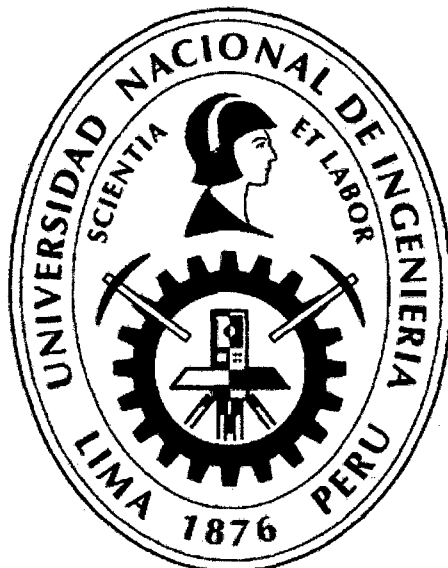


UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE:  
LICENCIADO EN FÍSICA

TÍTULADA:

CORRELACIONES CUÁNTICAS Y PROPIEDADES MAGNÉTICAS  
EN CORRALES ELÍPTICOS CUÁNTICOS

PRESENTADA POR:

MARCO ALFREDO NIZAMA MENDOZA

ASESOR:

DÁMASO LAURA CCAHUANA

LIMA - PERÚ

**Digitalizado por:**

2014

Consortio Digital del  
Conocimiento MebLatam,  
Hemisferio y Dalse

# Resumen

Es importante resaltar que los corrales cuánticos presentan propiedades interesantes debido a la notable combinación de confinamiento y focalización, algunas de las cuales fueron observadas experimentalmente, gracias a los recientes avances tecnológicos. Estudiamos teóricamente el comportamiento estático y dinámico de estos sistemas (bajo diversas perturbaciones). En primer lugar analizamos el caso del corral cuántico no interactuante (sin impurezas), y con parámetros realistas obtuvimos los autoestados la elipse con el modelo de pared dura.

Posteriormente estudiamos el sistema en presencia de dos impurezas de Kondo de espín  $S = 1/2$  localizadas en los focos del corral elíptico. Éstas interactúan con los electrones itinerantes en la elipse vía un término de superintercambio  $J$ . El proceso de diagonalización de este sistema se realiza numéricamente y posteriormente estudiamos propiedades tales como correlación de espín y densidad local de estados. Encontramos que, para valores de  $J$  chicos comparado con el ancho de banda del corral, los espines están en un estado singlete para número par de electrones en la elipse o triplete para número impar (régimen RKKY). Esto quiere decir, que en ese límite es posible describir el comportamiento del sistema a bajas energías con un hamiltoniano efectivo entre las impurezas. En el caso de altas energías, es decir para valores grandes de  $J$  más estados electrónicos están involucrados en las propiedades del sistema y los espines se descorrelacionan entre sí, formando un estado de Kondo local con los electrones itinerantes.

Adicionalmente, estudiamos algunas magnitudes de la teoría de la información cuántica que es una herramienta alternativa para el análisis de sistemas cuánticos. Calculamos la entropía de von Neumann para el caso no interactuante, y caracterizamos las propiedades relevantes del sistema.



# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción a corrales cuánticos elípticos</b>	<b>1</b>
1.0.1	Una breve definición de un corral cuántico . . . . .	1
1.0.2	Descripción de corrales elípticos cuánticos . . . . .	1
<b>2</b>	<b>Corral cuántico elíptico no interactuante</b>	<b>7</b>
2.1	Modelo de pared dura (condiciones de contorno) . . . . .	7
2.2	Potenciales locales en los focos de la elipse . . . . .	11
2.2.1	Proyección sobre los estados $ \alpha\rangle$ . . . . .	12
2.2.2	Resultados . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Corral elíptico cuántico con dos impurezas</b>	<b>17</b>
3.1	Algunas definiciones útiles . . . . .	17
3.1.1	Régimen Kondo . . . . .	17
3.1.2	Régimen RKKY . . . . .	17
3.2	Introducción . . . . .	19
3.3	Modelo de dos impurezas de Kondo . . . . .	19
	<i>Matriz hamiltoniana para 3 niveles en la elipse</i> . . . . .	22
3.3.1	Correlaciones de espín . . . . .	22
3.3.2	Funciones de Green y densidad local de estados . . . . .	24
	<i>Densidad local de estados</i> . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Información cuántica aplicada a corrales elípticos</b>	<b>27</b>
4.1	Introducción . . . . .	27
4.2	Medidas de entrelazamiento cuántico . . . . .	27
4.2.1	Entropía de von Neumann . . . . .	27
4.2.2	Descomposición de Schmidt . . . . .	28
4.2.3	Caso no interactuante . . . . .	29
	<i>Entropía cuántica</i> . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Conclusiones generales</b>	<b>33</b>
<b>A</b>	<b>Método de Lanczos modificado</b>	<b>35</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>37</b>



# Capítulo 1

## Introducción a corrales cuánticos elípticos

### 1.0.1. Una breve definición de un corral cuántico

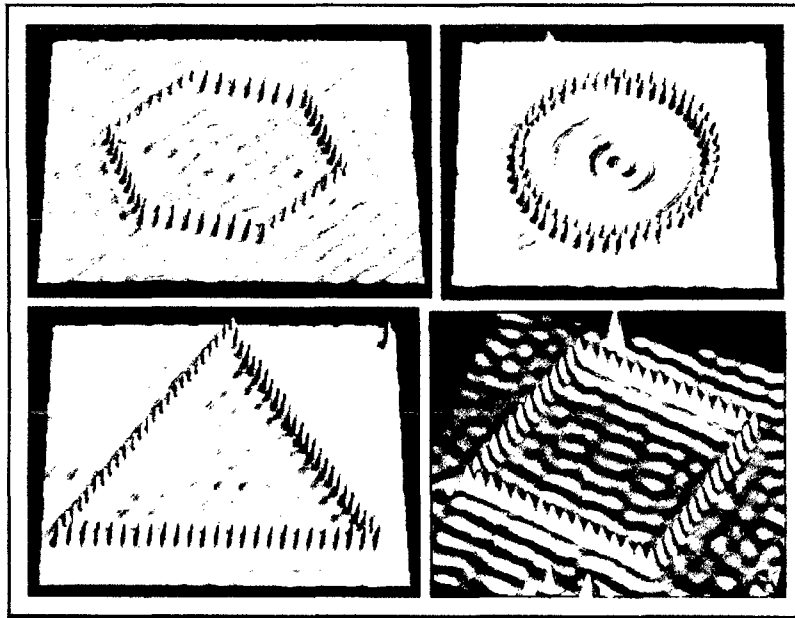
Los corrales cuánticos son nanoestructuras (del orden de los nanómetros), en las cuales átomos individuales (cobalto) o moléculas de monóxido de carbono, son colocados sobre una superficie de un metal noble (cobre, oro o plata). Para eso, se usa un microscopio de efecto túnel (scanning tunnelling microscope, STM, en inglés) con el cual se mueve un átomo a la vez hasta formar estructuras cerradas. Éstas pueden tener diversas formas (con decenas de átomos formando el corral), cuadradas, circulares, hexagonales, triangulares. Estas nanoestructuras pueden confinar electrones en su superficie, los cuales están desacoplados del bulk (interior del metal noble), y se comportan como partículas libres bidimensionales con condiciones de contorno.

En la figura 1.1 se observan diferentes formas de corrales cuánticos, exagonal (panel superior izquierdo), circular (panel superior derecho), triangular (panel inferior izquierdo), cuadrada (panel inferior derecho). La figura fue obtenida de [3].

En el presente trabajo estamos interesados en corrales de forma elíptica, debido a su propiedad de focalización, es decir, si se perturba un foco del corral elíptico, esta perturbación llegaría al otro foco con alta probabilidad, con respecto con otras ubicaciones en el corral.

### 1.0.2. Descripción de corrales elípticos cuánticos

Recientemente, gracias al avance de la nanotecnología, se han podido manipular átomos y colocarlos sobre superficies metálicas en diversas formas [1]. Esto ha sido posible, en parte, gracias al desarrollo de la microscopía de efecto túnel (STM, por sus siglas en inglés). Un experimento de interés fue realizado por Manoharan y colaboradores [2]. Ellos lograron construir corrales elípticos cuánticos con átomos de cobalto Co (usando 34 y 36 átomos, con excentricidades de  $\epsilon = 0.786$  y  $\epsilon = 0.5$  respectivamente) separados entre sí una distancia de  $d = 10\text{Å}$ , sobre la superficie (111) de cobre Cu. El eje mayor de la elipse es del orden de  $100\text{Å}$  (la distancia entre focos es  $71.3\text{Å}$ ). Posteriormente colocaron una impureza magnética en un foco y con la punta del STM pudieron detectar



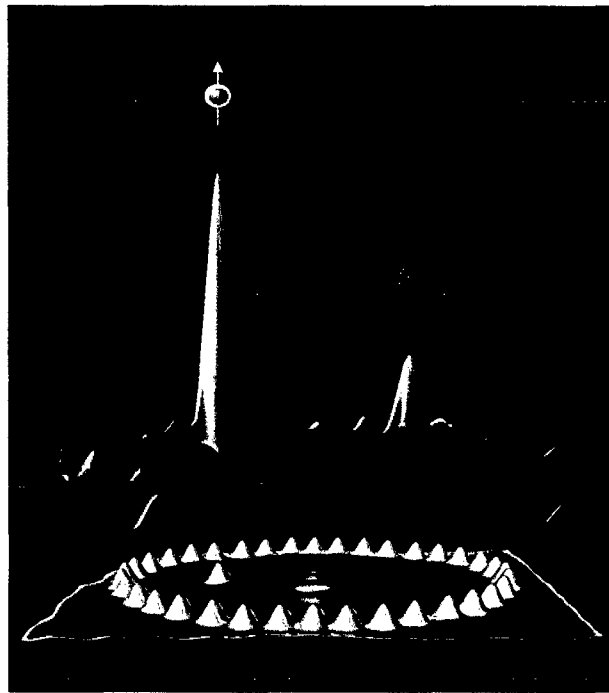
**Figura 1.1:** Diversas formas de corrales cuánticos (hexagonal, circular, triangular, cuadrada)

el efecto Kondo [2] no sólo en el foco de las impurezas, sino también en el foco vacío. Este fenómeno fue llamado espejismo cuántico, ya que a pesar de no estar presente una impureza en el foco, se observa el efecto Kondo como una consecuencia de las propiedades de focalización de la elipse. De esta manera lograron observar experimentalmente las consecuencias de los estados electrónicos confinados en el corral, ya que estos son los responsables del espejismo cuántico. En la figura 1.2 se muestra una representación gráfica del espejismo cuántico (obtenida de [3]).

El efecto Kondo es el resultado de la interacción de una impureza magnética con los electrones de conducción, los cuales orientan sus espines de forma que apantallen el momento magnético local de la impureza, formándose un estado singlete de muchos cuerpos alrededor de la impureza [4]. Este efecto físico se observa a temperaturas menores que la temperatura de Kondo ( $T_K \approx 53K$  para Co sobre una superficie de Cu(111) [2], y  $T_K \approx 88K$  para Co sobre una superficie de Cu(100), y la temperatura de Kondo para Co en el bulk es del orden de  $500K$  [5]).

En el experimento realizado en [2] reportaron que los estados electrónicos están prácticamente desacoplados de los estados del bulk, con lo cual se tiene un gas de electrones bidimensionales confinados en el corral. Éste hecho es crucial para el espejismo cuántico. Estos estados superficiales desacoplados del bulk son llamados estados de Schokley y fueron estudiados en detalle en [6].

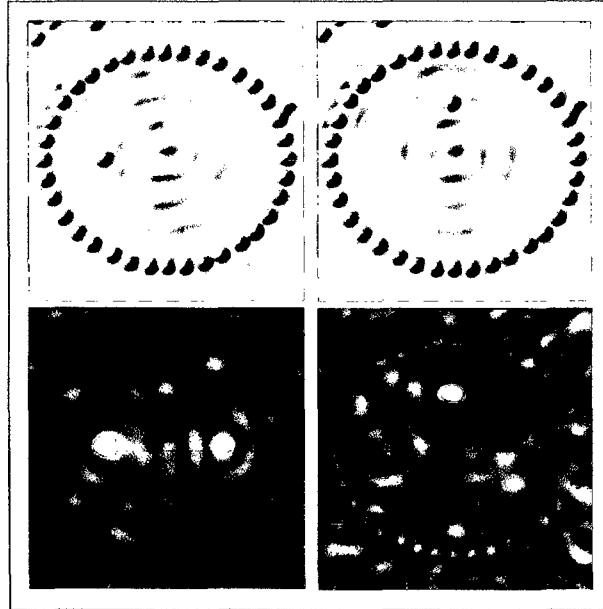
En la figura 1.3 se muestra la topografía obtenida con el STM de los corrales elípticos con una impureza en el foco izquierdo (panel izquierdo superior) y con una impureza fuera de los focos de la elipse (panel derecho superior). Los átomos de Co están representados por puntos de color verde (esferas). También se muestran la diferencia de la conductancia diferencial ( $\Delta[dI/dV]$ ) entre los corrales con impureza en su interior y los casos sin impurezas. Ésto se realizó con el objetivo de realzar la imagen Kondo en el sistema. En



**Figura 1.2:** Representación de la imagen topográfica obtenida con el STM en un corral elíptico formado con 36 átomos de Co (figura inferior), y con un átomo de Co localizado en el foco izquierdo. Se observa la densidad electrónica en el corral que tiene una mayor densidad electrónica en el foco con impureza comparada con el foco vacío (de menor magnitud que la del foco derecho). Sobre el foco izquierdo está representada la impureza de espín y sobre el derecho su imagen (“átomo fantasma”). La figura fue obtenida de [3].



el panel izquierdo inferior se observa la imagen Kondo en los dos focos de la elipse, notándose el espejismo cuántico en el foco vacío. En cambio en el panel derecho inferior sólo se observa imagen Kondo en la posición de la impureza dentro del corral, y no se observa espejismo cuántico en el sistema, porque al no estar la impureza localizada en un foco, no se produce el efecto de focalización cuántica.



**Figura 1.3:** Imagen topográfica de un corral elíptico con excentricidad  $\epsilon = 0.5$ , con 36 átomos de Co formando el corral y un átomo en el foco izquierdo de la elipse (panel izquierdo superior) [2]. En el panel izquierdo inferior se muestra  $\Delta[dI/dV]$  en el corral (diferencia entre  $dI/dV$  para los casos con y sin impureza dentro del corral) acá se observa la imagen “fantasma” del efecto Kondo en el foco vacío (foco derecho). También se muestra la imagen topográfica para la impureza dentro del corral, pero fuera de los focos (panel derecho superior). Para este caso se muestra la señal  $\Delta[dI/dV]$ , y sólo se observa Kondo en la posición de la impureza (panel derecho inferior).

El efecto de confinamiento de los corrales cuánticos en diferentes superficies metálicas (Au, Cu, Ag) ha sido estudiado intensamente tanto para una como para dos impurezas en los trabajos teóricos [7, 8, 9, 10, 11, 12]. En uno de estos trabajos se ha usado un modelo de tight binding (modelo de confinamiento fuerte) para estudiar el rol de los estados del corral en el espejismo cuántico [13]. Los autores de este trabajo usan una red triangular con parámetros realistas para el elemento de hopping. También muestran densidades de carga de diferentes estados del corral elíptico, observando que ciertas autofunciones del sistema presentan máxima proyección en los focos del corral. Notan que las autofunciones se modifican ante la presencia de una impureza en los focos del corral elíptico.

En el trabajo [12] se estudian las correlaciones de espín en corrales elípticos entre el espín de una impureza con los electrones de conducción, y también se estudian las correlaciones de espín de una impureza sobre una superficie abierta de Cu (donde los estados electrónicos superficiales están desacoplados de los estados del bulk). Los autores predicen una interacción efectiva del tipo RKKY entre las impurezas hibridizadas a

---

los electrones superficiales dentro del corral, usando para ello parámetros realistas para corrales cuánticos [2]. El modelo RKKY fue propuesto en el pasado por Ruderman, Kittel, Kasuya y Yosida (ver [14]). En este modelo los electrones itinerantes actúan como mediadores en la interacción efectiva entre las impurezas magnéticas presentes en una muestra (esta interacción es dependiente de la muestra).

Hasta ahora hemos enfatizado en las referencias la interacción de *una* impureza en un foco con los electrones confinados en corrales elípticos. En [7] y [15, 16] estudiaron las propiedades físicas de los corrales elípticos en presencia de dos impurezas magnéticas en los focos que interactúan con los electrones confinados en el corral cuántico embebido en el resto del sistema (bulk). Con tal motivo estudiaremos en la tesis dos impurezas localizadas en el corral con diversos modelos (el modelo de Kondo y el de Anderson), con el objetivo de estudiar la interacción efectiva entre las impurezas (régimen de RKKY) y estudiar también en el espacio de parámetros de nuestro sistema cuándo ocurre el efecto Kondo en cada impureza. Para esto estudiaremos diversas propiedades físicas del sistema, las cuales serán detalladas en el desarrollo de la tesis en los capítulos 3 y 4.



## Capítulo 2

# Corral cuántico elíptico no interactuante

Con el objetivo de obtener los autoestados de más baja energía de la elipse sin impurezas en los focos, en este capítulo describimos al corral con un modelo de tight-binding en la aproximación de paredes duras (barrera de potencial infinitas).

### 2.1. Modelo de pared dura (condiciones de contorno)

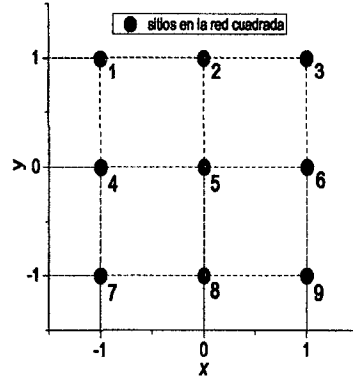
En nuestro caso, el modelo de pared dura consiste de un sistema con condiciones de contorno (elípticas), es decir, hay una barrera de potencial infinita en el contorno del sistema, con lo cual la probabilidad de encontrar las partículas fuera del sistema es cero. La barrera de potencial infinita (modelo de pared dura) en el contorno del corral elíptico, es un modelo que trata de representar a los átomos de cobalto en el contorno del corral elíptico en el experimento [2], los cuales son los responsables de confinar a electrones dentro del corral.

En todo el trabajo adoptamos una descripción simplificada del sistema basada en un modelo de tight-binding (sin espín), y definido en una red cuadrada con condiciones de contorno de la elipse (pared dura, implicando que la probabilidad de encontrar un electrón fuera del sistema es cero). El modelo de tight-binding describe muy bien a bajas energías a un sistema de electrones libres (en metales). La excentricidad de la elipse considerada es  $\epsilon = 0.6$  y el elemento de matriz de hopping  $t^*$  ( $2t^*$  es usado como unidad de energía en los capítulos 3,4). El hamiltoniano  $H_{el}$  (en la elipse) en este caso es muy sencillo y es de la forma:

$$H_{el} = -t^* \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^+ c_j, \quad (2.1)$$

donde  $c_i$ ,  $c_i^+$  representan al operador de destrucción y creación respectivamente de un electrón (spinless), en segunda cuantificación, y los índices  $i$ ,  $j$  recorren los sitios dentro de la elipse (el símbolo  $\langle \rangle$  significa que la sumatoria es sobre primeros vecinos).

Para una visualización de la aplicación del hamiltoniano en el modelo de tight-binding, veremos un ejemplo sencillo, una grilla de  $3 \times 3$ , consistente de una red cuadrada de 9 sitios. Esta red cuadrada es tomada de la parte central del corral elíptico (ver figura 2.1).



**Figura 2.1:** Representación de red cuadrada de  $3 \times 3$ . Los sitios en la red están enumerados del 1 al 9.

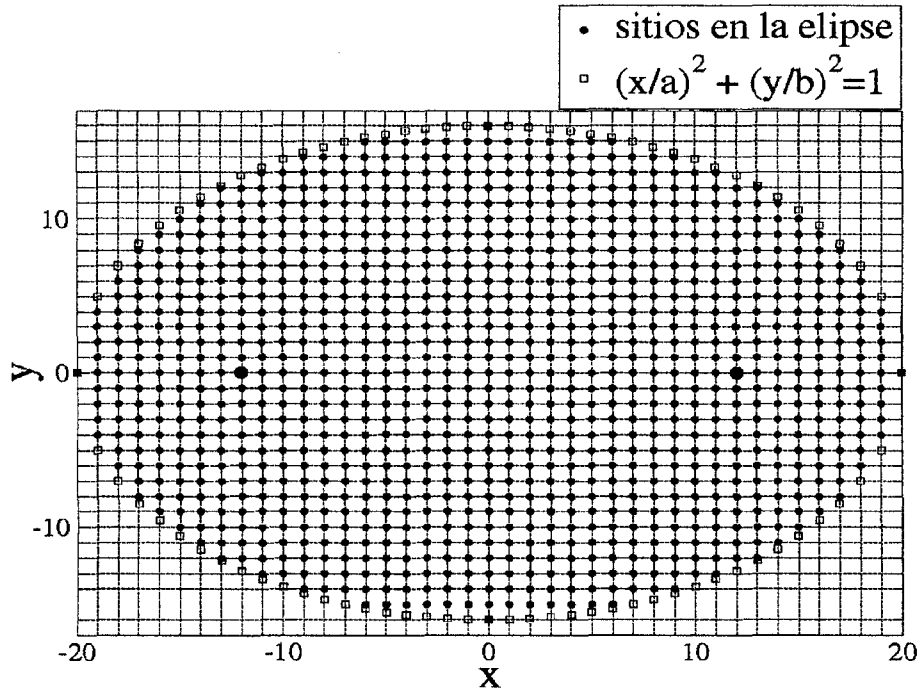
Estos sitios representan a los átomos de cobre en el experimento, y los electrones saltan de sitio a sitio, pero a primeros vecinos, es decir no hay saltos a lo largo de las diagonales. Aplicando el hamiltoniano (ecuación (2.1)) en la base de los sitios de la red cuadrada (ver figura 2.1) se tiene:

$$\begin{aligned}
 H|1\rangle &= -t^*|2\rangle - t^*|4\rangle + \dots \\
 H|2\rangle &= -t^*|1\rangle - t^*|3\rangle - t^*|5\rangle + \dots \\
 H|3\rangle &= -t^*|2\rangle - t^*|6\rangle + \dots \\
 H|4\rangle &= -t^*|1\rangle - t^*|5\rangle - t^*|7\rangle + \dots \\
 H|5\rangle &= -t^*|2\rangle - t^*|4\rangle - t^*|6\rangle - t^*|8\rangle \\
 H|6\rangle &= -t^*|3\rangle - t^*|5\rangle - t^*|9\rangle + \dots \\
 H|7\rangle &= -t^*|4\rangle - t^*|8\rangle + \dots \\
 H|8\rangle &= -t^*|5\rangle - t^*|7\rangle - t^*|9\rangle + \dots \\
 H|9\rangle &= -t^*|6\rangle - t^*|8\rangle + \dots,
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

donde  $|j\rangle$  representa a un estado en el sitio  $j$ , con  $j = 1, \dots, 9$ , los puntos centrales representan los términos faltantes en el hamiltoniano. De manera similar se aplicará el hamiltoniano dado por la ecuación (2.1) a todos los estados en los sitios del corral elíptico.

En el caso del corral elíptico, los sitios (átomos) considerados en la elipse son 993. Consideramos una grilla rectangular como se muestra en la figura 2.2, con  $x$  en el intervalo  $[-20, 20]$  y la variable  $y$  en  $[-16, 16]$  y  $\Delta x = \Delta y = 1$ . Esto fija los valores de los semiejes de la elipse en  $a = 20$  (semieje mayor) y  $b = 16$  (semieje menor), y la ecuación de la elipse está dada por  $(x/a)^2 + (y/b)^2 = 1$ . La excentricidad de la elipse es  $\epsilon = \sqrt{1 - (b/a)^2} = 0.6$ . Los puntos en la grilla para los cuales se cumple  $(x/a)^2 + (y/b)^2 \leq 1$  forman una elipse “mordida”.

Consideramos la energía local, en cada sitio igual a cero (ya que sólo representa un corrimiento constante en la banda de energía de los estados superficiales). Analizaremos las funciones de onda de más baja energía, donde la longitud de onda en el nivel de Fermi,  $\lambda_F \approx 30\text{\AA}$  [16], es más grande que la separación entre los átomos (la distancia entre



**Figura 2.2:** Representación de la superficie de Cu por una grilla rectangular con semiejes  $a = 20$  y  $b = 16$ . Los puntos azules representan a los sitios dentro del corral elíptico, y los símbolos en cuadrados son obtenidos con la ecuación de la elipse  $((x/a)^2 + (y/b)^2 = 1)$  que representa a la pared ideal del corral, es decir la posición en la cual actúa la barrera de potencial infinita.

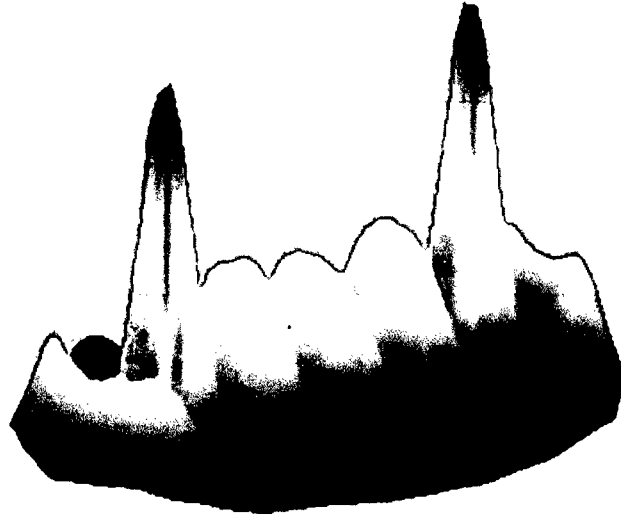
primeros vecinos para Cu(111) es  $2.55\text{\AA}$  [2]). También se conoce del experimento [2] que la separación entre los átomos de Co,  $d_c = 10\text{\AA}$ , que forman el corral es menor que la longitud de onda del nivel de Fermi  $\lambda_F > d_c$ , con lo cual se tiene poca hibridización del sistema con electrones fuera del corral y por consiguiente poco ensanchamiento de los niveles de la elipse, con lo cual el modelo de pared dura es una muy buena aproximación. Por consiguiente la distribución de los átomos en la red es irrelevante [17]. En [13] estudiaron una red triangular y no se observó ninguna discrepancia con las funciones de onda obtenidas en una red cuadrada. Para niveles de más alta energía se necesita una discretización del sistema mucho más fina. La distancia entre los focos del corral en el experimento es del orden de  $d_f \approx 70\text{\AA}$ , con lo cual podemos estimar el valor  $\Delta x$  en nuestro modelo (longitud usada en la discretización de la red) y obtenemos  $\Delta x = d_f/(2a\epsilon) \approx 70\text{\AA}/24 \approx 2.9\text{\AA}$ , y se observa que es del orden de la separación atómica de primeros vecinos en la superficie de Cu(111) ( $2.55\text{\AA}$  [2]).

Cabe resaltar que el sistema tiene solución exacta en el continuo, y las soluciones son las funciones de Mathieu [18]. Estas soluciones son similares a las obtenidas por este método dentro de la aproximación de red discreta. En la figura 2.3 se muestra la densidad de probabilidad  $|\psi_{\alpha i}|^2$ , donde  $\psi_{\alpha i}$  es la amplitud de probabilidad del autoestado  $|\alpha\rangle$  en el sitio  $i$  de la elipse. Se muestran  $|\psi_{\alpha i}|^2$  para los primeros 25 autoestados de la elipse ordenados por filas, donde están marcados los primeros autoestados de cada fila.

La energía del nivel de Fermi fue elegida en el nivel 23 (figura 2.3), cuya energía es



**Figura 2.3:** Densidad de probabilidad de los autoestados  $|\alpha\rangle$ . Está marcado el autoestado  $|23\rangle$  que será nuestro nivel de Fermi para el caso interactuante, estudiado en los próximos capítulos.



**Figura 2.4:** Densidad de probabilidad del autoestado  $|23\rangle$ . Éste será nuestro nivel de Fermi para el caso interactuante, analizado en los próximos capítulos.

similar a la energía en el experimento [2] ( $450\text{meV}$  medida desde el primer autoestado del sistema) para lo cual se observa experimentalmente similar distribución espacial de probabilidad electrónica. En el siguiente capítulo mostramos la distribución espacial del autoestado  $|23\rangle$  de la elipse sin impurezas proyectada en el plano  $x,y$ , en el modelo de pared dura. Esta configuración no es crucial para los resultados, y otras excentricidades y niveles de referencias tendrían similares resultados en la física del problema, siempre y cuando éstas tengan pesos apreciables en los focos. En todo el trabajo de tesis consideramos como escala de energía al valor  $2t^* = 1eV$  (parámetro realista obtenido de [13]).

## 2.2. Potenciales locales en los focos de la elipse

Se analizó la evolución temporal del sistema con diversas perturbaciones (potenciales locales) en los focos, en este caso el hamiltoniano del sistema es dado por la siguiente expresión:

$$H_{pert} \equiv H = H_{el} + H', \quad (2.3)$$

donde  $H_{el}$  es el hamiltoniano de la elipse no interactuante sin potenciales locales (ver ecuación (2.1)),  $H' = e_1 c_1^+ c_1 + e_2 c_2^+ c_2$  es el hamiltoniano de la perturbación en los focos;  $e_i$  es la magnitud de la perturbación en el foco  $i$ ;  $c_i$  y  $c_i^+$  son los operadores de destrucción y de creación de un electrón en el foco  $i$ , con  $i = 1, 2$ .

Los casos para los cuales se analizaron las evoluciones temporales son:

Caso 1:  $e_1 = -1$ ;  $e_2 = 0$  (potencial local atractivo).

Caso 2:  $e_1 = 1$ ;  $e_2 = 0$  (potencial local repulsivo).

Se utilizó el autoestado 23 como el nivel de Fermi en este trabajo (es similar al estado usado en [2]), y tiene una densidad de probabilidad alta en los focos.



Realizando la evolución temporal del estado  $|\Psi_0\rangle$  en la base de los autoestados de la elipse perturbada  $|\nu\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi_0\rangle = e^{-iHt} \sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu | \Psi_0 \rangle = \sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} |\nu\rangle \langle \nu | \Psi_0 \rangle \quad (2.4)$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} a_{\nu} |\nu\rangle$$

Donde:  $a_{\nu} = \langle \nu | \Psi_0 \rangle$ ;

$|\Psi_0\rangle$  autoestado 23 de la elipse sin perturbar.

### 2.2.1. Proyección sobre los estados $|\alpha\rangle$

Calculamos el módulo al cuadrado de la proyección de la función de onda perturbada sobre los estados no perturbados  $|\alpha\rangle$  para obtener los estados más relevantes de la forma:  $|a_{\alpha}(t)|^2 = |\langle \alpha | \Psi(t) \rangle|^2$ . El cálculo se realizó numéricamente para los 2 casos de perturbaciones en los focos.

En la figura 2.5, se muestran las energías de los primeros 23 niveles, para diversas perturbaciones en el foco 1. Se observa que la mayoría de niveles presenta un corrimiento al aplicarse un potencial local en el foco 1. Estos valores serán usados en la ecuación 2.4, para obtener la evolución de la función de onda.

### 2.2.2. Resultados

#### A.- Caso 1: $e_1 = -1$ ; $e_2 = 0$

En la figura 2.6, se observa la evolución temporal del autoestado 23. Para  $t=0$ , la densidad de probabilidad en ambos focos es la misma (la función de onda es simétrica).

En el foco 2 la densidad de probabilidad  $|\psi_i|^2$  (con  $i = 2$ ) se mantiene constante (ver inset de la figura 2.6) hasta  $t_0 \approx 20 \approx 1/(E_{23} - E_{18})$ , luego tiene un comportamiento aproximadamente periódico. En cambio en el foco 1 la variación empieza inmediatamente puesta la perturbación. Podemos interpretar que la perturbación realizada en un foco demora un tiempo finito en llegar al otro foco ( $t_0 \approx 20$ ). Se observa que la densidad de probabilidad en el foco 1 aumenta y luego empieza a oscilar, debido a que se colocó un potencial negativo en el foco, y atrae al electrón no interactuante.

Para tiempos relativamente grandes la función de onda en el foco 1 y el foco 2 cambia casi periódicamente (ver figura 2.3), notando que tienen una frecuencia en común, donde para ese caso la función de onda toma un valor máximo en el foco 1 y un valor mínimo en el foco 2 y van alternándose las variaciones.

En este caso la perturbación es no simétrica, por lo tanto no conserva la simetría de las funciones de onda que intervienen en la evolución temporal, pero mezcla funciones de onda con mucho pesos en los focos. Las proyecciones de la función de onda evolucionada

Nivel	$E (e_1=0, e_2=0)$	$E (e_1=-1, e_2=0)$	$E (e_1=1, e_2=0)$
1	-1,99103	-2,02768	-1,9906
2	-1,97974	-1,98893	-1,97825
3	-1,97481	-1,97481	-1,97481
4	-1,96327	-1,97267	-1,96087
5	-1,95951	-1,95951	-1,95951
6	-1,94883	-1,95015	-1,94881
7	-1,94218	-1,94856	-1,94011
8	-1,93966	-1,93966	-1,93965
9	-1,92781	-1,92879	-1,92763
10	-1,91711	-1,92232	-1,91612
11	-1,91572	-1,91572	-1,91572
12	-1,914	-1,914	-1,914
13	-1,90112	-1,90623	-1,90028
14	-1,88904	-1,89191	-1,88871
15	-1,88823	-1,88823	-1,88823
16	-1,88761	-1,88761	-1,88761
17	-1,87048	-1,88268	-1,87048
18	-1,86899	-1,87048	-1,86655
19	-1,85732	-1,85752	-1,85732
20	-1,85715	-1,85732	-1,85708
21	-1,85681	-1,85681	-1,85681
22	-1,8398	-1,85019	-1,83979
23	-1,83126	-1,83978	-1,82666

**Figura 2.5:** Tabla con las energías  $E$  de los primeros 23 niveles para los casos, con potenciales en los focos  $e_1 = 0, e_2 = 0$  (sin perturbar);  $e_1 = -1, e_2 = 0$  (potencial atractivo);  $e_1 = 1, e_2 = 0$  (potencial repulsivo).

en el tiempo sobre los estados más relevantes  $|\alpha\rangle$ , es decir las que tienen valores de proyecciones más altas ( $|a_\alpha(t)|^2 > 0.1$ ) son los estados: 18 (antisimétrica), 23 (simétrica) y 29 (antisimétrica); lo cual indica que podemos expresar la función de onda en términos de estos estados más relevantes (despreciando los estados  $|\alpha\rangle$  restantes).

Realizamos una estimación del tiempo  $t_0$  (tiempo que demora en llegar la información de un foco al otro), y para ello usamos parámetros usados en [2, 16] (distancia entre los focos  $70\text{\AA}$ , área del corral  $85.7\text{nm}^2$ ,  $t^*=1eV$ ), estimando  $t_0$  para el cobre (Cu) tenemos:  $t_0 = \frac{\hbar}{(E_{23}-E_{18})} = 0.87 \times 10^{-14} \text{s}$ , ( $\hbar = 6.58 \times 10^{-16} \text{eV}\cdot\text{s}$ ,  $E_{23} - E_{18} = 0.0377(2t^*) = 75 \text{meV}$ ).

Estimando la velocidad de Fermi de los estados superficiales del Cu, teniendo en cuenta el tiempo ( $t_0$ ) en que una señal llega de un foco a otro, tenemos:  $v_F = \frac{70 \times 10^{-8} \text{m}}{0.87 \times 10^{-14} \text{s}} = 0.8 \times 10^8 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$  (dentro del orden que en referencia [16]).

Es interesante comparar los resultados anteriores con los obtenidos en un gas bidimensional en semiconductores formado por el confinamiento de electrones en la interfase de 2 semiconductores [19, 20] (gas bidimensional).

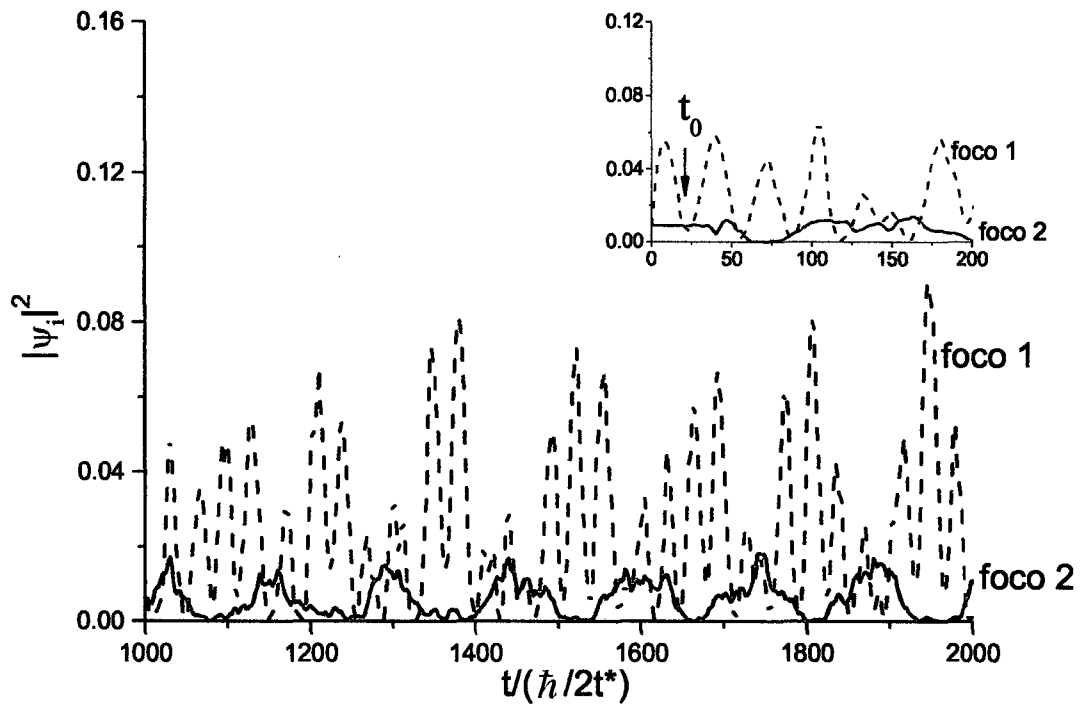
Hacemos una estimación del tiempo que demoraría en transmitirse la información de un foco a otro ( $t_0$ ). Para ello necesitamos una relación para el hopping. Usando el modelo de "tight binding" para obtener el valor hopping (ver [21]) en el fondo de la banda en el semiconductor tenemos:  $t_s = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2}$  (el valor estimado del hopping en un semiconductor), la masa efectiva del electrón en el semiconductor  $m^* = 0.07m_e$  [19, 20], "a" es el parámetro de red, luego  $t_s = \frac{\hbar^2}{(0.07)(2m_e a^2)} = 14.28t^*$ , donde  $t^*$  es el hopping en un metal típico. Calculamos la diferencia de energías de los niveles<sup>1</sup> involucrados en el cálculo de  $t_0$  ( $E_{23} - E_{18} = 0.0377(2t^*)$ ),  $\Delta E = 0.0337t_s = 0.00337(14.28t^*) \approx 1eV$ , obteniéndose  $t_0 \approx 0.06 \times 10^{-14} \text{s}$ . Este tiempo daría una velocidad de Fermi  $v_F \approx 1 \times 10^9 \text{cm/s}$ .

Estimando la densidad electrónica para un gas bidimensional (en semiconductores), tenemos:  $\rho = \frac{N_e}{A}$ , donde  $N_e$  es el número de electrones hasta el nivel de Fermi ( $N_e = 46$ ),  $A$  es el área del corral elíptico ( $A = 85.7\text{nm}^2$ ), obteniendo  $\rho = \frac{46}{85.7\text{nm}^2} = 5.4 \times 10^{13}$ . Esta densidad es un poco mayor que las densidades típicas de heteroestructuras semiconductoras [19], [22], por lo que para estos sistemas y esta geometría serán relevantes niveles más bajos.

### B.- Caso 2: $e_1 = 1$ ; $e_2 = 0$

En la figura 2.7 se muestra la evolución temporal del estado ( $|\alpha\rangle$  estado 23), para la perturbación en los focos de  $e_1=1$ ;  $e_2=0$ , es semejante al caso A (salvo la ausencia de frecuencias altas), pero en este caso la densidad de probabilidad en el foco 1 disminuye debido a que se colocó un potencial positivo en dicho foco, y por lo tanto repele electrones en dicho foco, mientras que en el foco 2, la densidad se mantiene constante hasta un tiempo  $t_0 \approx 20 \approx 1/(E_{23}-E_{18})$  (ver inset de la figura 2.7, igual al caso A), y luego empieza a variar casi periódicamente como en el caso A. Para tiempos grandes se observa que la función de

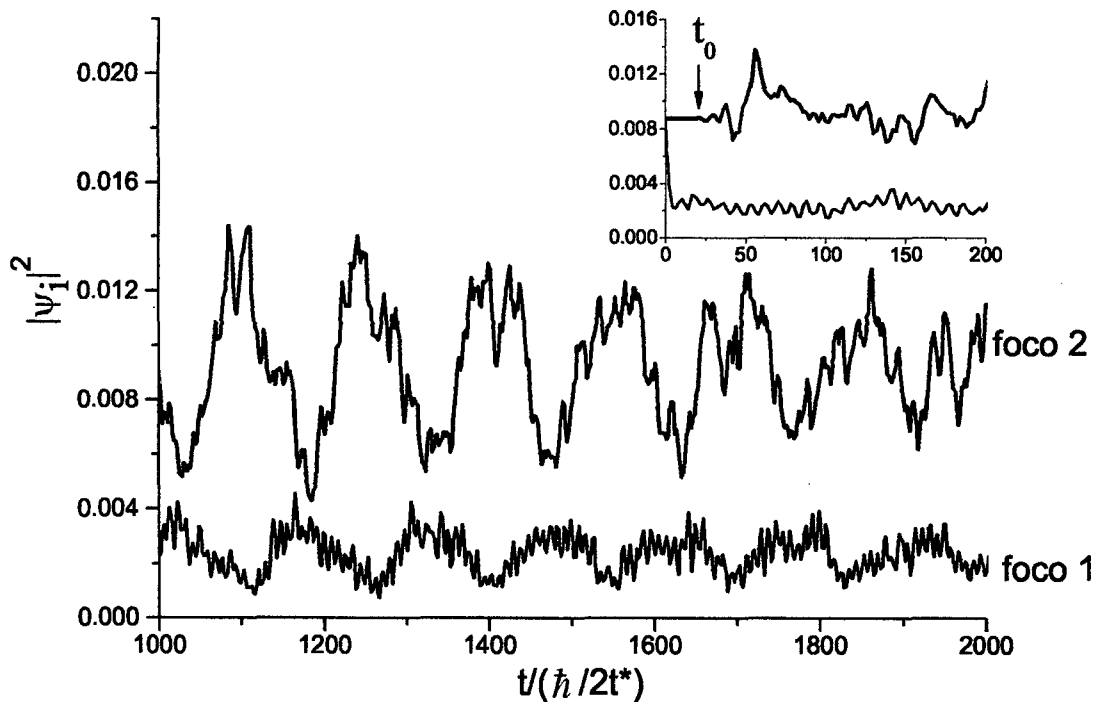
<sup>1</sup> La diferencia de energía entre los niveles mas relevantes ( $E_{23} - E_{18} \approx 1eV \approx 10^4 K$ ) es mucho mayor que la temperatura de Kondo de este sistema 53K [16].



**Figura 2.6:** Densidad de probabilidad de la función de onda en los focos de la elipse perturbada vs. tiempo ( $e_1 = -1$ ;  $e_2 = 0$ ). Se observa la densidad de probabilidad para tiempos desde 1000 hasta 2200 y en el inset la densidad de probabilidad en ambos focos de la elipse para tiempos cortos ( $t \leq 00$ ).  $i=1$  (foco1);  $i=2$  (foco2).

onda en cada foco tienen una frecuencia en común para el cual la densidad de probabilidad en un foco es máxima y en el otro mínima y luego se alternan.

La perturbación aplicada no conserva la simetría de las funciones de onda que se mezclan y la proyección de la función de onda evolucionada en el tiempo sobre los estados  $|\alpha\rangle$  tienen mayor peso ( $|a_\alpha(t)|^2 > 0.1$ ) para los estados: 18 (antisimétrica), 23 (simétrica) y 29 (antisimétrica).



**Figura 2.7:** Densidad de probabilidad de la función de onda en los focos de la elipse perturbada vs. tiempo ( $e_1=1$ ;  $e_2=0$ ). Se observa la densidad de probabilidad para tiempos desde 1000 hasta 2200 y en el inset la densidad de probabilidad en ambos focos de la elipse para tiempos cortos ( $t \leq 100$ ).  $i=1$  (foco1);  $i=2$  (foco2).

# Capítulo 3

## Corral elíptico cuántico con dos impurezas

### 3.1. Algunas definiciones útiles

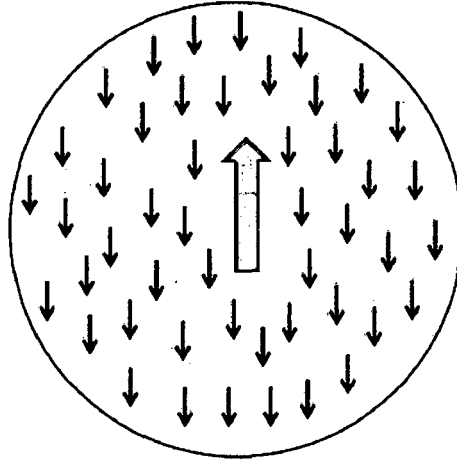
En esta sección describiremos brevemente el régimen Kondo y el régimen RKKY.

#### 3.1.1. Régimen Kondo

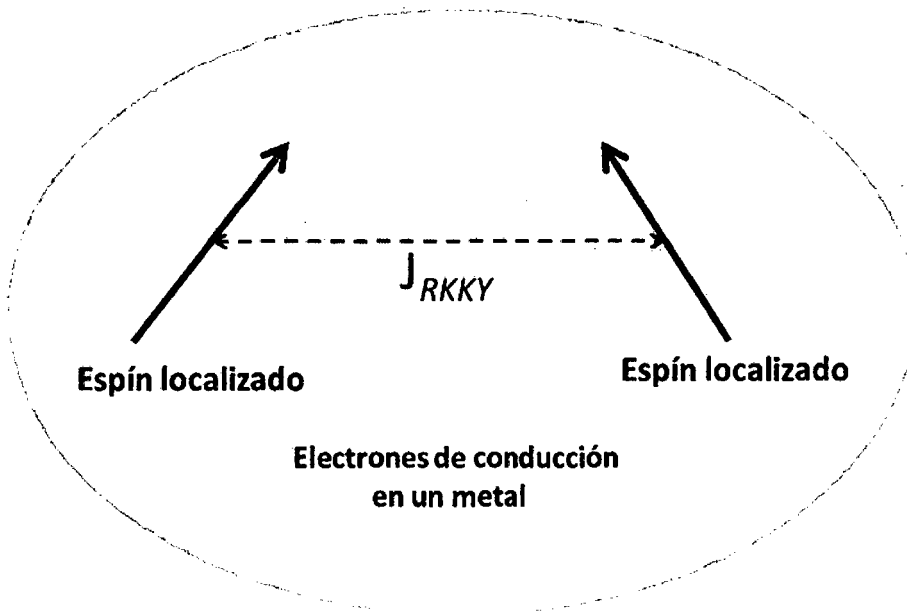
El efecto Kondo (régimen Kondo) ocurre cuando una impureza magnética (con espín  $S=1/2$ ) está localizada dentro de un metal, y los electrones libres dentro del metal se ordenan para apantallar al espín de la impureza magnética, formando un estado total de espín  $S=0$ . Los electrones en este caso tienen un comportamiento colectivo y se comportan como un solo objeto. Este fenómeno ocurre por debajo de una temperatura, llamada temperatura de Kondo. En la figura 3.1 se muestra una representación gráfica del efecto Kondo, en la cual los electrones libres en un metal se organizan para apantallar el espín de una impureza magnética inmersa en un metal (representada por una flecha apuntando hacia arriba, y los espines de los electrones están representadas por flechas pequeñas apuntando hacia abajo).

#### 3.1.2. Régimen RKKY

La interacción RKKY, llamada así por Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (Régimen RKKY), se refiere a un mecanismo, donde dos impurezas magnéticas inmersas, separadas a distancias mayores a la separación atómica (en un metal) experimentan una interacción efectiva. Esta interacción efectiva es mediada por los electrones de conducción del metal (ver en la figura 3.2 la representación de la interacción RKKY). Esta interacción de intercambio indirecta fue originalmente propuesta por Ruderman y Kittel; y después Kasuya y Yosida dieron la teoría para explicar esta interacción efectiva entre las impurezas. Con la mecánica cuántica, usando la teoría de perturbaciones a segundo orden se puede explicar la interacción efectiva entre las impurezas magnéticas.



**Figura 3.1:** Representación gráfica del efecto Kondo. Los electrones libres de un metal tratan de apantallar el espín de una impureza magnética inmersa en el metal (representada por la flecha apuntando hacia arriba). Los espines de los electrones están representados por las flechas pequeñas.



**Figura 3.2:** Representación gráfica de la interacción RKKY entre dos impurezas magnéticas, en un metal, mediada por los electrones de conducción del metal.

## 3.2. Introducción

Los recientes avances en las técnicas de fabricación de sistemas nanoscópicos han ayudado a revelar una gran variedad de fenómenos físicos. Esto se debe, en parte, a que es posible la manipulación de átomos con la ayuda del microscopio de efecto túnel, STM (Scanning Tunneling Microscope, por sus siglas en inglés) [1]. Un ejemplo de un fenómeno interesante fue la observación del *espejismo cuántico* [2]. Este efecto se observa en sistemas nanoscópicos llamados corrales cuánticos donde la función de onda de los electrones está confinada en una región por medio de una barrera que está formada de átomos (por ejemplo átomos de cobalto), encerrando una región de una superficie de Cu(111).

Los corrales cuánticos son construidos colocando átomos con la ayuda del STM sobre una superficie limpia de un metal noble (libre de impurezas) [23, 24]. En recientes experimentos, Manoharan y colaboradores [2] fueron capaces de construir corrales elípticos con átomos de Co sobre una superficie de Cu(111). La superficie de Cu(111), tiene una banda de estados superficiales desacoplados de los estados del bulk (electrones superficiales con una relación de dispersión de electrón casi libre [25]), la cual puede ser representada como un gas de electrones bi-dimensional confinado en el corral. El nivel de Fermi está a 450 meV por arriba del fondo de la banda de los estados de superficie.

Un número de trabajos teóricos ha analizado estos experimentos con una o más impurezas, y considerando diferentes configuraciones [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]. También se puede ver un estudio detallado sobre corrales cuánticos en [16, 17]. En la referencia [12] fue sugerido que, como una consecuencia de las propiedades de focalización de los corrales cuánticos elípticos, dos impurezas localizadas en cada foco del sistema podrían interactuar fuertemente. Tal predicción ha sido sustentada por Stepanyuk y colaboradores en [15]. Ellos reportaron resultados de cálculos de primeros principios para la interacción de intercambio entre dos impurezas magnéticas localizadas en cada foco del corral. Consideraron diferentes tipos de átomos magnéticos, localizados en los focos de la elipse, de tamaños diferentes.

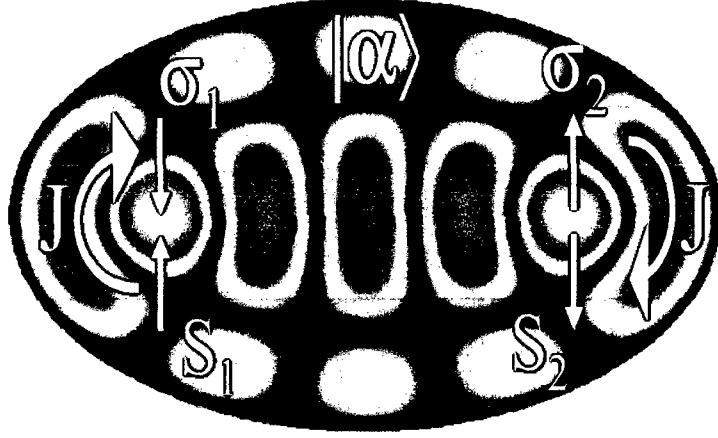
En el presente capítulo, estudiaremos dos impurezas de espín  $S = 1/2$  interactuantes vía un término de superintercambio con los electrones en los focos del corral elíptico. Este problema de muchos cuerpos fue tratado numéricamente y analizamos funciones de correlación de espín y la densidad local de estados en los focos (sección 3.3).

## 3.3. Modelo de dos impurezas de Kondo

En esta sección estudiamos el caso más interesante del efecto de las propiedades de focalización de la elipse sobre la interacción de dos espines interactuantes  $S = 1/2$  que interactúan vía un término de superintercambio con los electrones en la elipse [27, 28, 29, 30, 31].

En la figura 3.3 se observa una representación de las interacciones en el sistema superpuesta sobre un autoestado de la elipse no interactuante  $|\alpha\rangle = |23\rangle$  (nivel de Fermi,





**Figura 3.3:** Módulo al cuadrado del autoestado en el nivel de Fermi  $|\psi_{23}|^2$  para la elipse sin impurezas y con excentricidad  $\epsilon = 0.6$ . Las zonas claras y oscuras representan alta y baja densidad de probabilidad electrónica respectivamente. Las líneas oscuras representan las líneas nodales del autoestado electrónico  $|\alpha\rangle = |23\rangle$ , el cual tiene alta densidad de probabilidad en los focos de la elipse. También son representados los espines de las impurezas en los focos  $S_1$  y  $S_2$  que interactúan con los espines  $\sigma_i$  vía una interacción de superintercambio  $J$ .

similar al del experimento [2]). Las zonas claras en la figura indican alta densidad de probabilidad, y las zonas oscuras indican el caso opuesto. El hamiltoniano del sistema es el siguiente:

$$H = H_{el} + J(\vec{S}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 + \vec{S}_2 \cdot \vec{\sigma}_2); \quad (3.1)$$

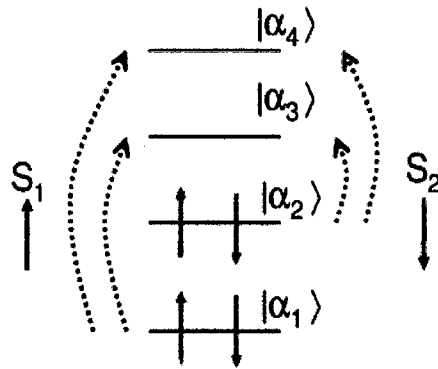
con:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{\sigma}_i = S_i^z \sigma_i^z + \frac{1}{2}(S_i^+ \sigma_i^- + S_i^- \sigma_i^+), \quad (3.2)$$

y  $\sigma_i^+ = c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}$ ,  $\sigma_i^z = (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})/2$ , donde  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$  es el operador número con espín  $\sigma$  y  $c_{i\sigma}$  el operador de destrucción de un electrón con espín  $\sigma$  en el foco  $i$  de la elipse ( $i = 1, 2$ ). En la base de los autoestados  $|\alpha\rangle$  de la elipse, estos operadores locales pueden ser expandidos de la forma:  $c_{i\sigma} = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha i} c_{\alpha\sigma}$ , donde  $c_{\alpha\sigma}$  es el operador de destrucción del estado  $|\alpha\rangle$  con espín  $\sigma$  y  $\Psi_{\alpha i}$  es la amplitud del estado  $|\alpha\rangle$  en el foco  $i$ .  $H_{el}$  es el hamiltoniano de la elipse sin impurezas, descrito en el capítulo anterior (ver ecuación (2.1) del capítulo 1) al cual le hemos agregado el espín  $\sigma$  en forma trivial. Podemos reescribir el hamiltoniano no interactuante en la elipse de la forma:  $H_{el} = -t^* \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i^+ \sigma} c_{j\sigma}$ . Consideramos una interacción de superintercambio antiferromagnética,  $J > 0$  a menos que indiquemos lo contrario. En esta base, los operadores de espín para los electrones pueden ser expresados como:

$$\begin{aligned} \sigma_i^z &= \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \Psi_{\alpha_1 i}^* \Psi_{\alpha_2 i} (c_{\alpha_1 \uparrow}^+ c_{\alpha_2 \uparrow} - c_{\alpha_1 \downarrow}^+ c_{\alpha_2 \downarrow}) \\ \sigma_i^+ &= c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} = \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \Psi_{\alpha_1 i}^* \Psi_{\alpha_2 i} c_{\alpha_1 \uparrow}^+ c_{\alpha_2 \downarrow} \\ \sigma_i^- &= c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} = \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \Psi_{\alpha_1 i}^* \Psi_{\alpha_2 i} c_{\alpha_1 \downarrow}^+ c_{\alpha_2 \uparrow} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Obtuvimos numéricamente el estado fundamental  $|\gamma_0\rangle$  de  $H$ , usando el método de Lanczos [32] (ver apéndice A), para diversos llenados en la elipse (par e impar) y diversos valores de  $J$ . El nivel de Fermi ( $E_F$ ), es similar al del experimento [2]. Si observamos la ecuación (3.3), notamos que necesitaríamos todos los estados  $|\alpha\rangle$  de la elipse para localizar al electrón itinerante en el foco  $i$ , lo cual numéricamente es imposible, debido a que el espacio de Hilbert crece exponencialmente con el número de niveles considerados (el espacio de Hilbert más grande que hemos estudiado es del orden de  $10^6$  estados). El número de niveles en la elipse obtenido con el modelo de pared dura es del orden de 1000 (ver sección 2 del capítulo 1), y por limitaciones numéricas sólo consideramos hasta 10 niveles electrónicos  $|\alpha\rangle$  en la elipse. El máximo número de electrones considerados es  $N_e = 12$ . A pesar de tener tamaño finito más adelante veremos que, podemos estudiar el sistema en forma satisfactoria. En este caso sólo consideramos los estados  $|\alpha\rangle$  con alta densidad de probabilidad en los focos de la elipse, y que estén cercanos en energía al nivel de Fermi. Para la elección de dichos niveles utilizamos un criterio, que consiste en considerar a los estados  $|\alpha\rangle$  con valor más alto de  $P_{\alpha_n} = \left| \frac{\psi_{\alpha_n i} \psi_{\alpha_n R}^*}{E_{\alpha_n} - E_{\alpha_R}} \right|$ , donde  $\psi_{\alpha_n i}$  es la proyección del estado  $|\alpha_n\rangle$  en el foco  $i$ ,  $E_{\alpha_n}$  es la energía del estado  $|\alpha_n\rangle$ , y  $|\alpha_R\rangle$  es el último nivel lleno para llenado par (o el nivel de Fermi, para llenado impar) y con  $n \neq R$ .  $|\alpha\rangle$  son estados pares o impares respecto del eje menor de la elipse ( $\psi_{\alpha 1} = \pm \psi_{\alpha 2}$ ). En general la cantidad de estados escogidos de simetría par es casi la misma que los estados de simetría impar. El criterio usado para la elección de los niveles relevantes a considerar en la ecuación (3.3) no es único y se podrían considerar otros criterios en su reemplazo. Con este criterio escogimos los estados más cercanos al nivel de Fermi con mayor peso en los focos (y que se hibridizan más con los espines  $S_1$  y  $S_2$ ).



**Figura 3.4:** Representación gráfica de los procesos involucrados en  $H$  (ver ecuaciones 3.1 y 3.3). Consideramos 4 partículas y 4 niveles  $|\alpha_n\rangle$  de la elipse en el sistema ( $n = 1, 2, 3, 4$ ). Las flechas a trazos indican el proceso de destruir un electrón en un nivel ocupado y crearlo en otro desocupado.  $S_1$  y  $S_2$  representan los espines de las impurezas.

Cabe resaltar que la excentricidad de la elipse se fijó en  $\epsilon = 0.6$  (para más detalles de la elección de esta excentricidad ver sección 2 del capítulo 1). Se puede notar que los términos del hamiltoniano  $H$  dado por la ecuación (3.1) mezclan todos los estados  $|\alpha\rangle$  (mezcla de todos con todos). En la figura 3.4 se observa una representación gráfica de los procesos involucrados en  $H$ , donde se destruye un electrón en un nivel ocupado y se

crea en cualquier nivel desocupado (ver ecuación (3.3)). En la figura 3.4 consideramos a manera de ejemplo, 4 partículas y 4 niveles  $|\alpha_n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) de la elipse no interactuante. También están representados los espines de las impurezas como  $S_1$  y  $S_2$ .

### Matriz hamiltoniana para 3 niveles en la elipse

Para resolver la matriz hamiltoniana para la parte interactuante, se consideraron primero para 2 electrones itinerantes en la elipse (llenado par) y 3 niveles en la elipse, y se escogió el subespacio donde la componente  $z$  total del espín es cero. En total son 24 estados. Debido a la invariancia rotacional de  $H$ , este subespacio incluye el estado fundamental cualquiera sea el valor del espín total (para número par de electrones). A continuación se muestran 4 estados generados con  $S_z = 0$ . Los demás estados son generados como combinaciones de los espines en los niveles de la elipse. En la representación los espines en los extremos son las impurezas localizadas en los focos, y los círculos corresponden a los niveles electrónicos en la elipse:  $|\uparrow\downarrow \bigcirc \bigcirc \downarrow\rangle$ ,  $|\downarrow\uparrow \bigcirc \bigcirc \uparrow\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow \downarrow \bigcirc \uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\uparrow \uparrow \bigcirc \downarrow\rangle$ .

Con esa base se resolvió la matriz hamiltoniana, obteniéndose los autovalores de la energía y sus respectivos autoestados para diferentes valores de  $J$  (se diagonalizó de manera exacta).

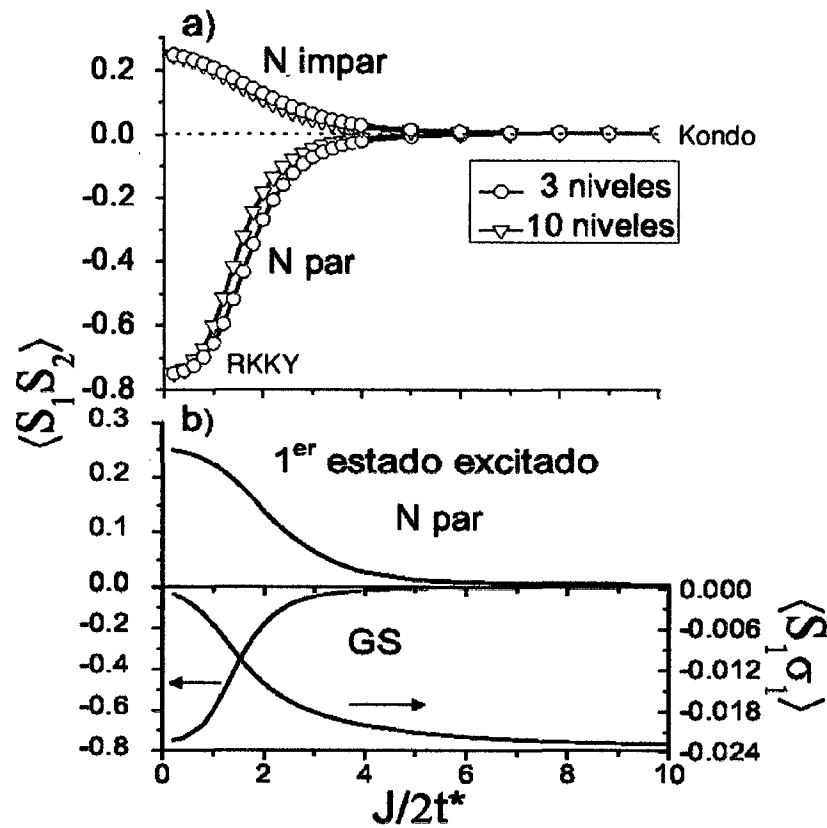
Para 3 electrones itinerantes en la elipse (número impar), se generaron los estados en el subespacio  $S_z = -1/2$ , a partir de los siguientes:  $|\uparrow\uparrow\downarrow \downarrow \bigcirc \downarrow\rangle$ ,  $|\downarrow\uparrow\downarrow \downarrow \bigcirc \uparrow\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow\rangle$ .

Los 3 niveles de la elipse sin perturbación utilizados son: 18, 23 y 29 debido a que tienen gran peso en los focos.

Para sistemas con número más grande de partículas, la matriz hamiltoniana se diagonalizó usando el método de Lanczos [32] (ver apéndice A).

#### 3.3.1. Correlaciones de espín

Una de las consecuencias más importantes sobre las impurezas de espín en la presencia del corral elíptico es que la correlación entre las impurezas se ve aumentada cuando ellas se encuentran localizadas en los focos comparado con impurezas sobre una superficie abierta (esto fue observado en el trabajo teórico en [12]). Por ejemplo, si analizamos la función de correlación de espín entre las impurezas en el estado fundamental  $\langle\gamma_0|\vec{S}_1\vec{S}_2|\gamma_0\rangle$  (el procedimiento para el cálculo del estado fundamental fue descrito en la subsección anterior), encontramos que ellas forman un estado singlete o triplete para  $J$  chicos (respecto de la escala de energía antes mencionada  $2t^*$ ), y llenado par o impar respectivamente (ver figura 3.5a). En este caso decimos que el sistema se encuentra en el régimen de RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida), en el cual los electrones actúan como mediadores de una interacción efectiva entre las impurezas [14]. Una interacción ferromagnética entre las impurezas localizadas para llenado impar fue encontrado en [7]. Para valores grandes de  $J$  las impurezas se descorrelacionan, tanto para llenado par como



**Figura 3.5:** a) Correlación de espín entre las impurezas localizadas en los focos en el estado fundamental para número par e impar de electrones y diferentes niveles en la elipse. b) Panel superior:  $N_e$  par, para el primer estado excitado (espín total  $S = 1$ ), se observa el carácter triplete entre los espines localizados para valores de  $J$  chicos. Panel inferior: función de correlación de espín entre el espín localizado  $S_1$  y el espín del electrón itinerante  $\sigma_1$ ; comparado con la correlación  $\langle S_1 S_2 \rangle$  en el estado fundamental ( $N_e$  par). Para valores de  $J$  chicos los espines localizados están en un estado singlete y descorrelacionados de los electrones itinerantes. Para valores grandes de  $J$ , estos espines se desacoplan mientras surge una interacción local con los electrones itinerantes.

impar. En este caso las impurezas se encuentran en un régimen de Kondo, en el que los espines de los electrones apantallan localmente el espín de cada impureza [4]). El resultado es débilmente dependiente del número de niveles considerados, tal como se observa en la figura 3.5a

También es interesante analizar la correlación de espín en un foco entre el espín localizado  $S_1$  y el espín del electrón itinerante  $\sigma_1$ . En la figura 3.5b, observamos que esta correlación antiferromagnética aumenta ante el incremento de  $J$ , mientras  $S_1$  y  $S_2$  se descorrelacionan. Por lo tanto, cuando  $J$  aumenta la correlación local entre un espín localizado y los electrones en un foco aumenta y debería crecer hasta el valor de un estado singlete de  $-0.75$ . Sin embargo encontramos un valor absoluto más bajo debido a la finitud del sistema (consideramos hasta 10 niveles electrónicos en la elipse, el nivel de Fermi corresponde al nivel  $|23\rangle$ ). En este límite son necesarios más estados  $|\alpha\rangle$  para formar el estado localizado en los focos (ver ecuación (3.3), donde los operadores fermiónicos en los focos involucran los estados extendidos de la elipse).

### 3.3.2. Funciones de Green y densidad local de estados

En esta sección calculamos la función respuesta a una excitación de espín realizada en el foco 1 [33]. En particular usaremos este formalismo, para calcular la densidad local de estados en los focos. La función respuesta  $C$  al operador  $A$ , está dada por la expresión [33, 34, 35]:

$$C(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im}G(\omega + i\eta + E_0) \quad (3.4)$$

con:

$$G(z) = \langle \psi_0 | A^+ (z - H)^{-1} A | \psi_0 \rangle. \quad (3.5)$$

En la expresión anterior  $G$  es la función de Green,  $\omega$  es la energía,  $E_0$  es la energía del estado fundamental,  $\eta$  es el ancho de la lorentziana y  $|\psi_0\rangle$  es el estado fundamental del sistema.

La función de Green  $G(z)$  se expresa en la representación de fracción continua, para lo cual se usa el procedimiento de Lanczos (ver Lanczos [32]). Se usa  $A|\psi_0\rangle = |f_0\rangle$  como un vector inicial en el método de Lanczos y se genera de manera recursiva una base ortogonal completa. Usando el procedimiento de Lanczos se tiene:

$$|f_{n+1}\rangle = H|f_n\rangle - a_n|f_n\rangle - b_n^2|f_{n-1}\rangle; \quad (3.6)$$

se tiene  $n \geq 0$ ;  $b_0 = 0$  (para inicializar el procedimiento); y  $\langle f_n | f_{n'} \rangle = 0$  para  $n \neq n'$ . Por consiguiente  $H$  es tridiagonal en esta base. Los coeficientes  $a_n$  y  $b_n$  son obtenidos de la forma:

$$a_n = \frac{\langle f_n | H | f_n \rangle}{\langle f_n | f_n \rangle}; \quad (3.7)$$

$$b_n = \frac{\langle f_n | f_n \rangle}{\langle f_{n-1} | f_{n-1} \rangle}; \quad (3.8)$$

El resolvente de  $G_A(z)$  se puede escribir como una fracción continua [36] de la forma:

$$G(z) = \frac{\langle \psi_0 | A^\dagger A | \psi_0 \rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - \dots}}} \quad (3.9)$$

La expresión anterior, en general, converge antes de recorrer toda la base  $\{|f_n\rangle\}$  y el criterio de convergencia se elige cuando  $b_n$  tiende a cero ( $< 10^{-10}$ ) o cuando  $a_n$  y  $b_n$  son lo suficientemente grandes ( $> 10^{10}$ ).

### Densidad local de estados

En esta subsección veremos cuándo el sistema se encuentra en el régimen de Kondo. Para ello analizaremos una propiedad importante en el sistema. En este caso, podemos analizar la densidad local de estados electrónica en uno de los focos  $j$  ( $j = 1, 2$ ). La densidad local de estados, queda definida por las expresiones [33, 34, 35] (en la sección 3.3.2 definimos todas las herramientas a usar):

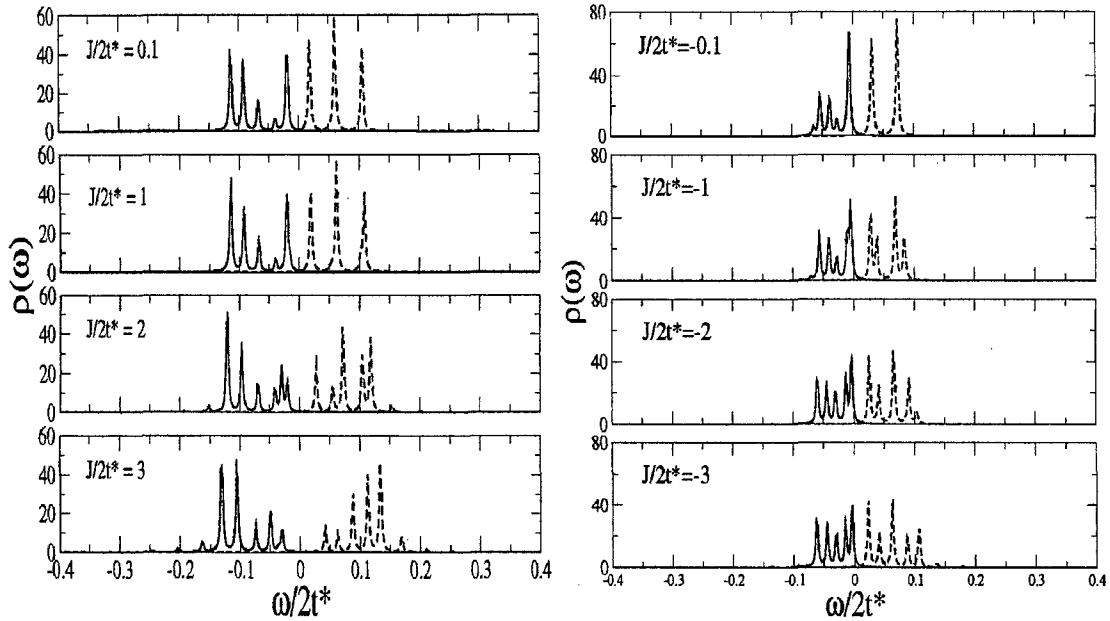
$$\begin{aligned} \rho_j(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} G(\omega + i\eta + E_0), \\ \rho_j^*(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} G^*(-\omega + i\eta + E_0), \end{aligned} \quad (3.10)$$

y

$$\begin{aligned} G(z) &= \langle \psi_0 | c_{j\sigma}^\dagger (z - H)^{-1} c_{j\sigma} | \psi_0 \rangle, \\ G^*(z) &= \langle \psi_0 | c_{j\sigma} (z - H)^{-1} c_{j\sigma}^\dagger | \psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

En las expresiones anteriores,  $\omega$  es la energía,  $j = 1, 2$  (referido a los focos de la elipse),  $E_0$  es la energía del estado fundamental,  $\rho(\omega)$  y  $\rho^*(\omega)$  corresponden a los espectros de fotoemisión y fotomoemisión inversa y  $|\psi_0\rangle$  es el estado fundamental del sistema. Las funciones de Green  $G$  y  $G^*$  son calculadas con el método de fracción continua (ecuación (3.9)), estudiada en la subsección anterior. Se inicia el procedimiento de Lanczos (ecuación (3.6)) con  $|f_0\rangle = c_{j\sigma} |\psi_0\rangle$  para obtener  $G$  y con  $|f_0\rangle = c_{j\sigma}^\dagger |\psi_0\rangle$  para calcular  $G^*$ .

En la figura 3.6 mostramos resultados para la densidad local de estados electrónica en el foco 1 de la elipse para valores de  $J$  antiferromagnéticos AFM (panel izquierdo) y valores de  $J$  ferromagnéticos FM (panel derecho). Para este estudio nos interesó estudiar también el caso de  $J$  ferromagnético con el fin de comparar los resultados de la densidad de estados con el caso AFM, en donde aparece el efecto Kondo. En la figura 3.6, para valores de  $J$  de carácter AFM podemos distinguir dos regímenes diferentes (ya caracterizados con funciones de correlación de espín). Para valores chicos de  $J$  el espectro consiste principalmente de niveles discretos aproximadamente coincidentes con los de la elipse sin impurezas. Sin embargo observamos que, cuando la interacción de superintercambio  $J$



**Figura 3.6:** Densidad local de estados (en unidades arbitrarias) en el foco 1 de la elipse para estados ocupados (línea llena), y estados desocupados (línea de trazos). Hemos considerado 8 niveles y 10 electrones en la elipse para diferentes valores de  $J$  de carácter AFM (panel izquierdo) y de carácter FM (panel derecho). Consideramos  $\eta = 10^{-3}$ .

incrementa su valor ( $J/2t^* > 1$ ), un pseudogap o reducción de la densidad local de estados empieza a desarrollarse. Esto sucede alrededor del nivel de Fermi. Dicha reducción es una consecuencia de la interferencia de Fano entre los estados de la elipse y el espín localizado [37]. Entonces se forma un singlete entre el espín localizado y los electrones itinerantes [4] (régimen de Kondo), lo cual implica el desacople entre las impurezas.

También mostramos resultados de la densidad local de estados electrónica para  $J$  de carácter FM ( $J < 0$ ). Para el caso FM ( $J < 0$ ) observamos que la densidad local de estados no desarrolla un pseudogap alrededor del nivel de Fermi, siendo para todo valor de  $J$  de carácter FM (figura 3.6, panel derecho). En este caso no hay efecto Kondo entre el espín de la impureza y los electrones.

# Capítulo 4

## Información cuántica aplicada a corrales elípticos

### 4.1. Introducción

Con el fin de tener una visión alternativa sobre las propiedades cuánticas de nuestro sistema, y debido a que éste ofrece de manera natural un sistema de qubits (sistema de dos niveles), estudiamos este sistema desde el punto de la teoría de información cuántica (para un estudio más detallado se puede consultar las páginas 528-593 de [26]). La teoría de información cuántica ha sido utilizada, entre otras cosas, para caracterizar las fases en cadena de espines  $S = 1$  [38, 39] sin recurrir a un parámetro de orden que el sistema.

La teoría de información cuántica en este capítulo será usada como una herramienta importante, para caracterizar las propiedades físicas de nuestro sistema cuántico.

El modelo estudiado es el caso no interactuante (estudiado en la sección 2 del capítulo 1), que consiste de una elipse aislada que contiene un número fijo de electrones confinados.

### 4.2. Medidas de entrelazamiento cuántico

El estudio del grado de entrelazamiento cuántico entre dos sistemas requiere de una medida que tenga en cuenta el carácter del estado del sistema, por ejemplo, si es puro o mixto. Para un sistema bipartito en un estado puro, la entropía de von Neumann es una buena medida del entrelazamiento entre las dos partes del sistema.

En esta sección introduciremos los conceptos básicos de información cuántica usada en el desarrollo.

#### 4.2.1. Entropía de von Neumann

La matriz densidad de un sistema en un estado puro está dada por  $\rho = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|$ , donde  $|\psi_{AB}\rangle$  es la función de onda del estado puro donde  $A$  y  $B$  representan a cada una de las dos partes en las que está dividido el sistema. Y como  $|\psi_{AB}\rangle$  está normalizada, entonces



la traza de  $\rho$  es  $Tr[\rho] = 1$ . La entropía de von Neumann (entropía cuántica) calculada en  $A$  o en  $B$  mide el grado de entrelazamiento entre dichos sistemas, y está definida por [26, 40, 41, 42]:

$$S = -Tr[\rho^A \log_2 \rho^A] = -Tr[\rho^B \log_2 \rho^B]. \quad (4.1)$$

En la expresión anterior  $\rho^A = Tr_B[\rho]$  es la matriz reducida del sistema  $A$ , la cual es obtenida trazando sobre el sistema  $B$ , y  $\rho^B = Tr_A[\rho]$  es la matriz reducida del sistema  $B$  y es obtenida trazando sobre el sistema  $A$ . Por la condición de normalización de  $|\psi_{AB}\rangle$ , tenemos:  $Tr[\rho^A] = Tr[\rho^B] = 1$ .

Es importante notar que la entropía calculada en  $A$  o en  $B$  proporciona la misma información. Una forma sencilla de calcular la entropía es diagonalizar  $\rho^{A(B)}$ , con lo cual la ecuación (4.1) queda expresada como:

$$S = -\sum_i^d \omega_i^A \log_2 \omega_i^A = -\sum_i^d \omega_i^B \log_2 \omega_i^B. \quad (4.2)$$

En la expresión anterior  $\omega_i^{A(B)}$  es un autovalor de  $\rho^{A(B)}$  y  $d$  es la dimensión más chica de los subsistemas  $A$  y  $B$ . Tenemos que  $\sum_k \omega_k^A = \sum_k \omega_k^B = 1$  (debido a la normalización de  $|\psi_{AB}\rangle$ ).

Observando la ecuación (4.2), vemos que si  $\rho^{A(B)}$  tiene un único autovalor ( $\omega^A = \omega^B = 1$ ), entonces la entropía cuántica (entrelazamiento cuántico) es cero. Esto último sería un criterio de separabilidad para un estado puro, ya que podemos expresarlo como un producto directo de un estado en  $A$  por otro en  $B$ , esto quiere decir que  $|\psi_{AB}\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ .

#### 4.2.2. Descomposición de Schmidt

Supongamos que  $|\psi_{AB}\rangle$  es un estado puro de un sistema compuesto,  $AB$ . Luego, existe una base ortonormal,  $|i_A\rangle$  para el sistema  $A$  e  $|i_B\rangle$  para  $B$ , donde se puede expresar  $|\psi_{AB}\rangle$  en la descomposición de Schmidt de la forma:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle, \quad (4.3)$$

donde  $\lambda_i$  son coeficientes reales no negativos llamados coeficientes de Schmidt que cumplen  $\sum_i \lambda_i^2 = 1$  (condición de normalización de  $|\psi_{AB}\rangle$ ). Usando la descomposición de Schmidt podemos expresar la matriz densidad reducida en los subsistemas  $A$  y  $B$  de la forma:

$$\begin{aligned} \rho^A &= \sum_i \lambda_i^2 |i_A\rangle \langle i_A|, \\ \rho^B &= \sum_i \lambda_i^2 |i_B\rangle \langle i_B|, \end{aligned} \quad (4.4)$$

y donde  $\lambda_i^2$  es un autovalor de  $\rho^{A(B)}$ ; esto quiere decir que  $\omega_i^{A(B)} = \lambda_i^2$ .

### 4.2.3. Caso no interactuante

En esta subsección, estudiaremos el entrelazamiento cuántico en el modelo analizado en la sección 2, al que le aplicaremos un potencial local en el foco  $e_1$ . El hamiltoniano del sistema está dado por la ecuación (2.1) más un término  $H' = e_1 c_1^\dagger c_1$ , donde  $c_1$  es el operador de destrucción de un electrón en el foco 1.

#### Entropía cuántica

Adicionalmente hemos estudiado el entrelazamiento para una partición en el sistema a lo largo del eje menor de la elipse para el caso no interactuante. Una medida importante del entrelazamiento cuántico es la entropía de von Neumann (ver la subsección 4.2.1). El entrelazamiento cuántico entre dos sistemas cuánticos  $A$  y  $B$  (sistema bipartito de un estado puro), se calcula como  $S = -Tr(\rho^A \log_2 \rho^A) = -Tr(\rho^B \log_2 \rho^B)$ , donde  $\rho^A = Tr_B[\rho]$  y  $\rho^B = Tr_A[\rho]$  son las matrices densidades reducidas en los sistemas  $A$  y  $B$  respectivamente. La matriz  $\rho$  es la matriz densidad total del sistema,  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ , donde  $|\psi\rangle$  es cualquier estado puro, por ejemplo, el estado fundamental.

Es conveniente diagonalizar  $\rho^A$  y  $\rho^B$  ya que de esta forma es fácil obtener la entropía cuántica (para más detalle ver la subsección 4.2.1) que queda expresada como:

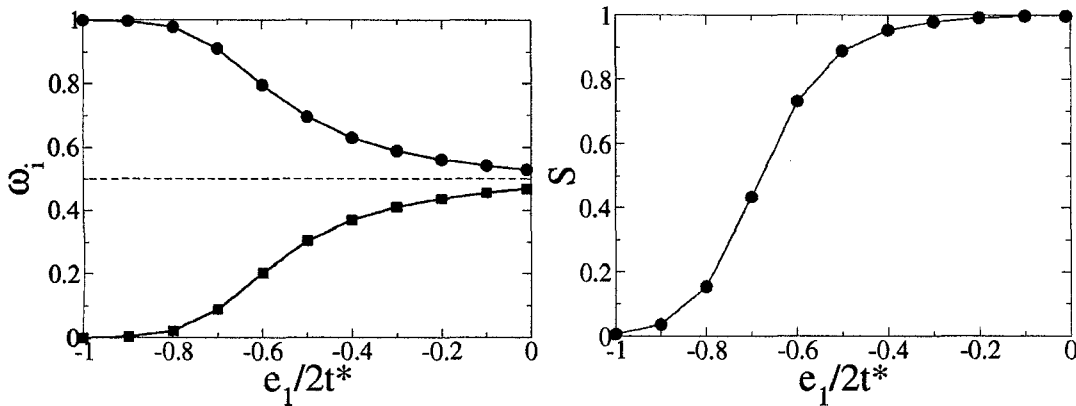
$$S = - \sum_k^d \omega_k^A \log_2 \omega_k^A = - \sum_k^d \omega_k^B \log_2 \omega_k^B \quad (4.5)$$

En la expresión anterior  $\omega_k^{A(B)}$  es un autovalor de  $\rho^{A(B)}$  y  $d$  es la dimensión más chica entre  $\rho^A$  y  $\rho^B$ . Una propiedad importante de la matriz densidad es  $Tr[\rho] = 1$  con lo cual tenemos:  $\sum_k^d \omega_k^A = \sum_k^d \omega_k^B = 1$ . En el caso que  $\omega_k^A = \omega_k^B = 1$ , para algún  $k$  se tiene  $S = 0$ , con lo cual, podemos escribir a  $|\psi\rangle$  como un producto directo de un estado de  $A$  y de  $B$  respectivamente:  $|\psi\rangle = |\Phi_A\rangle \otimes |\Phi_B\rangle$ ,  $|\Phi_{A(B)}\rangle$  es un estado en el subsistema  $A(B)$ . Lo anterior,  $S = 0$  es un criterio de separabilidad para estados puros, y diremos que un estado  $|\psi\rangle$  es no separable cuando  $S \neq 0$ .

En las figuras 4.1 y 4.2 mostramos resultados del entrelazamiento para una y 23 partículas respectivamente, para una partición a lo largo del eje menor de la elipse, y con un potencial local aplicado en un foco  $e_1$  (en el lado izquierdo de la elipse, respecto a su eje menor). Consideramos una bipartición en el sistema, donde  $A$  corresponde a la parte izquierda de la elipse respecto a su eje menor e incluye los sitios localizados incluso en el eje menor y el sistema  $B$  corresponde al lado derecho de la elipse.

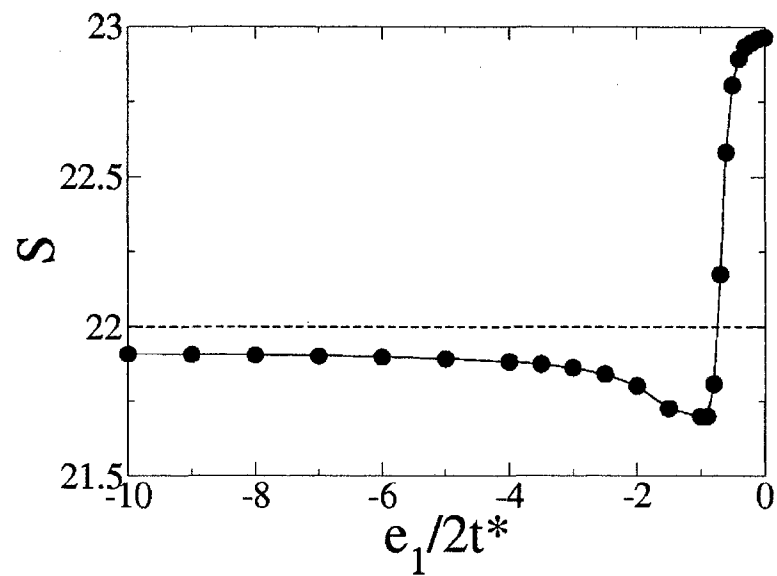
En la figura 4.1 mostramos resultados para el estado fundamental de una partícula. La matriz densidad reducida  $\rho^{A(B)}$  tiene dos autovalores  $\omega_1$  y  $\omega_2$  en función de  $e_1$ . Usando las expresiones de la ecuación (4.4) de la subsección 4.2.2 para reescribir  $\rho^A$  y  $\rho^B$  (referido a la descomposición de Schmidt), notamos que lo anterior se debe que hay una probabilidad  $P_A = \sqrt{\omega_1}$  de encontrar a la partícula en el sistema  $A$  (lado izquierdo de la elipse) y una probabilidad  $P_B = \sqrt{\omega_2}$  de encontrarla en  $B$  (lado derecho de la elipse). Para  $e_1 = 0$

(sistema sin perturbar) y una partícula, los dos autovalores difieren ligeramente, como se puede observar en la figura 4.1 (panel izquierdo). Esto se debe, a que el sistema  $A$  tiene más estados que el  $B$  (la función de onda escogida tiene peso a lo largo del eje menor de la elipse). Si la función de onda presentara un nodo a lo largo del eje menor de la elipse, entonces los dos autovalores sería iguales  $\omega_1 = \omega_2$ . Observamos que, ante el incremento de  $|e_1|$ , un autovalor empieza a aumentar (aumenta la probabilidad de encontrar a la partícula en el sistema  $A$ ). Esto quiere decir, que la partícula empieza a localizarse, en el lado de la elipse donde está ubicado  $e_1$  (sistema  $A$ ). Por lo tanto, disminuye la probabilidad de encontrarlo en el sistema  $B$ . Esto se ve reflejado en la entropía de von Neumann del sistema, tal como se observa en la figura 4.1 (panel derecho) donde la entropía empieza a disminuir hasta acercarse a cero, con el aumento de  $|e_1|$ . En este límite ( $|e_1| \geq 2t^*$ ), el estado es separable y es un producto directo de un estado ocupado en  $A$ , por un estado vacío en  $B$ , y se expresa:  $|\psi_0\rangle = |A\rangle \otimes |\Phi_B\rangle$ , donde  $|A\rangle$  es un estado del sistema  $A$  con probabilidad 1 y  $|\Phi_B\rangle$  es el estado vacío del sistema  $B$ . Esto quiere decir que no hay entrelazamiento entre los sistemas  $A$  y  $B$  en el estado fundamental, para valores de  $|e_1|$  grandes (estado separable).



**Figura 4.1:** Panel izquierdo: los dos autovalores ( $i = 1, 2$ ) de  $\rho^A, \rho^B$  en el estado fundamental, para una partícula y para un potencial local en un foco  $e_1$ . Los autovalores representan la probabilidad de encontrar a la partícula en el sistema  $A$  (curva superior) o en el sistema  $B$  (curva inferior). La línea de puntos muestra el valor de 0.5, que representa máximo entrelazamiento en el sistema. Panel derecho: entropía cuántica  $S$  en función del potencial local  $e_1$ . Para valores de  $|e_1|$  grandes, los sistemas  $A$  y  $B$  no están entrelazados (estados separables).

Por otro lado, estudiamos el caso con 23 partículas (spinless) en la elipse con un potencial local  $e_1$  aplicado en un foco (figura 4.2). En este caso, la entropía cuántica se calcula como la suma de la entropía de todos los estados de una partícula hasta el estado 23. Esto es porque el sistema es no interactuante, y el estado fundamental es un producto de estados de una partícula hasta el nivel de Fermi). Para valores de  $|e_1|$  chicos, la entropía es muy cercana a su valor máximo ( $S_{max} = 23$ ). Para valores de  $|e_1|$  grandes, solamente contribuyen 22 estados, dado que la entropía del primer estado de la elipse es cero.



**Figura 4.2:** Entropía cuántica en función del potencial local en un foco  $e_1$  con 23 partículas en la elipse. El mínimo en la entropía se debe a un cruce de niveles para  $e_1 \approx -1$ .



# Capítulo 5

## Conclusiones generales

Con el objetivo de obtener los autoestados de un corral elíptico (ver capítulo 1), estudiamos el modelo de pared dura usando un reticulado con condiciones de contorno elípticas y un modelo de tight-binding para los sitios dentro del corral. Dicho capítulo (1) presenta la introducción general al tema de corrales elípticos y el modelo utilizado en la tesis.

Una vez obtenidos los autoestados de la elipse no interactuante en el capítulo introductorio (1), estudiamos el modelo interactuante con dos impurezas localizadas en los focos. Estas impurezas interactúan antiferromagnéticamente con los electrones confinados vía  $J$  (modelo de dos impurezas de Kondo). Encontramos diferentes comportamientos para llenado par e impar, observados en el estado fundamental y en el primer estado excitado. Para llenado par (impar) y valores chicos de  $J$  (comparado con el ancho de banda), las impurezas se encuentra en un estado singlete (triplete). Una propiedad interesante es que, para valores chicos de  $J$  y llenado par, las impurezas se encuentran en un estado singlete entre ellas en el estado fundamental y en un triplete en el excitado. Con las propiedades estáticas y dinámicas caracterizamos dos regímenes en el sistema: régimen RKKY (para  $J$  chicos) y régimen Kondo local (para  $J$  grandes). Una característica importante del corral elíptico es el hecho que a grandes distancias dos impurezas magnéticas están fuertemente correlacionadas, en contraste con dos impurezas en ausencia del corral donde la interacción efectiva es muy chica. A bajas energías y para valores chicos de  $J$  es posible expresar un hamiltoniano efectivo entre las impurezas en el corral en términos de una interacción efectiva entre ellas  $J_{eff}$ , de la forma:  $H_{eff} = J_{eff}S_1.S_2$ .

Posteriormente, hemos analizado una magnitud relacionada con la Teoría de Información Cuántica (entropía de von Neumann) para una dada partición en el sistema en el estado fundamental. Esto ofrece una perspectiva alternativas para estudiar sistemas cuánticos fuertemente correlacionados.

Para el caso no interactuante estudiamos el entrelazamiento entre dos partes del sistema y una perturbación local en un foco  $e_1$  ( $e_1 < 0$ ), particionando a la elipse a lo largo de su eje menor. La entropía de von Neumann es una buena medida del entrelazamiento en sistemas bipartitos puros. Se puede capturar con la entropía cuántica el efecto de localización de un electrón en el foco 1 al aumentar  $|e_1|$  y con una partícula en el sistema. En este caso la

entropía cuántica es cero, indicando que el sistema es separable (debido a la localización del electrón en un subsistema).

# Apéndice A

## Método de Lanczos modificado

Cuando trabajamos con muchos grados de libertad se obtienen matrices gigantes para el hamiltoniano (el número de grados de libertad crece exponencialmente con el número de sitios o niveles en un sistema). Para diagonalizar estas matrices se hace necesario recurrir a métodos especiales de diagonalización (las rutinas numéricas estándar no son adecuadas). Uno de estos métodos es el método de Lanczos que detallaremos a continuación.

Con método tradicional de Lanczos [32] se diagonaliza una matriz hermítica de manera iterativa, escogiéndose un estado inicial  $|f_0\rangle$  generándose estados ortonormales de la siguiente manera:  $H|f_n\rangle = a_n|f_n\rangle + b_n|f_{n-1}\rangle + b_{n+1}|f_{n+1}\rangle$ . Se obtiene así una matriz tridiagonal donde:  $a_n = \langle f_n|H|f_n\rangle$  y  $b_n = \langle f_{n-1}|H|f_n\rangle$ .

El método consiste en diagonalizar iterativamente la matriz tridiagonal hasta que se logre la convergencia. Generalmente la convergencia se logra antes de utilizar toda la base, pero se tiene que guardar toda la base ortonormal, lo cual en la práctica es imposible. Para ello usamos una modificación del método, que con pocos pasos iterativos diagonaliza la matriz obteniéndose el estado fundamental. Esto es una ventaja frente al método de Lanczos tradicional, pero para lograr la convergencia hay que escoger una buena base de prueba. Describimos el método de Lanczos modificado a continuación.

En el método de Lanczos modificado [43, 44, 45] se propone una función de prueba inicial normalizada  $|\psi_0\rangle$  de proyección no nula sobre el estado fundamental verdadero en el espacio considerado; si la proyección fuese cero entonces la función de onda convergería a un estado excitado.

Aplicando el hamiltoniano sobre  $|\psi_0\rangle$  se obtiene:

$$H|\psi_0\rangle = \langle H\rangle|\psi_0\rangle + b|\psi_1\rangle, \quad (\text{A.1})$$

donde  $|\psi_1\rangle$  es un estado ortonormal a  $|\psi_0\rangle$  y  $\langle H^n\rangle = \langle \psi_0|H^n|\psi_0\rangle$ . La constante  $b$  se calcula:

$$b = \langle \psi_1|H|\psi_0\rangle \quad (\text{A.2})$$

Obtenemos de esta manera una representación matricial 2x2 para H, en la base  $|\psi_0\rangle$ ,  $|\psi_1\rangle$ , la cual es fácilmente diagonalizable. La matriz H es:



$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & b \\ b & c \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

donde:  $c = \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle$  y  $\varepsilon_0 = \langle H \rangle$

Usamos el método variacional para calcular el estado de mas baja energía, proponiéndose el estado  $|\tilde{\psi}_0\rangle$  normalizado como combinación de los estados  $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle$ , de la forma ( $\alpha_1$  es el parámetro variacional):

$$|\tilde{\psi}_0\rangle = \frac{|\psi_0\rangle + \alpha_1 |\psi_1\rangle}{(1 + \alpha_1^2)^{1/2}} \quad (\text{A.4})$$

El correspondiente valor de la energía del nuevo estado es:

$$\varepsilon_1 = \langle H \rangle + b\alpha_1 \quad (\text{A.5})$$

Usando el método variacional para calcular la energía mas baja, encontramos el valor del parámetro  $\alpha_1$  que minimiza dicha energía.

$$\alpha_1 = f - (f^2 + 1), \quad (\text{A.6})$$

donde:

$$f = \frac{\langle H^3 \rangle - 3\langle H \rangle \langle H^2 \rangle + \langle H \rangle^3}{2(\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)^{3/2}}, \quad (\text{A.7})$$

Se puede demostrar que (A.4), teniendo en cuenta el parámetro variacional  $\alpha_1$ , es el autoestado de más baja energía de (A.3).

El método es iterativo, con lo cual consideramos ahora  $|\tilde{\psi}_0\rangle$ , como un estado de prueba inicial en reemplazo de  $|\psi_0\rangle$  usando todos los pasos anteriores considerados, hasta obtener la convergencia con la precisión deseada.<sup>1</sup> Debemos resaltar que en cada iteración realizada sólo se guardan 3 vectores ( $|\psi_0\rangle, H|\psi_0\rangle$  y  $H^2|\psi_0\rangle$ ). Si el tamaño del espacio de Hilbert considerado es M, entonces sólo se guardan 3M coeficientes.

<sup>1</sup>Para más detalles sobre el tema, pueden escribir a mi correo: marconizama@gmail.com

# Bibliografía

- [1] D. M. Eigler y E. K. Schweizer, *Nature* **344**, 524 (1990).
- [2] H. C. Manoharan, C. P. Lutz y D. Eigler, *Nature (Londres)* **403**, 512 (2000).
- [3] [http : //www.almaden.ibm.com/almaden/media/image\\_mirage.html](http://www.almaden.ibm.com/almaden/media/image_mirage.html).
- [4] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press (1993).
- [5] N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl y K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).
- [6] M. A. Barral, A. M. Llois y A. A. Aligia, *Phys. Rev. B* **70**, 035416 (2004).
- [7] G. Chiappe y A. A. Aligia, *Phys. Rev. B* **66**, 075421 (2002).
- [8] G. Chiappe y A. A. Aligia, *Phys. Rev. B* **64**, 121102 (2001).
- [9] A. Lobos y A. A. Aligia, *Phys. Rev. B* **68**, 035411 (2003).
- [10] G. A. Fiete, J. S. Hersch, E. J. Heller, H. C. Manoharan, C. P. Lutz y D. M. Eigler, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2392 (2001).
- [11] A. Lobos y A. A. Aligia, *Phys. Rev. B* **68**, 035411 (2003).
- [12] K. Hallberg, A. A. Correa y C. A. Balseiro, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 066802 (2002).
- [13] M. Weissmann y H. Bonadeo, *Physica E (Amsterdam)* **10**, 44 (2001).
- [14] C. Kittel, *Solid State Physics*, editado por F. Seitz, D. Turnbull y H. Ehrenreich (Academic, Nueva York), Vol. **22**, 1–26 (1968).
- [15] V. S. Stepanyuk, L. Niebergall, W. Hergert y P. Bruno, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 187201 (2005).
- [16] A. A. Aligia y A. M. Lobos, *J. Phys.: Cond. Matt.* **17**, S1095 (2005).
- [17] G. Fiete y E. Heller, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 933 (2003).
- [18] M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Nueva York (1995).

- [19] Y. W. Tan, J. Zhu, H. L. Störner, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, y K. W. West., “Measurements of the Density-Dependent Many-Body electron Mass in Two Dimensional GaAs / AlGaAs Heterostructures”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 016405 (2005).
- [20] Peter Y. Yu, M. Cardona, “Fundamental of semiconductors”, Springer- Verlag Berlin Heidelberg (1996).
- [21] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, “Solid State Physics”, Saunders College (1976).
- [22] David K. Ferry y Stephen M. Goodnick, “Transport in Nanostructures”, Cambridge University Press (1997).
- [23] M. F. Crommie, C. P. Lutz y D. M. Eigler, *Science* **262**, 218-220 (1993).
- [24] S. Hla, K. Braun, y K. Rieder, *Phys. Rev. B* **67**, 201402 (2003).
- [25] S. L. Hulbert, P. D. Johnson, N. G. Stoffel, W. A. Royer y N. V. Smith, *Phys. Rev. B* **31**, 6815 (1985).
- [26] M. A. Nielsen y I. L. Chuang, *Quantum Computation y Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [27] M. Nizama, K. Hallberg y J. d’Albuquerque e Castro, *Phys. Rev. B* **75**, 235445 (2007).
- [28] M. Nizama, K. Hallberg y J. d’Albuquerque e Castro, *Microelectronics Journal* **39** 1289 (2008).
- [29] K. Hallberg y M. Nizama, *Prog. Theor. Phys.* **176** 408 (2008).
- [30] M. Nizama, D. Frustaglia y K. Hallberg, *Physica B* **404** 2819 (2009).
- [31] K. Hallberg, J. Rincón, M. Nizama, A. A. Aligia y S. Ramasesha, *J. Stat. Mech.* **2010**, P11031 (2010).
- [32] C. Lanczos, *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **45**, 225 (1950).
- [33] G. D. Mahan, *Many Particles Physics*, Plenum Press (1993).
- [34] E. N. Economou, *Green’s Functions in Quantum Physics*, 2<sup>a</sup> edición (Berlín: Springer, 1983).
- [35] D. N. Zubarev, *Soviet Physics Uspekhi*, **3**, 320 (May, 1960).
- [36] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules y Solids*, Berlín: Springer, 1995 (Springer Series in Solid-State Sciences).
- [37] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [38] O. Romero-Isart, K. Eckert y A. Sanpera, *Phys. Rev. A*, **73** 050303 (2007).
- [39] Ö. Legeza y J. Sólyom, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 116401 (2006).

- 
- [40] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: a Set of Lectures*, notas tomadas por R. Kikuchi y H. A. Feiveson, editado por Jacob Shaham (1972).
- [41] L. Amico y R. Fazio, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504001 (2002).
- [42] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki y K. Horodecki, *Rev. Mod Phys.* **81**, 865 (2009).
- [43] K. Hallberg, Tesis Doctoral, Instituto Balseiro (1992).
- [44] E. Dagotto y A. Moreo, *Phys. Rev. D* **31**, 865 (1985).
- [45] E. R. Gagliano, E. D., Adriana Moreo, y F. C. Alcaraz *Phys. Rev. B* **34**, 1677 (1986).

# Agradecimientos

Esta parte de la tesis tiene mucho valor para mí, ya que me permite agradecer a todas las personas e instituciones que hicieron posible que esta tesis sea una realidad.

En primer lugar quiero agradecer a mi Asesor Dámaso Laura, quien acepto dirigir la tesis licenciatura, y por el tiempo brindado en la realización de la tesis.

Agradezco a la Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería por la formación académica brindada, a la plana docente que en todo momento mostró disponibilidad en ayudarme en mis preocupaciones académicas. También quiero agradecer especialmente al profesor Valqui, por las diversas charlas y sus consejos.

Quiero destacar el trabajo de corrección de la tesis realizado por el profesor Domingo Aliaga, y agradezco todas las observaciones que realizó sobre la tesis.

Quisiera agradecer a mis amigos del código 96, por los gratos momentos vividos. Finalmente quiero agradecer a mi familia que me dio todo su apoyo.