}}{d\omega} \frac{\Delta T}{T_{\beta}} \omega k \omega \Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta}(\omega) |G_{f_{l\alpha, l\alpha'}}(k, \omega)|^2 + \\
 & + \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} + \frac{d\eta_{\beta}}{d\omega} k \omega \omega \Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta}(\omega) |G_{f_{l\alpha, l\alpha'}}(k, \omega)|^2 + \quad (149) \\
 & + \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} - \frac{d\eta_{\beta}}{d\omega} \omega^2 \frac{\Delta T}{T_{\beta}} \Gamma_{\beta}(\omega) k \omega \frac{d\Gamma_{\beta}}{d\omega} |G_{f_{l\alpha, l\alpha'}}(k, \omega)|^2.
 \end{aligned}$$

Esta contribución consta de tres términos

- el segundo término lo denominamos J_{β}^P , y es una contribución *puramente* inducida por la perturbación periódica, siendo el responsable del mecanismo de enfriamiento, es decir de los procesos de intercambio de energía $k\omega \Leftrightarrow k(\omega \pm \omega_0)$.
- el primer y tercer término es una componente mixta que denominamos $J_{\beta}^{T h-P}$. Esta da cuenta del proceso de interferencia entre el gradiente de temperatura y el mecanismo de enfriamiento.

Por lo tanto, $J_{\beta}^{(1)}$ puede ser escrita de la siguiente manera

$$J_{\beta}^{(1)} \approx J_{\beta}^P + J_{\beta}^{Th-P}.$$

Los fonones dispersados por el sistema central, en general, son portadores fuera del equilibrio. Si $a_{\beta}(\omega)$ y $b_{\beta}(\omega)$ son operadores para los fonones que entran al sistema desde el reservorio, y $a_{\beta}^{\dagger}(\omega)$ y $b_{\beta}^{\dagger}(\omega)$ son operadores para los fonones que entran al reservorio desde el sistema por el contacto β . Las distribuciones de los fonones son $\langle a_{\beta}^{\dagger}(\omega) a_{\beta}(\omega) \rangle$ y $\langle b_{\beta}^{\dagger}(\omega) b_{\beta}(\omega) \rangle$ respectivamente. Como los reservorios se asumen en equilibrio termodinámico, la función distribución de los fonones que entran al sistema es $\eta_{\beta}(\omega)$.

Para calcular la distribución de fonones dispersados, se expresan los operadores b en función de los a como $b_{\beta}(\omega) = \sum_{\beta'=L,R} S_{\beta,\beta'}(\omega) a_{\beta'}(\omega)$, siendo $S_{\beta,\beta'}$ las amplitudes de dispersión o elementos de la matriz de scattering $\hat{S}(\omega)$. Cuando se aplican perturbaciones externas periódicas en el tiempo, el fonón puede ganar o perder una energía $\hbar\omega_0$ al interactuar con la cadena central, por lo que la matriz de scattering va a depender también de las frecuencias de los fonones de entrada y salida. A esta matriz $\hat{S}_{\beta,\beta'}(\omega, \omega + \hbar\omega_0)$ se la conoce como matriz de scattering, por lo que la relación de operadores queda como $b_{\beta}(\omega + \hbar\omega_0) = \sum_{\beta'=L,R} S_{\beta,\beta'}(\omega, \omega + \hbar\omega_0) a_{\beta'}(\omega)$, y permite expresar la relación entre la función de Green, en este caso la *congelada*, y la matriz de scattering, *congelada* [175,176]

$$S_{\beta\beta'}^f(k, \omega) = \delta_{\beta\beta'} \delta_{k,0} - i \frac{\mathbf{q}}{\Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta'}(\omega)} G_{f_{\alpha,\alpha'}}(k, \omega). \quad (150)$$

relación que se verifica si se aplica la relación de Birman-Krein $d \ln [\det \hat{S}^f] = Tr[\hat{S}^f d\hat{S}^{f\dagger}]$ a la matriz *congelada* que es unitaria (y donde $\det(\hat{Z})$ y $Tr(\hat{Z})$ denotan respectivamente el determinante y la traza de una matriz \hat{Z}). En esta tesis no se utiliza el formalismo de la matriz de scattering que considera al sistema central como un dispersor de fonones. Sin embargo presentamos esta ecuación que permite pasar del enfoque con matriz de scattering al de funciones de Green y viceversa, permitiendo expresar propiedades que son más fácilmente obtenibles en uno de los enfoques para luego relacionarlo con el otro. De esta forma, J_{β}^P puede escribirse como:

$$J_{\beta}^P = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega - \frac{\partial \eta_{\beta}(\omega)}{\partial \omega} \text{Im} \int S^f(t, \omega) \partial_t S^{f\dagger}(t, \omega) dt. \quad (151)$$

En Refs. [173,174,176] se muestra en detalle que esta forma de escribir la corriente permite obtener la relación que satisfacen las componentes inducidas puramente

por la perturbación periódica y que nos es muy útil para el análisis posterior

$$\sum_{\beta=L,R} J_{\beta}^P = 0,$$

En otras palabras, la corriente *DC* de calor debida exclusivamente al pumping o bombeo de fonones se conserva. Por otro lado, la $J_{\beta}^{T^{h-p}}$ de la Ec.149 puede ser expresada como:

$$\begin{aligned} J_{\beta}^{T^{h-p}} &= \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{-d\eta_{\beta}}{d\omega} \frac{\Delta T}{T_{\beta}} k\omega \omega \Gamma_{\beta} \Gamma_{\beta'} \omega \frac{d\Gamma_{\beta}}{d\omega} |G_{f_{l\alpha,l\alpha'}}(k, \omega)|^2, \\ &= \frac{\Delta T}{T_{\beta}} J_{\beta}^P + \frac{\Delta T}{T_{\beta}} \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{-d\eta_{\beta}}{d\omega} \omega^2 k\omega \Gamma_{\beta} \Gamma_{\beta'} \frac{d\Gamma_{\beta}}{d\omega} |G_{f_{l\alpha,l\alpha'}}(k, \omega)|^2 \end{aligned} \quad (152)$$

Finalmente, los términos de orden dos, $J_{\beta}^{(2)}$, se escriben como:

$$\begin{aligned} J_{\beta}^{(2)} &\approx \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\eta_{\beta}}{d\omega} k^2 \omega_0^2 \Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta'}(\omega) |G_{f_{l\alpha,l\alpha'}}(k, \omega)|^2 + \\ &+ \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{-d\eta_{\beta}}{d\omega} \frac{\Delta T}{T_{\beta}} k^2 \omega \omega^2 \Gamma_{\beta}(\omega) \Gamma_{\beta'}(\omega) \frac{d\Gamma_{\beta}}{d\omega} |G_{f_{l\alpha,l\alpha'}}(k, \omega)|^2 + \\ &+ \sum_{\beta'} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\eta_{\beta}}{d\omega} k^2 \omega \omega_0^2 \Gamma_{\beta}(\omega) \frac{d\Gamma_{\beta}}{d\omega} |G_{f_{l\alpha,l\alpha'}}(k, \omega)|^2. \end{aligned} \quad (153)$$

A esta contribución la llamaremos $J_{L/R}^D$ la cual se origina en la disipación, siendo positiva y de valor despreciable para ω_0 pequeño (es decir, en el límite adiabático).

A partir del desarrollo dado por la Ec.147, aún siendo a primeros órdenes en ω_0 , es posible analizar aspectos interesantes de la fenomenología detrás de los regímenes observados en las Figs.47 y 50. En régimen adiabático, los desarrollos anteriores muestran que la corriente presenta un comportamiento lineal con ΔT (si ΔT es pequeño), lo cual está en consonancia con los resultados presentados en la Fig.47, obtenida a partir de la corriente de calor completa dada por la

Ec.124. Por un lado se observa que la respuesta es lineal, independientemente del valor del desfase φ , de la frecuencia (no mostrado) y del grado de localidad de la interacción. Por otro, que existe un ΔT_{max} para el cual el sistema presenta régimen de enfriamiento y que depende del conjunto de parámetros, como se desprende de la Fig. 50. Cuando las temperaturas de los reservorios son tales que $\Delta T < \Delta T_{max}$, la contribución negativa de J_L^P es la dominante (el sistema aún se encuentra en régimen de enfriamiento). Mientras que las positivas que provienen de J^0 , J^{Th-P} y J^D y que producen transporte de calor a favor del gradiente térmico, comienzan a incrementarse a medida que $\Delta T \rightarrow \Delta T_{max}$. El valor de ΔT_{max} , que depende de la frecuencia, la fase y del grado de localidad, corresponde a diferencia de temperaturas de los reservorios para la cual la suma dada por la Ec.147 se torna positiva. En esta situación, en donde la disipación y la interferencia bombeo-gradiente de temperatura se tornan dominantes (y positivas), es donde el sistema deja de actuar como refrigerador.

Para comprender cómo las diferentes contribuciones presentes en la Ec.147 afectan la capacidad de enfriamiento del sistema, es necesario analizar qué mecanismos originan la respuesta del coeficiente CP con ΔT observado en la Fig.50 donde se lo grafica para diferentes valores de ω_0 pequeños (por medio de la Ec.128 a partir de la corriente de energía calculada numéricamente). Para ello, se realiza el cálculo de CP pero contemplando únicamente las expansiones en la frecuencia hasta orden dos de J_L y J_R (Ec.147). Tomando las expresiones dadas en las Ecs.148, 149 y 153 se puede calcular CP y mostrar que $CP^{(2)} = \frac{A^{(2)}+B^{(2)}}{C^{(2)}+D^{(2)}} = \frac{a^{(2)}+b^{(2)}\Delta T}{c^{(2)}+d^{(2)}\Delta T}$, donde $^{(2)}$ indica coeficientes que involucran contribuciones hasta segundo orden de J . Haciendo unos cálculos algebraicos se puede demostrar fácilmente que el coeficiente $A^{(2)} = J_{cold}^P + J_{cold}^D$, donde J_{cold}^D es la componente de Ec.153 que no depende de ΔT . $B^{(2)} = J_{cold}^0 + J_{cold}^{Th-P} + J_{cold}^D(\Delta T)$, donde $J_{cold}^D(\Delta T)$ es la componente de Ec.153 que depende linealmente de ΔT .

$C^{(2)} = J_{hot}^D + J_{cold}^D$ contempla sólo las contribuciones de J_{β}^D que no dependen de ΔT . Y $D^{(2)} = J_{cold}^{Th-P} + J_{hot}^{Th-P} + J_{cold}^D(\Delta T) + J_{hot}^D(\Delta T)$, donde $J_{\beta}^D(\Delta T)$ contempla las contribuciones de Ec.153 que dependen linealmente de ΔT .

Si consideramos que ω_0 es pequeño, los términos disipativos en expansión de J dada por la Ec.147 son despreciables ya que van como ω_0^2 u órdenes superiores. En este caso, y considerando solo los primeros dos términos de dicha expansión, el coeficiente de performance CP se aproxima por una forma funcional del tipo $CP^{(1)}(\Delta T) = A^{(1)} + B^{(1)} = a^{(1)} + b^{(1)}\Delta T^{-1}$, donde $^{(1)}$ indica que los coeficientes involucran contribuciones hasta orden 1 de J . Haciendo unos cálculos algebraicos se puede demostrar fácilmente que $A^{(1)} = \frac{J_{cold}^{Th-P}}{J_{cold}^{Th-P} + J_{hot}^{Th-P}}$, mientras que $B^{(1)} = \frac{J_{cold}^D + J_{hot}^D}{J_{cold}^{Th-P} + J_{hot}^{Th-P}}$. Por lo tanto, en el límite de muy bajas frecuencias cuando se desprecian las contribuciones disipativas en la corriente, CP responde a una ley de potencias $\sim \Delta T^{-1}$, lo que corresponde a despreciar el término independiente de ΔT en el denominador de la función obtenida a partir de la aproximación de $CP^{(2)}$ ($C^{(2)} \approx 0$).

La dependencia funcional de $CP^{(1)}$ con ΔT está en concordancia con el fiteo no lineal representado con línea punteada en la figura Fig.47 (log-log).

La expresión obtenida para CP a partir de la expansión de J a orden 2, contempla un coeficiente $C^{(2)}$ diferente de cero. Este coeficiente depende de las contribuciones de las componentes disipativas J_L^D y J_R^D dadas en la Ec.153 que no involucran ΔT (primer y tercer término de la Ec.153).

La Fig.50 muestra que cuando la frecuencia es pequeña ($\omega_0/2\pi = 0.05$) las curvas responden a una forma funcional tipo la $CP^{(1)}$ (recta punteada en el gráfico). Pero lo más interesante es que no se observan diferencias significativas en prácticamente todo el rango de $\Delta T \approx \Delta T_{max}$, entre curvas correspondientes a iguales parámetros pero distinto grado de localidad. Esto sugiere que cuando los efectos disipativos son despreciables, tanto la localidad como la no-localidad no

juegan un rol relevante en la capacidad de enfriamiento.

Cuando la frecuencia aumenta ($\omega_0/2\pi = 0.15$), se observa que solo cuando ΔT es bastante menor que ΔT_{max} las curvas responden a una forma funcional tipo $CP^{(1)}$, rango en el que no hay diferencias notorias entre los casos locales y no locales. Nuevamente esto indica que cuando la disipación es despreciable el rol del grado de localidad se lava. Sin embargo, cuando ΔT aumenta, las curvas correspondientes al caso local y no local se apartan (para un mismo conjunto de parámetros). Este es el rango donde las curvas no responden a una ley de potencias. En este caso, $CP^{(2)}$ es la forma funcional más adecuada, como siguiente grado de aproximación en ω_0 , y que incorpora los efectos de la disipación. Cabe aclarar que la transición de un comportamiento descrito por $CP^{(1)}$ a uno descrito por $CP^{(2)}$ no es abrupta, sino más bien continua y suave. Esto se debe a que el coeficiente $C^{(2)}$ crece desde cero cobrando cada vez más relevancia en el denominador de $CP^{(2)}$, haciendo que una ley de potencias ya no sea la respuesta adecuada. Sin embargo, esta caracterización permite identificar y estimar de forma clara y de manera sencilla el comportamiento de CP y el rol de la disipación en conjunto con el de la localidad, sin necesidad de hacer cálculos numéricos exhaustivos a partir de la expresión de J (Ec.124) para determinar en qué caso el grado de localidad será relevante.

Conclusiones del capítulo

En este capítulo, al igual que en el anterior, propusimos un modelo microscópico cuántico. Sin embargo, en este caso hay tres cadenas acopladas y las interacciones entre átomos pueden ser locales o no locales. Además se sometió al sistema a la acción de dos fuentes de no equilibrio: la presencia de un gradiente de temperatura, y las modulaciones temporales de la amplitud de los acoplamientos

con un desfase que modele campos aplicados en diferentes partes del sistema. El análisis se realiza numéricamente a partir del formalismo de Green de no equilibrio de Keldysh. Estudiamos comparativamente el rol de la localidad sobre las propiedades de transporte encontrando que:

- El dispositivo presenta el fenómeno de rectificación dinámica del flujo térmico, el cual depende de la localidad de las interacciones, del tamaño del sistema, y de los parámetros dinámicos.

- El dispositivo es capaz de operar como: aislante, motor térmico y refrigerador térmico. El cambio entre los diferentes regímenes operacionales depende de los parámetros dinámicos y de la localidad de las interacciones.

Realizando una expansión de la corriente térmica en el límite de bajas frecuencias hemos podido discriminar el origen de las diferentes contribuciones al flujo de calor y cómo afectan la performance de enfriamiento del sistema.

Conclusiones Generales

En esta tesis se estudió numéricamente el transporte de calor mediado por fonones en sistemas unidimensionales tanto clásicos como cuánticos sometidos a diferentes fuentes termomecánicas de no equilibrio.

En la primera etapa, nos centramos en un sistema unidimensional clásico con interacciones armónicas y anarmónicas (FK) sometido a dos fuentes de no equilibrio. Una de ellas, producida por la modulación temporal del acoplamiento entre segmentos de la cadena. La otra debida a la modulación temporal de la temperatura de los reservorios térmicos. El sistema presenta una ruptura de simetría espacio-temporal. La ruptura de simetría espacial se origina debido a la presencia del sustrato periódico y también a la estructura asimétrica del sistema (constantes de acoplamiento diferentes en los segmentos que la conforman). Por otro lado, la ruptura de simetría temporal se debe a las modulaciones temporales presentes, tanto en el acoplamiento entre segmentos de la cadena y en la modulación temporal de la temperatura de los reservorios. Considerando una dinámica tipo Langevin, mostramos que se producen regímenes de transporte resonante y multiresonante. Estos regímenes parecerían tener su origen en la ruptura de simetría espacio-temporal, donde la sinergia entre las dos perturbaciones temporales hacen que el dispositivo pueda operar como difusor o rectificador de energía térmica o como un aislante local de energía.

En una segunda etapa, propusimos un modelo cuántico para una juntura modulada entre dos estructuras unidimensionales de baja dimensión. El modelo consideró interacciones lineales entre átomos y un acoplamiento dependiente del tiempo entre partes del sistema. Realizamos el estudio en el límite de pequeñas amplitudes de la perturbación, empleando un formalismo de Green de no equilibrio de Keldysh. Mostramos que el sistema presenta una rectificación dinámica de corriente. Más aún, como en el caso clásico, es posible realizar un control dinámico que habilite regímenes de transporte con distintas capacidades operacionales como aislante o difusor térmico. Sin embargo al considerar cadenas en donde los efectos cuánticos no son despreciables, encontramos rangos de parámetros donde el sistema presenta regímenes en donde puede operar como motor térmico o como refrigerador, cuya eficiencia de enfriamiento fue caracterizada en función de parámetros relevantes. Aún un modelo sencillo como el que presentamos, es útil para identificar los mecanismos esenciales para que estos regímenes ocurran. Aplicando el formalismo de Green de no equilibrio analizamos los procesos de intercambio de energía (fonones) entre el sistema y los reservorios. Mostramos que es fundamental la presencia de una fuente que realice trabajo, inyectando o extrayendo fonones con una energía determinada por su frecuencia, para producir un transporte térmico asistido por un bombeo fonónico.

Con el objeto de extender el estudio a sistemas cuánticos unidimensionales en donde los átomos interactúen a más largo alcance, en la última etapa incorporamos interacciones no locales. En este caso, nuestro modelo microscópico consta de tres cadenas en contacto pero con acoplamientos temporales desfasados entre ellos. Con este modelo buscamos que nuestro análisis se pueda extender a sistemas 1D que respondan a potenciales interatómicos de más largo alcance bajo la acción de campos AC que se apliquen con alguna distribución espacial a lo largo del sistema. Encontramos que el hecho de incorporar interacciones no locales, modifica

los canales de conducción fonónica en relación al caso local, por lo tanto afectando los procesos de intercambio de energía entre reservorios. Así como en el caso local, se producen fenómenos de inversión y rectificación dinámica del flujo de calor. La no localidad también habilita que el sistema opere como motor o bomba térmica. Aproximando la corriente total por su expansión a orden dos en el límite de bajas frecuencias pudimos mostrar el rol de las diferentes contribuciones a la corriente que hacen que el sistema pueda operar como una máquina térmica o como un refrigerador.

Usualmente los estudios a partir de primeros principios del transporte de calor y termoelectricidad en dispositivos de baja dimensión se utilizan modelos que solo contemplan interacciones locales. A pesar de la aparente sencillez de los modelos implementados en esta tesis, se pueden lograr aproximaciones a sistemas reales donde los átomos interactúan con potenciales que dependen de la inversa de la distancia entre partículas elevada a alguna potencia. Nuestros resultados, no sólo contribuyen a extender el estudio a sistemas con interacciones de largo alcance, sino que además incorporamos la respuesta térmica cuando los sistemas operan bajo la acción de campos AC. Hasta donde tenemos conocimiento de la bibliografía esta propuesta es totalmente novedosa. Además sirve para mostrar que es necesario realizar un análisis crítico cuando se utilizan modelos microscópicos dependientes del tiempo que se basan exclusivamente en aproximaciones locales, si se quieren evitar distorsiones en la caracterización de las propiedades de transporte.

Nuestros modelos y los resultados obtenidos sirven como una plataforma teórica de relevancia práctica para el diseño de dispositivos para un control dinámico de los flujos de calor y de la disipación de potencias localizadas, las que pueden ser considerables como en el caso de campos o acciones nanomecánicas de alta frecuencia típicos de condiciones experimentales.

Extensiones a futuro

Son varios los aspectos que fundamentalmente se prevén profundizar. Si bien para este trabajo se realizó un amplio barrido de parámetros, especialmente en el sistema clásico, quedan aún zonas del espacio de fases a ser investigados para explorar más sistemáticamente si existen condiciones para las cuales los regímenes de transporte encontrados en el caso cuántico pudieran encontrarse también en el sistema clásico. En particular explorar si existe alguna configuración de parámetros para los cuales el sistema clásico presente un régimen de enfriamiento, lo que requeriría trabajar con temperaturas más bajas, donde el potencial de sitio del modelo FK se puede aproximar a uno armónico. También será interesante explorar más sistemáticamente el rol del tamaño del sistema sobre el transporte, tanto en el caso clásico como cuántico.

Sin embargo, tanto para extender el rango de parámetros como para aumentar el tamaño de las cadenas, es necesario evolucionar el código hacia arquitecturas más adecuadas para este tipo de trabajo. El uso de GPU (graphics processing unit) ha resultado efectivo para problemas similares, esto es cadenas relativamente cortas con cálculos idénticos en pasos de tiempos secuenciales. Una situación que concuerda perfectamente con el sistema cuántico estudiado en donde la inversión de una matriz es requerido en cada paso de integración.

Otra opción que se está analizando, relacionada con la eficiencia del código, es la paralelización por parámetros. Este tipo de abordaje es realizado mediante scripts (escritos en python o similar) en donde se asignan los parámetros requeridos al código fuente y se lanzan ejecuciones en la cantidad de procesadores disponibles. Mediante este tipo de abordaje, el mismo código puede ejecutarse en cientos de procesadores al mismo tiempo, requiriéndose obviamente después automatizar la lectura y postproceso de la enorme cantidad de datos generada.

Por otra parte, resultaría interesante profundizar sobre el estudio de los com-

portamientos anómalos de transporte encontrados en el caso clásico, particularmente con relación a la posible transferencia de energía superbalística, muy poco estudiada y sólo recientemente en el caso de sistemas fonónicos. Este estudio requiere ir más allá de las técnicas teóricas desarrolladas en esta tesis, pudiéndose explorar otras, como por ejemplo, la teoría de fluctuaciones hidrodinámicas aplicada al estudio del transporte anómalo de calor.

Por último, tenemos previsto extender el estudio del sistema cuántico con interacciones no locales para realizar un análisis sistemático en función del rango de la interacción. Para este último análisis es esencial aumentar el tamaño del sistema, por lo que deberá hacerse sobre el código rediseñado a GPUs.

Apéndice I

Para operar con el conjunto de funciones de Green definidas sobre el eje de tiempo real, que caracterizan completamente el sistema, es útil considerar el método de la ecuación de movimiento aplicado en el contorno CK . Para un sistema balístico, estas ecuaciones se pueden resolver en forma cerrada y exacta. Sin embargo existen algunas sutilezas (sobre condiciones de contorno e iniciales) que deben ser tenidas en cuenta al momento de resolverlas. La aproximación aquí es expresar las funciones de Green desconocidas en función de las que se conocen (las del sistema desacoplado). Para sistemas interactuantes estas ecuaciones, se convierten en una jerarquía infinita de ecuaciones que pueden expresarse en una forma integral (equivalente a la expansión diagramática de Feynman). Se parte de la ecuación de movimiento de Heisenberg $-ik \frac{dO(\tau)}{d\tau} = [\hat{O}(\tau), H]$, con el operador definido sobre CK . Tanto la derivada como el operador con la variable de τ son equivalentes a la derivada ordinaria respecto al tiempo y al operador de Heisenberg en t (en lo que concierne al efecto del operador actuando en el espacio de Hilbert), siendo entonces una ecuación equivalente a la ecuación de Heisenberg ordinaria. La única diferencia es que en el orden sobre el contorno la posición del operador tiene que tener el orden correcto acorde al ordenamiento dado por \hat{T}_{CK} . A continuación mostramos este método considerando como ejemplo el caso de un

sistema de osciladores acoplados no necesariamente en equilibrio,

$$H = \frac{1}{2} p^T p + \frac{1}{2} x^T F x \quad (154)$$

con $F = F^\dagger$ la matriz de constantes elásticas. Como la transformación del operador desde la representación de Schrödinger a Heisenberg sobre el contorno es una transformación unitaria, la relación de conmutación $[x(\tau), p^T(\tau)] = ikI$ vale para las variables del contorno a igual tiempo, con I es la matriz identidad cuyo tamaño es igual al número de grados de libertad del sistema. La función de Green ordenada sobre el contorno correspondiente al sistema completo puede ser escrita como

$$\begin{aligned} G(\tau, \tau') &= -\frac{i}{k} \overline{\langle T [\rho(\tau) \rho^T(\tau') - C_{CK} x(\tau) x(\tau')^T] \rangle} \\ &= -\frac{i}{k} \Theta(\tau - \tau') \langle x(\tau) x(\tau')^T \rangle - \frac{i}{k} \Theta(\tau' - \tau) \langle x(\tau') x(\tau)^T \rangle \end{aligned} \quad (155)$$

donde $\langle \dots \rangle$ denota el promedio sobre la matriz densidad. Diferenciando respecto a τ , usando que $\frac{\partial \Theta(\tau - \tau')}{\partial \tau} = \delta(\tau - \tau')$, $\frac{\partial \Theta(\tau' - \tau)}{\partial \tau} = -\delta(\tau - \tau')$, la regla de Leibniz y la ecuación de Heisenberg $\frac{\partial x(\tau)}{\partial \tau} = \dot{x}(\tau) = \rho(\tau)$ se llega a

$$\frac{\partial G(\tau, \tau')}{\partial \tau} = -\frac{i}{k} \overline{\langle T \dot{x}(\tau) x(\tau')^T \rangle} - \frac{i}{k} \delta(\tau - \tau') \langle [x(\tau) x(\tau')^T] \rangle \quad (156)$$

Para obtener la ecuación de movimiento correspondiente a operadores fonónicos se toma la derivada segunda obteniéndose

$$\frac{\partial^2 G(\tau, \tau')}{\partial \tau^2} = -\frac{i}{k} \overline{\langle T C_{CK} \ddot{x}(\tau) x(\tau')^T \rangle} - \frac{i}{k} \delta(\tau - \tau') \langle [\dot{x}(\tau) x(\tau')^T] \rangle \quad (157)$$

Conmutando el Hamiltoniano dos veces con x se obtiene la ecuación de Heisenberg $\ddot{x} = -F x$ que tiene la misma forma que una ecuación de movimiento clásica. Más aún, usando la relación de conmutación, el segundo término puede ser simplificado

obteniendo la ecuación de movimiento de un sistema de osciladores acoplados

$$\frac{\partial^2 G(\tau, \tau')}{\partial^2 \tau} + FG(\tau, \tau') = -\delta(\tau, \tau') I \quad (158)$$

Para extender este desarrollo al caso de no equilibrio (analizando régimen estacionario), se particiona el sistema en la región central, de los reservorios y de los contactos con estos (cada uno con una matriz densidad inicial bien definida). En términos de los hamiltonianos de los sistemas central (c) y de los reservorios (L,R) se puede escribir $H = H_L + H_R + H_c + x_L^T F_{L,c} x_c + x_R^T F_{R,c} x_c$, donde los últimos términos dan cuenta de las interacciones cadena central - reservorios. Separando la matriz F en contribuciones diagonales y fuera de la diagonal:

$$F_o = \begin{bmatrix} F_L & 0 & 0 \\ 0 & F_c & 0 \\ 0 & 0 & F_R \end{bmatrix} \quad (159)$$

y

$$F_{int} = \begin{bmatrix} 0 & F_{L,c} & 0 \\ F_{c,L} & 0 & F_{c,R} \\ 0 & F_{R,c} & 0 \end{bmatrix} \quad (160)$$

Esta separación en contribuciones desacopladas y de interacción es fácil mostrar que es válida la siguiente ecuación de Dyson

$$G(\tau, \tau') = g(\tau, \tau') + \int_{cK} d\tau'' g(\tau, \tau'') F_{int} G(\tau'', \tau') \quad (161)$$

donde g se define a partir de

$$\frac{\partial^2 g(\tau, \tau')}{\partial^2 \tau} + F_o g(\tau, \tau') = -\delta(\tau, \tau') I \quad (162)$$

Simbólicamente se escribe $G = g + gF_1G$. La ecuación 158 se obtiene si se aplica el operador $I\frac{\partial^2}{\partial z^2} + F_0$ a ambos lados de la ecuación 161, y usando la Ec.162. La ecuación de Dyson (Ec.161) permite entonces, expresar las funciones de Green desconocidas G en función de funciones de Green conocidas g . Debido a la equivalencia topológica entre los sistemas de equilibrio y no equilibrio, la metodología desarrollada aquí es la que se implementa en esta tesis para encontrar la función de Green correspondiente al estado de no equilibrio (cuando hay una perturbación temporal), conociendo la función de Green de equilibrio del sistema+reservorio.

Apéndice II

Existen dos aproximaciones posibles para el tratamiento de la perturbación. Una es hacer una aproximación perturbativa, es decir considerar que la intensidad de la interacción dependiente del tiempo es pequeña. La otra es suponer que la intensidad no es necesariamente pequeña pero que las frecuencias son bajas, es decir considerar una evolución adiabática. La ventaja de esta última es que se hacen cálculos de equilibrio, pensando al tiempo como un parámetro y no como una variable dinámica. Esencialmente se calculan funciones de Green de equilibrio. Se toma la ecuación matricial Ec.115

$$(-\partial_t^2 - F(\hat{t}'))\hat{G}^R(t, t') - \int_{t'}^t dt_1 \hat{G}^R(t, t_1) \hat{\Sigma}^R(t_1 - t') = \frac{1}{m} \delta(t - t') \hat{I} \quad (163)$$

y se hace la transformada de Fourier en un único tiempo:

$$\hat{G}^R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \hat{G}^R(t, \omega) \quad (164)$$

La aproximación adiabática implica suponer que $\hat{F}(t') \approx \hat{F}(t) + \dot{\hat{F}}(t)(t-t')$ Reemplazando en Ec.163

$$- \frac{d\omega}{2\pi} \int \int \partial^2 e^{-i\omega(t-t')} \hat{G}^R(t, \omega) + \hat{F}(t) e^{-i\omega(t-t')} \hat{G}^R(t, \omega) + \dot{\hat{F}}(t)(t-t') e^{-i\omega(t-t')} \hat{G}^R(t, \omega) - i \int ds \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-s)} \hat{G}^R(t, \omega) e^{-i\omega'(s-t')} \hat{\Sigma}^R(\omega') = \frac{\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')}. \quad (165)$$

Utilizando propiedades de la transformada de Fourier se llega a

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} [\omega^2 \hat{\mathbf{I}} - \hat{F}(t) - \hat{\Sigma}^R(\omega')] \hat{G}^R(t, \omega) e^{-i\omega(t-t')} - i \int \frac{d\omega}{2\pi} \dot{\hat{F}}(t) \partial_\omega \hat{G}^R(t, \omega) e^{-i\omega(t-t')} = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')}, \quad (166)$$

donde definimos

$$\hat{G}_f^{-1}(t, \omega) = [\omega^2 \hat{\mathbf{I}} - \hat{F}(t) - \hat{\Sigma}^R(\omega)]. \quad (167)$$

De esta forma se puede aproximar la función retardada como una suma que depende de la función de Green congelada

$$\hat{G}^R(t, \omega) = \hat{G}_f(t, \omega) + i \hat{G}_f(t, \omega) \dot{\hat{F}}(t) \partial_\omega \hat{G}^R(t, \omega) \quad (168)$$

siendo

$$\hat{G}^R(t, \omega) = i \hat{G}_f(t, \omega) \dot{\hat{F}}(t) \partial_\omega \hat{G}^R(t, \omega) \quad (169)$$

una corrección a primer orden.

Bibliografía

- [1] K. Y. Tan et al., Nature Communications. 8, 15189 (2017).
- [2] A. Majumdar, Science 303, 777 (2004).
- [3] M. S. Dresselhaus et al., Adv. Mater.19, 1043 (2007).
- [4] O. Caballero-Calero and R. D'Agosta, ECS J. Solid State Sci. Technol. 6, N3065 (2017).
- [5] C. Yang, X. Wei, J. Sheng, and H. Wu, Nat Commun 11, 4656 (2020)
- [6] A. Almubarak, Int. J. Eng. Res. Appl. 07, 52 (2017).
- [7] Y. Cengel and A. Ghajar, Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications, 5th ed. (McGraw-Hill Education, New York, 2014).
- [8] N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. Hänggi, and B. Li, Rev. Mod. Phys. 84, 1045 (2012).
- [9] G. Wehmeyer, T. Yabuki, C. Monachon, J. Wu, and C. Dames, Appl. Phys. Rev. 4, 041304 (2017).
- [10] J.-B.-J. Fourier, Théorie analytique de la chaleur (F. Didot, Paris, 1822).
- [11] C. Starr, Physics 7, 15 (1936).

- [12] M. Terraneo, M. Peyrard, and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* 88, 094302 (2002).
- [13] B. Li, L. Wang, and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* 93, 184301 (2004).
- [14] J. Lan, L. Wang, and B. Li, *Int. J. Mod. Phys. B* 21, 4013 (2007).
- [15] B. Hu, L. Yang, and Y. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* 97, 124302 (2006).
- [16] B. Hu and L. Yang, *Chaos* 15, 015119 (2005).
- [17] N. Yang, N. Li, L. Wang, and B. Li, *Phys. Rev. B* 76, (2007).
- [18] G. Casati, *Chaos* 15, 015120 (2005).
- [19] D. Segal and A. Nitzan, *Phys. Rev. Lett.* 94, 034301 (2005).
- [20] L. A. Manzaneda Osorio G, *Rev. Boliv. Fis.* 35, 37-40 (2019).
- [21] B. Li, L. Wang, and G. Casati, *Appl. Phys. Lett.* 88, 143501 (2006).
- [22] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl, *Science* 314, 1121 (2006).
- [23] N. Li, P. Hänggi, and B. Li, *EPL* 84, 40009 (2008).
- [24] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner, and E. Demler, *Phys. Rev. B* 82, 235114 (2010).
- [25] L. Jiang, T. Kitagawa, J. Alicea, A. R. Akhmerov, D. Pekker, G. Refael, J. I. Cirac, E. Demler, M. D. Lukin, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* 106, 220402 (2011).
- [26] N. H. Lindner, G. Refael, and V. Galitski, *Nature Physics* 7, 490 (2011).
- [27] B. Li, J. Lan, and L. Wang, *Phys. Rev. Lett.* 95, 104302 (2005).

- [28] N. Li, F. Zhan, P. Hänggi, and B. Li, Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft Matter Phys. 80, 011125 (2009).
- [29] L. Arrachea, E. R. Mucciolo, C. Chamon, and R. B. Capaz, Phys. Rev. B 86, 125424 (2012).
- [30] C. Chamon, E. R. Mucciolo, L. Arrachea, and R. B. Capaz, Phys. Rev. Lett. 106, 135504 (2011).
- [31] B. K. Agarwalla, J.-S. Wang, and B. Li, Phys. Rev. E 84, 041115 (2011).
- [32] J. Ren, and B. Li, Phys. Rev. E 84, 031122 (2011).
- [33] J. Ren and B. Li, Phys. Rev. E 81, 021111 (2010).
- [34] E. C. Cuansing and J.-S. Wang, Phys. Rev. B 81, 052302 (2010).
- [35] E. C. Cuansing and J.-S. Wang, Phys. Rev. E 82, 021116 (2010).
- [36] B. Ai, D. He, and B. Hu, Phys. Rev. E 81, 031124 (2010).
- [37] R. Moghaddasi Fereidani and D. Segal, J. Chem. Phys. 150, 024105 (2019).
- [38] D. Segal and B. K. Agarwalla, Annu. Rev. Phys. Chem. 67, 185 (2016).
- [39] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M. Tour, Science 278, 252 (1997).
- [40] N. Mosso, H. Sadeghi, A. Gemma, S. Sangtarash, U. Drechsler, C. Lambert, and B. Gotsmann, Nano Lett. 19, 7614 (2019).
- [41] A. Vladyka et al., Nat Commun. 10, 262 (2019).
- [42] M. Dey, Why Thermoelectricity? Adamas University (2020), (available at <https://adamasuniversity.ac.in/energy-next-thermoelectricity-at-molecular-junctions-breakthrough-in-nanoscience/>).

- [43] Q. Li, I. Duchemin, S. Xiong, G. C. Solomon, and D. Donadio, *J. Phys. Chem. C* 119, 24636 (2015).
- [44] L. S. Cao, R. W. Peng, and M. Wang, *Appl. Phys. Lett.* 93, 011908 (2008).
- [45] G. K. Horton, A. A. Maradudin (Eds.). *Dynamical Properties of Solids* 7. North Holland (1995).
- [46] J. Callaway, *Phys. Rev.* 113, 1046 (1959).
- [47] A. Dhar, *Adv. Phys.* 57, 457 (2008).
- [48] S. Lepri, *Phys. Rep.* 377, 1 (2003).
- [49] B. Li and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* 91, 044301 (2003).
- [50] A. A. Balandin, *Nature Materials* 10, 569 (2011).
- [51] M. Maldovan, *Appl. Phys. Lett.* 101, 113110 (2012).
- [52] K. M. Hoogeboom-Pot, J. N. Hernandez-Charpak, X. Gu, T. D. Frazer, E. H. Anderson, W. Chao, R. W. Falcone, R. Yang, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn and D. Nardi. *PNAS* 112, 4846 (2015).
- [53] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar, A. Zettl, *Phys. Rev. Lett.* 101, 075903 (2008).
- [54] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. (Wiley, New York, 1996).
- [55] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [56] E. C. Cuansing, H. Li, and J.-S. Wang, *Phys. Rev. E* 86, 031132 (2012).
- [57] E. Pereira, *Physica A* 390, 4131 (2011).

- [58] S. Liu, X. F. Xu, R. G. Xie, G. Zhang, and B. W. Li, *Eur. Phys. J. B* 85, 337 (2012).
- [59] L. Wang, B. Hu, and B. Li, *Phys. Rev. E* 88, 052112 (2013).
- [60] L. Wang, B. Hu, and B. Li, *Phys. Rev. E* 86, 040101 (2012).
- [61] S. G. Das, A. Dhar, and O. Narayan, *J. Stat. Phys.* 154, 204 (2014).
- [62] A. V. Savin and Y. A. Kosevich, *Phys. Rev. E* 89, 032102 (2014).
- [63] B. Hu and L. Yang, *Physica A* 372, 272 (2006).
- [64] C. A. Polanco and A. W. Ghosh, *J. Appl. Phys.* 116, 083503 (2014).
- [65] L. Wang and J. Wu, *Phys. Rev. E* 89, 012119 (2014).
- [66] L. Wang and B. Li, *Phys. Rev. Lett.* 99, 177208 (2007).
- [67] R. Xie, C. T. Bui, B. Varghese, Q. Zhang, C. H. Sow, B. Li, and J. T. L. Thong, *Adv. Funct. Mater.* 21, 1602 (2011).
- [68] L. Wang and B. Li, *Phys. Rev. Lett.* 101, 267203 (2008).
- [69] G. Benenti, G. Casati, C. Mejía-Monasterio, M. Peyrard *in* *Thermal Transport in Low Dimensions: From Statistical Physics to Nanoscale Heat Transfer*, S. Lepri, Ed. (Springer International Publishing, Cham, 2016). pp. 365-407.
- [70] N. Yang, N. Li, L. Wang, and B. Li, *Phys. Rev. B* 76, 020301 (2007).
- [71] Y. Frenkel and T. Kontorova, *Phys. Z. Sowjetunion* 13, 1 (1938).
- [72] T. Kontorova and J. Frenkel, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 8, 89 (1938).
- [73] T. Kontorova and J. Frenkel, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 8, 1340 (1938).

- [74] T. Kontorova and J. Frenkel, *J. Phys. Acad. Sci. USSR* **1**, 137 (1939).
- [75] G. I. Taylor, *Proceedings of the Royal Society A*, **145**, 362 (1934)
- [76] R. Hobart and V. Celli, *J. Appl. Phys.* **33**, 60 (1962)
- [77] J. Kratochvíl and V. L. Indenbom, *Czech. J. Phys.* **13**, 814 (1963).
- [78] M. J. Ablowitz and H. Segur, *Solitons and the Inverse Scattering Transform* (SIAM, Philadelphia, 1981; Mir, Moscow, 1987).
- [79] J. J. Mazo and A. V. Ustinov, *in The Sine-Gordon Model and Its Applications: From Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-Energy Physics*, edited by J. Cuevas-Maraver, P. G. Kevrekidis, and F. Williams (Springer International Publishing, Cham, 2014), pp. 155–175.
- [80] T. W. White, N. Martsinovich, A. Troisi, and G. Costantini, *J. Phys. Chem. C* **122**, 17954 (2018).
- [81] O. M. Braun, Y. S. Kivshar, *The Frenkel-Kontorova model: concepts, methods and applications*, Texts and monographs in physics, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2004.
- [82] J. Wang and Z. G. Zheng. *Phys. Rev. E* **81**(1), 011114 (2010);
- [83] E. Díaz, R. Gutierrez, and G. Cuniberti, Heat transpor and thermal rectification in molecular junctions: A minimal model approach, *Phys. Rev. B* **84**(14), 144302 (2011);
- [84] B. Q. Ai and B. Hu. *Phys. Rev. E* **83**(1), 011131 (2011).
- [85] E. Scalise, M. Houssa, G. Pourtois, B. van den Broek, V. Afanas'ev, and A. Stesmans. *Nano Res.* **6** (1), 19 (2013).

- [86] B. Y. Cao and Q. W. Hou, C. Bing-Yang, and H. Quan-Wen. *Chin. Phys. Lett.* 25 (4), 1392 (2008).
- [87] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau. *Nano Lett.* 8(3), 902 (2008).
- [88] Z. Q. Ye, B. Y. Cao, W. J. Yao, T. Feng, and X. Ruan. *Carbon* 93, 915 (2015).
- [89] R. Guo and B. Huang. *Int. J. Heat Mass Transfer* 77, 131 (2014).
- [90] Woods, C., Britnell, L., Eckmann, A. et al. *Nature Phys* 10, 451–456 (2014).
- [91] A. Rajabpour, S. Bazrafshan, and S. Volz. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 2507 (2019).
- [92] N. Tu, D. Q. Trung, N. D. T. Kien, P. T. Huy, and D. H. Nguyen. *Physica E Low-Dimensional Systems and Nanostructures* 85, 174-179 (2017).
- [93] H. C. Andersen, *J. Chem. Phys.* 72, 2384 (1980).
- [94] H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. R. Haak, *J. Chem. Phys.* 81, 3684 (1984).
- [95] S. Nosé, *J. Chem. Phys.* 81, 511 (1984).
- [96] W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* 31, 1695 (1985).
- [97] X. Yong and L. T. Zhang, *J. Chem. Phys.* 138, 084503 (2013).
- [98] P. Langevin, *C. R. Acad. Sci.* 530 (1908).
- [99] D. P. Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics.* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).

- [100] J. M. Haile. Molecular dynamics simulation: elementary methods. (Wiley, New York, 1992).
- [101] D. Frenkel and B. Smit. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. (Academic Press, San Diego, 2002).
- [102] M. Field. A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems (2nd ed.). (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [103] C. Cruz Valcárcel. Simulación mediante métodos híbridos clásico-cuánticos de la relajación vibracional de moléculas en disolución. Universidad de Murcia, (2005).
- [104] R. W. Hockney and J. W. Eastwood. Computer simulations using particles. (Adam Hilger, Bristol, 1988).
- [105] E. Vanden-Eijnden and G. Ciccotti, Chem. Phys. Lett. 429, 310316 (2006).
- [106] E. Carlon, M. Laleman and S. Nomidis. Computational Physics: Molecular Dynamics Simulations Online; accessed 4-3-2021. http://itf.fys.kuleuven.be/~enrico/Teaching/molecular_dynamics_2015.pdf
- [107] B. Li, J. Lan, and L. Wang, Phys. Rev. Lett. 95, 104302 (2005).
- [108] Li B, Wang J, Wang L, Zhang G. Chaos. 15:015121 (2005).
- [109] E.G. Flekkøy, A. Hansen and B. Baldelli. Front. Phys. 9:640560 (2021).
- [110] Levi, L., Krivolapov, Y., Fishman, S. et al. Nature Phys 8, 912–917 (2012).
- [111] Dao-Sheng Tang and Bing-Yang Cao. Appl. Phys. Lett. 111, 113109 (2017).
- [112] N. Beraha, A. Soba, R. Barreto, and M. F. Carusela, Physica A 433, 9 (2015).

- [113] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard, *Science* 283, 1905 (1999).
- [114] S. K. Watson, R. M. Potok, C. M. Marcus, and V. Umansky, *Phys. Rev. Lett.* 91, 258301 (2003).
- [115] S. P. Giblin, M. Kataoka, J. D. Fletcher, P. See, T. J. B. M. Janssen, J. P. Griffiths, G. a. C. Jones, I. Farrer, and D. A. Ritchie, *Nature Communications* 3, 930 (2012).
- [116] G. Granger, J. P. Eisenstein, and J. L. Reno, *Phys. Rev. Lett.* 102, 086803 (2009).
- [117] A. Nitzan, *Science* 317, 759 (2007).
- [118] F. Giazotto, T. T. Heikkilä, A. Luukanen, A. M. Savin, and J. P. Pekola, *Rev. Mod. Phys.* 78, 217 (2006).
- [119] M. Montinaro, A. Mehlin, H. S. Solanki, P. Peddibhotla, S. Mack, D. D. Awschalom, and M. Poggio, *Appl. Phys. Lett.* 101, 133104 (2012).
- [120] M. Poot and H. S. J. van der Zant, *Phys. Rep.* 511, 273 (2012).
- [121] A. Naik, O. Buu, M. D. LaHaye, A. D. Armour, A. A. Clerk, M. P. Blencowe, and K. C. Schwab, *Nature* 443, 193 (2006).
- [122] J. T. Muhonen, M. Meschke, and J. P. Pekola, *Rep. Prog. Phys.* 75, 046501 (2012).
- [123] O. Entin-Wohlman, Y. Imry, and A. Aharony, *Phys. Rev. B* 91, 054302 (2015).
- [124] L. Arrachea and B. Rizzo, *J. Phys.: Conf. Ser.* 427, 012012 (2013).

- [125] N. Freitas and J. P. Paz, Phys. Rev. E 95, 012146 (2017).
- [126] R. Scheibner, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, C. Gould, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, New J. Phys. 10, 083016 (2008).
- [127] T. Ruokola, T. Ojanen, and A.-P. Jauho, Phys. Rev. B 79, 144306 (2009).
- [128] K. Joulain, J. Drevillon, Y. Ezzahri, and J. Ordóñez-Miranda, Phys. Rev. Lett. 116, 200601 (2016).
- [129] A. Riera-Campeny, M. Mehboudi, M. Pons, and A. Sanpera, Phys. Rev. E 99, 032126 (2019).
- [130] G. A. Nemnes, U. Wulf and P. N. Racec, J. Appl. Phys. 96, 596 (2004).
- [131] A. M. Song, A. Lorke, A. Kriele, J. P. Kotthaus, W. Wegscheider, and M. Bichler, Phys. Rev. Lett. 80, 3831 (1998).
- [132] C. V. Morfonios and P. Schmelcher, *in* Control of Magnetotransport in Quantum Billiards: Theory, Computation and Applications, edited by C. V. Morfonios and P. Schmelcher (Springer International Publishing, Cham, 2017), pp. 37–58.
- [133] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957).
- [134] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, J. Phys. C: Solid State Phys. 4, 916 (1971).
- [135] C. Caroli, R. Combescot, D. Lederer, P. Nozieres, and D. Saint-James, J. Phys. C: Solid State Phys. 4, 2598 (1971).
- [136] Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. 68, 2512 (1992).
- [137] H. M. Pastawski, Phys. Rev. B 46, 4053 (1992).

- [138] A. P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, *Semicond. Sci. Technol.* **9**, 926 (1994).
- [139] G. Stefanucci and C.-O. Almbladh, *Phys. Rev. B* **69**, 195318 (2004).
- [140] M. Kilgour and D. Segal, *J. Chem. Phys.* **144**, 124107 (2016).
- [141] J.-S. Wang, J. Wang, and N. Zeng, *Phys. Rev. B* **74**, 033408 (2006).
- [142] L. Zhang, P. Keblinski, J.-S. Wang, and B. Li, *Phys. Rev. B* **83**, 064303 (2011).
- [143] J.S. Wang, N. Zeng, J. Wang, and C. K. Gan, *Phys. Rev. E* **75**, 061128 (2007).
- [144] P. E. Hopkins, P. M. Norris, M. S. Tsegaye, and A. W. Ghosh, *J. Appl. Phys.* **106**, 063503 (2009).
- [145] Z. Tian, K. Esfarjani, and G. Chen, *Phys. Rev. B* **86**, 235304 (2012).
- [146] M. Bachmann, M. Czerner, S. Edalati-Boostan, and C. Heiliger, *Eur. Phys. J. B* **85**, 146 (2012).
- [147] J. Lan, J.-S. Wang, C. K. Gan, and S. K. Chin, *Phys. Rev. B* **79**, 115401 (2009).
- [148] Z.-X. Xie, K.-Q. Chen, and W. Duan, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 315302 (2011).
- [149] P. S. E. Yeo, K. P. Loh, and C. K. Gan, *Nanotechnology* **23**, 495702 (2012).
- [150] N. Mingo and D. A. Broido, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 096105 (2005).
- [151] N. H. Kwong, M. Bonitz, R. Binder, and H. S. Köhler, *Phys. Stat. Sol. (b)* **206**, 197 (1998).

- [152] D. Semkat, D. Kremp, and M. Bonitz, *Phys. Rev. E* 59, 1557 (1999).
- [153] N. E. Dahlen and R. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* 98, 153004 (2007).
- [154] L. Arrachea, *Phys. Rev. B* 72, 125349 (2005).
- [155] L. Arrachea, M. Moskalets, and L. Martin-Moreno, *Phys. Rev. B* 75, 245420 (2007).
- [156] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* 75, 1736 (1949).
- [157] J. Schirmer, *in* *Many-Body Methods for Atoms, Molecules and Clusters*, edited by J. Schirmer (Springer International Publishing, Cham, 2018), pp. 111–134.
- [158] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3rd ed. (Springer US, 2000).
- [159] C. Brouder, G. Stoltz, and G. Panati, *Phys. Rev. A* 78, 042102 (2008).
- [160] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-particle Systems* (Dover Publications, New York, 2003).
- [161] R. A. Jishi, editor, *in* *Feynman Diagram Techniques in Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013), pp. 331–368.
- [162] J.-S. Wang, B. K. Agarwalla, H. Li, J. Thingna, *Front. Phys.* 9, 673–697 (2014).
- [163] L. Arrachea and M. Moskalets. *Phys. Rev. B* 74, 245322 (2006).
- [164] N. Beraha, A. Soba, and M. F. Carusela, *Physica A* 464, 64 (2016).
- [165] D.-X. Qi, R.-W. Peng, L.-S. Cao, Q. Hu, R.-L. Zhang, X.-R. Huang, and M. Wang, *Phys. Rev. B* 85, 214123 (2012).
- [166] H. Wang and Y. Leng, *J. Phys. Chem. C* 119, 15216 (2015).

- [167] S. Chen, E. Pereira, and G. Casati, *EPL*, 111 (2015) 30004.
- [168] C. Olivares and C. Anteneodo, *Phys. Rev. E* 94, 042117 (2016).
- [169] H. Zhou, G. Zhang, J.-S. Wang, and Y.-W. Zhang, *Phys. Rev. E* 94, 052123 (2016).
- [170] D. Bagchi, *Phys. Rev. E* 95, 032102 (2017).
- [171] J. Wang, S. V. Dmitriev, and D. Xiong, *Phys. Rev. Research* 2, 013179 (2020).
- [172] S. Iubini, P. Di Cintio, S. Lepri, R. Livi, and L. Casetti, *Phys. Rev. E* 97, 032102 (2018).
- [173] P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* 58, R10135–R10138 (1998).
- [174] M. Moskalets, M. Büttiker, *Phys. Rev. B* 66, 035306 (2002).
- [175] L. Arrachea, *Phys. Rev. B* 75, 035319 (2007).
- [176] L. Arrachea, M. Moskalets, *Phys. Rev. B* 74, 245322 (2006).