

Universidad Nacional de Córdoba

Faculta de Matemática, Astronomía y Física

Fa.M.A.F.

Trabajo Especial de Licenciatura en Física

**Transición de Fase en la Dinámica Cuántica de una
Compuerta de Intercambio en un ambiente absorbente**

Axel Damián Dente

Director: Horacio M. Pastawski

Fa.M.A.F.

Marzo 2007

a Julio y Griselda

Agradecimientos

A Horacio y Patricia, por su esfuerzo y dedicación;

A mis amigos, por estar siempre presentes;

A los integrantes de LaNAIS;

y especialmente a Julio, Griselda y Alan,

por su incondicional apoyo;

Resumen

La teoría de información cuántica requiere del uso de compuertas de intercambio (swapping). En Resonancia Magnética Nuclear (RMN) se crea esta compuerta usando un estado de dos sistemas interactuantes en donde se intercambian los estados: $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ a la frecuencia de Rabi [ADLP06]. Esta está determinada por el desdoblamiento energético entre los niveles singlete y triplete provocada por la interacción. La implementación de esta compuerta está limitada por el hecho de la interacción con un ambiente cuántico no solo puede producir la atenuación de las oscilaciones sino que en ciertas condiciones puede impedir el régimen oscilatorio. En este trabajo consideramos un ambiente de carácter absorbente y que modelamos como una cadena de estados con interacciones de primeros vecinos. En el límite termodinámico la longitud de esta cadena es infinita. Resolviendo la dinámica del problema se observa una transición de fase dinámica desde un régimen oscilatorio a una fase donde el estado relaja sin oscilar (fase cuántica de Zenón [MS77] [PU98]). Esta transición fue observada recientemente [ADLP06] al aumentar la interacción con el “ambiente”. En este trabajo se analizan las propiedades de no-analiticidad que en el límite termodinámico dan lugar a la transición de fase. Se analizan los regímenes de los parámetros de acople entre espines que permiten la transición y se estudia la densidad local de estados para diversos sistemas, en los cuales se demuestran la existencia de estados localizados, resonancias y niveles virtuales.

Índice General

Capítulo 1. Introducción.....	7
Capítulo 2. Marco Teórico	10
2.1 Función de Green:.....	11
2.2 Serie Perturbativa de Wigner-Brillouin y la función de Green	12
2.3 Electrones en modelos de enlaces fuertes (<i>Tight Binding</i>)......	14
2.4 Energías del sistema “Enlaces Fuertes”	15
2.5 Probabilidad de Supervivencia en el sistema Enlaces Fuertes	19
2.6 Densidad de estados en el Hamiltoniano “Enlaces Fuertes”.	20
2.7 Estado Resonante.	22
2.8 Función de Green y amplitud de dispersión elástica	28
Capítulo 3. Configuraciones moleculares	30
3.1 Átomo adsorbido en un sustrato	31
3.2 Dímero sobre un sustrato	47
3.3 Átomo embebido y dímero embebido	71
Capítulo 4. Límite termodinámico	76
4.1 Dinámica de un sistema finito.....	77
4.2 Límite termodinámico de la frecuencia de oscilación.	80
Capítulo 5. Conclusiones	82
5.1 Estados resonantes.	83

5.2	Densidad local de estados:	85
5.3	Límite Termodinámico:	87
5.4	Resultados Globales.....	88
Apéndice		91
Apéndice A	Estado de un sitio interactuando con el ambiente.	91
Apéndice B	Estado de dos sitios interactuando con el ambiente.....	95
Apéndice C	Átomo embebido	102
Apéndice D	Dímero embebido.....	103
Apéndice E	Programa Probabilidad de Supervivencia	106
Bibliografía.....		110

Capítulo 1. Introducción

La teoría de la información cuántica requiere de la implementación cuántica de diversas compuertas lógicas. Entre ellas se encuentra la compuerta de intercambio, conocida por su término en inglés “swapping gate”. Esta compuerta puede representarse en la base computacional de la siguiente forma:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle ; |01\rangle \rightarrow |10\rangle ; |10\rangle \rightarrow |01\rangle ; |11\rangle \rightarrow |11\rangle$$

En definitiva produce el intercambio entre los estados $|01\rangle$ y $|10\rangle$. Actualmente los conceptos de la teoría de información cuántica pueden ser implementados en diversos tipos de sistemas, en particular en la Resonancia Magnética Nuclear (RMN). La compuerta de intercambio, en RMN, se crea usando un estado de dos espines interactuantes donde se intercambian los estados de espín $\frac{1}{2}$: $|\uparrow, \downarrow\rangle$ y $|\downarrow, \uparrow\rangle$ a la frecuencia de Rabi [ADLP06]. Ésta se encuentra determinada por el desdoblamiento energético entre los niveles Singlete y Triplete provocada por la interacción isotrópica o dipolar según se trate de líquidos o sólidos. Las implementaciones más usuales usan RMN en líquidos, con lo que la interacción se debe al acoplamiento J entre los espines. Una restricción a la implementación de esta compuerta radica en el hecho de que el sistema interactúa con un ambiente de espines. Este “ambiente” puede producir efectos no deseados como el sobre amortiguamiento que impide completamente el intercambio.

Este trabajo pretende estudiar dicho comportamiento, a los fines de obtener un mayor control sobre el sistema. En este sentido representaremos un ambiente de tipo absorbente usando el modelo de enlace fuerte (Tight Binding) donde la interacción se limita a los primeros vecinos (ver figura 1.1).

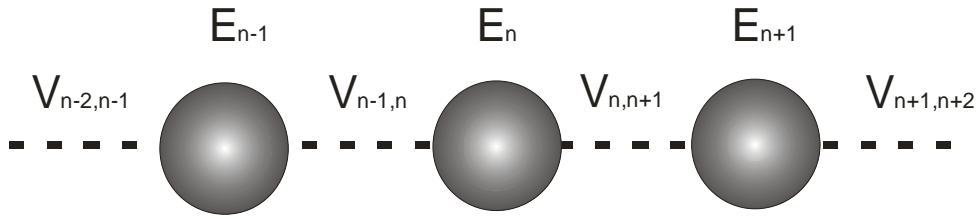


Figura 1.1: Modelo de enlace fuerte con interacción entre primeros vecinos.

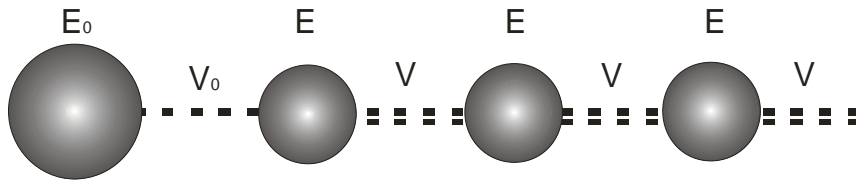


Figura 1.2: Átomo adsorbido en un sustrato.

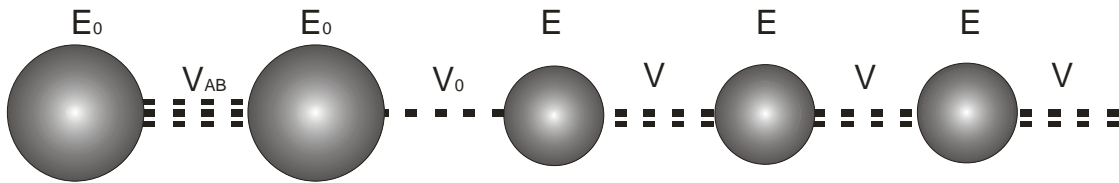


Figura 1.3: Dímero sobre un sustrato.

A lo largo del trabajo, estudiaremos dos tipos de sistemas que denominaremos: *Átomo adsorbido en un sustrato* y *Dímero sobre un sustrato* por su semejanza (ver figuras 1.2 y 1.3) con los correspondientes problemas de la física de superficies [News68]. Para desarrollar el análisis, haremos uso de la teoría de Funciones de Green [And78], la cual nos permitirá estudiar la probabilidad de supervivencia de un estado cuántico y la densidad local de estados.

En la sección 3 usaremos cadenas lineales de longitud infinita para representar el “ambiente”. Esto nos permitirá analizar propiedades de analiticidad y no-analiticidad de la función de Green. A partir de dicho estudio encontraremos una transición de fase en la dinámica cuántica que cambia de un régimen oscilatorio a una fase donde el estado relaja sin oscilar (régimen de Zenón [MS77, PU98]). Esta transición fue observada recientemente [ADLP06]

(ver gráfico 1.1) y podría interpretarse como que, al aumentar la interacción con el “ambiente”, los dos niveles de energía colapsaran en un único nivel.

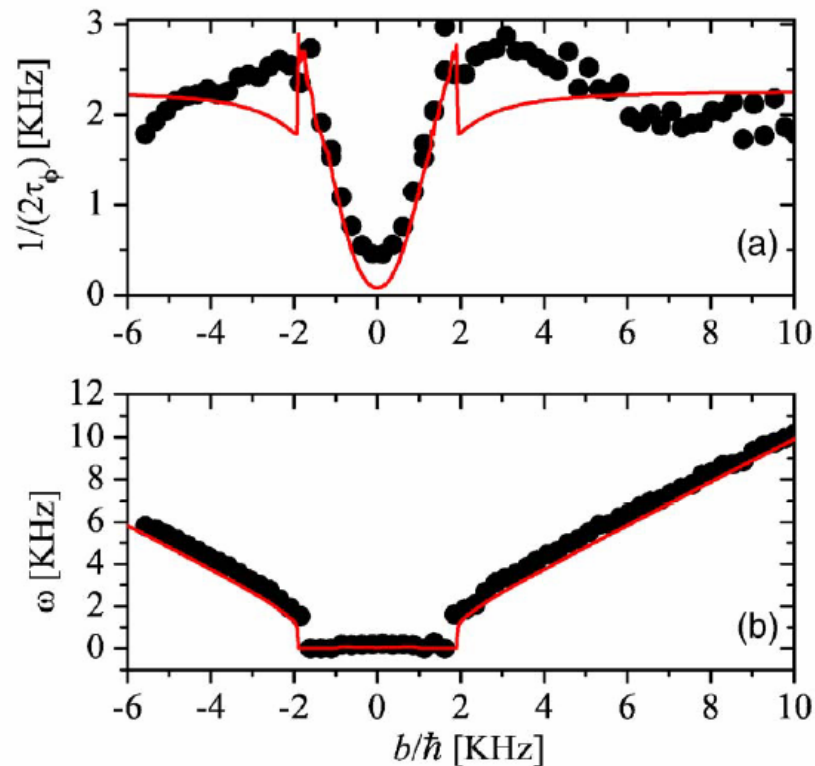


Gráfico 1.1: Resultados extraídos de [ADLP06]

Al variar los parámetros de interacción encontramos condiciones que nos permiten obtener autoestados de tipo localizado (normalizables) o extendidos (no-normalizables). Adicionalmente, al analizar la región de transición, se encuentran rangos paramétricos donde los polos de la función de Green no pueden identificarse ni con uno ni con otro tipo de estados y que se denominan niveles virtuales [LL77, Hog95].

Por último, se procederá a comprobar que solo es posible obtener la transición de fase como consecuencia del límite termodinámico. Es decir, si se representa al “ambiente” por una cadena lineal de longitud N , la transición de fase se obtiene cuando N tiende a infinito.

Capítulo 2. Marco Teórico

En el presente capítulo se introducen las herramientas de las cuales haremos uso durante el desarrollo del trabajo. Primero veremos la denominada Función de Green, enfatizando en los aspectos que nos serán útiles durante el trabajo. Luego brindaremos nociones sobre la teoría de perturbaciones de Wigner-Brillouin y su conexión con la Función de Green. Por último analizaremos los modelos de enlaces fuertes y los usaremos para mostrar el formalismo en el cálculo de observables específicos: probabilidad de supervivencia, densidad de estados y transmitancias.

2.1 Función de Green:

En los procesos que involucran interacciones entre partículas, la función de onda convencional pierde su claro significado y se debe recurrir al formalismo de campos. En este contexto, la Función de Green nos provee de un significado físico equivalente al de la función de onda en los sistemas no-interactuantes y nos permite obtener resultados simples, pero importantes. Las funciones de Green cobraron importancia cuando Feynman y Schwinger las introdujeron en electrodinámica cuántica para desarrollar expansiones perturbativas [WF45]. Actualmente su uso se ha ampliado al campo de la Física de Estado Sólido. Mediante su uso podemos discriminar jerárquicamente los procesos de interacción entre electrones, modos vibracionales (fonones) y cuantos electromagnéticos, permitiendo la identificación del estado fundamental y las posibles excitaciones elementales.

En este trabajo solo haremos la descripción de una partícula con la expectativa de obtener metodologías aplicables a distintas excitaciones, por ejemplo excitaciones de espín [DPL04].

Empezaremos por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo expresada en su forma matricial:

$$[\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}] \psi = 0. \quad (2.1)$$

A partir de ella, la Función de Green se define como la solución a la ecuación:

$$[\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}] \mathbf{G}(\varepsilon) = \mathbf{I} \quad (2.2)$$

En el caso que todos los todos los autovalores del hamiltoniano sean distintos de cero, se obtiene

$$\mathbf{G}(\varepsilon) = (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}. \quad (2.3)$$

2.2 Serie Perturbativa de Wigner-Brillouin y la función de Green

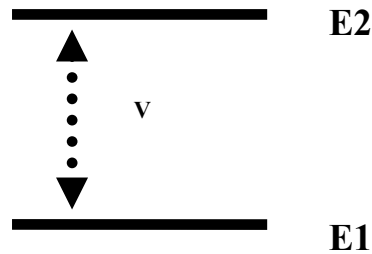


Figura 2.1

En esta sección procederemos a analizar un sistema de dos niveles de energía acoplados mediante un potencial V (ver Figura 2.1), el cual se introducirá en forma perturbativa. Aquí observaremos la relación que existe entre la función de Green y la serie perturbativa de Wigner Brillouin.

Denotaremos por \mathbf{H}_0 al Hamiltoniano sin perturbar, es decir

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

La función de Green de este sistema se obtiene usando la ecuación (2.3) a partir de la cual se obtiene

$$\mathbf{G}^0 = (\varepsilon \mathbf{1} - \mathbf{H}_0)^{-1}, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{G}^0 = \frac{1}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2)} \begin{pmatrix} \varepsilon - E_2 & 0 \\ 0 & \varepsilon - E_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon - E_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon - E_2} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

A partir de la ecuación (2.6) se puede observar que los autovalores del sistema pueden obtenerse a partir de cualquier componente diagonal de la función de Green.

El Hamiltoniano en la base de *autoestados sin perturbar* se puede escribir como

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & V_{12} \\ V_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

De esta forma la función de Green del sistema es

$$\mathbf{G} = (\varepsilon \mathbf{1} - \mathbf{H})^{-1}, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{G} = \frac{1}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2) - V_{12}V_{21}} \begin{pmatrix} \varepsilon - E_2 & -V_{21} \\ -V_{12} & \varepsilon - E_1 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

A cada elemento de \mathbf{G} lo podemos expresar en función de las componentes de \mathbf{G}^0 de la siguiente forma

$$G_{11} = \frac{1}{[G_{11}^0]^{-1} - V_{12}G_{22}^0V_{21}}, \quad (2.10)$$

$$G_{11} = G_{11}^0 \frac{1}{1 - V_{12}G_{22}^0V_{21}G_{11}^0}, \quad (2.11)$$

$$G_{11} = G_{11}^0 \left[1 + V_{12}G_{22}^0V_{21}G_{11}^0 + (V_{12}G_{22}^0V_{21}G_{11}^0)^2 + \dots \right], \quad (2.12)$$

$$G_{11} = G_{11}^0 + G_{11}^0V_{12}G_{22}^0V_{21}G_{11}^0 + G_{11}^0V_{12}G_{22}^0V_{21}G_{11}^0V_{12}G_{22}^0V_{21}G_{11}^0 + \dots, \quad (2.13)$$

La última ecuación es la serie perturbativa de *Wigner-Brillouin*, en el contexto de problemas de dispersión (scattering) es más conocida como la serie de *Born*. Esta expresión expresa que la función de Green es equivalente a la suma de todos los órdenes de perturbación de la serie.

Utilizando la expresión (2.10), se observa que las autoenergías del sistema pueden obtenerse como las soluciones

$$\varepsilon = E_1 + \frac{V_{12}V_{21}}{\varepsilon - E_2} \leftrightarrow [G_{11}(\varepsilon)]^{-1} = 0. \quad (2.14)$$

A partir de esta ecuación se puede concluir que la función de Green nos permite obtener una ecuación auto-consistente que brinda las correcciones exactas a la energía. Generalizando este resultado a cualquier tipo de sistema discreto se puede ver que los polos de la función de Green se corresponden con las autoenergías del sistema.

2.3 Electrones en modelos de enlaces fuertes (*Tight Binding*).

Los modelos de enlaces fuertes son de gran utilidad en la física del estado sólido. Por ejemplo se puede considerar una red cristalina perfecta en la que imaginamos que podemos situar un electrón en una suerte de “pozo” en un átomo determinado y con cierta energía determinada. A esto le debemos agregar que el electrón tiene cierta amplitud de probabilidad de escapar hacia un pozo diferente situado en alguno de los átomos circundantes. Es importante notar que se trata de un “escape” de amplitud y no de un simple escape de probabilidad. Una característica similar aparecería si la ecuación de Schrödinger fuera resuelta para un potencial con una componente imaginaria.

A lo largo del trabajo se hará uso de cadenas unidimensionales (ver Figura 2.2) con enlaces fuertes e interacciones entre primeros vecinos. De esta forma el hamiltoniano del sistema es:

$$H = \sum_n E_n |n\rangle\langle n| + V_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + V_{n+1,n} |n+1\rangle\langle n|. \quad (2.15)$$

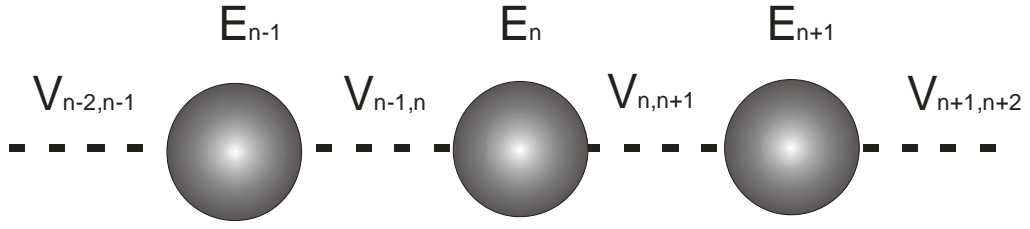


Figura 2.2

La cantidad $V_{n,m}$ es la amplitud de probabilidad de pasar un electrón del sitio n al sitio m . A lo largo del trabajo se usarán valores constantes para la amplitud $V_{n,n+1}$, es decir $V_{n,n+1} = V \quad \forall V$ (excepto que se aclare lo contrario).

2.4 Energías del sistema “Enlaces Fuertes”

Esta sección abordaremos una forma útil de analizar las energías en sistemas con Enlaces Fuertes. El sistema más simple de analizar es el presentado en la sección 2.2. Donde el hamiltoniano en la base de sitios queda representado de la siguiente forma:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} E_1 & V \\ V & E_2 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

Recordemos que nuestra función de Green es

$$\mathbf{G} = \frac{1}{(\varepsilon - E_1)(\varepsilon - E_2) - V^2} \begin{pmatrix} \varepsilon - E_2 & -V \\ -V & \varepsilon - E_1 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

y también que

$$G_{11} = \frac{1}{\varepsilon - E_1 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_2}} = \frac{1}{\varepsilon - \left(E_1 + \frac{V^2}{\varepsilon - E_2} \right)}. \quad (2.18)$$

A partir de la ecuación (2.18) se observa que la energía del sistema sin perturbar se ve corregida en un factor $\frac{V^2}{\varepsilon - E_2}$. A este factor lo denotaremos como $\Sigma(\varepsilon)$. De esta forma vemos que la ecuación (2.14) se convierte en

$$\varepsilon = E_1 + \Sigma(\varepsilon). \quad (2.19)$$

Si en la ecuación (2.19) tomamos $\Sigma(\varepsilon) = \Sigma(E_1)$, se observa que los resultados son idénticos a los obtenidos a partir de otras teorías de perturbaciones, como por ejemplo la teoría de Rayleigh-Schrödinger.

Para el caso en que el sistema conste de tres niveles de energía (o sitios) con interacciones V entre primeros vecinos, se puede ver que la función de Green es

$$G_{11} = \frac{1}{\varepsilon - E_1 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_2 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_3}}}, \quad (2.20)$$

$$G_{11} = \frac{1}{\varepsilon - E_1 - \Sigma_{11}^+(\varepsilon)}, \quad (2.21)$$

i.e. la corrección a la energía del sitio 1 viene dada por el “ambiente” que este encuentra a su derecha, esto es, el sitio 2 que a su vez se encuentra corregido por la presencia del sitio 3. Si generalizamos el resultado a un sistema de N sitios se ve que

$$G_{11} = \frac{1}{\varepsilon - E_1 - V^2 \frac{1}{\varepsilon - E_2 - V^2 \frac{1}{\dots - V^2 \frac{1}{\varepsilon - E_{N-1} - V^2 \frac{1}{\varepsilon - E_N}}}}}, \quad (2.22)$$

Usando la propiedad de la cadena homogénea $E_n \equiv E_0 \quad \forall n$, se ve que la corrección por derecha del sitio n es

$$\Sigma_n^+(\varepsilon) = \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \Sigma_{n+1}^+(\varepsilon)}, \quad (2.23)$$

En el caso específico $N \rightarrow \infty$, se puede hacer uso de la invariancia ante traslaciones, esto es, el sitio n “observa” hacia la derecha el mismo ambiente que el sitio $n+1$. El resultado permite tomar $\Sigma_n^+(\varepsilon) \equiv \Sigma(\varepsilon) \quad \forall n$, con lo cual la ecuación (2.23) se transforma en

$$\Sigma(\varepsilon) = \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \Sigma(\varepsilon)}. \quad (2.24)$$

Esta expresión se conoce como la ecuación de Dyson para la energía de renormalización (*self energy*). Si bien el procedimiento realizado es simple, es necesario destacar que al tomar el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ el espectro de energías discreto pasaría a ser continuo. Este procedimiento lejos de ser trivial oculta efectos drásticos. En algunos sistemas puede generar transiciones de fases. En los capítulos 3 y 4 se estudiará en detalle este tipo de transiciones.

La ecuación (2.24) puede dar lugar a muchas soluciones, dentro de ellas se deben escoger las que se correspondan con procesos físicos, es decir, las que permiten el decaimiento en la evolución temporal para tiempos positivos (lo que define una función de Green retardada) y el decaimiento del efecto de las interacciones fuera del rango de energías donde hay autovalores (lo que indica que la función de Green es una función respuesta). De esta forma

$$\Sigma(\varepsilon) = \Delta(\varepsilon) - i\Gamma(\varepsilon), \quad (2.25)$$

donde el signo de la parte imaginaria determina el decaimiento temporal,

$$\Gamma(\varepsilon) = \begin{cases} 0 & \varepsilon - E_0 < -2V \\ \sqrt{V^2 - (\varepsilon - E_0)^2/4} & |\varepsilon - E_0| < 2V \\ 0 & \varepsilon - E_0 > 2V \end{cases}. \quad (2.26)$$

Por otra parte

$$\Delta(\varepsilon) = \begin{cases} (\varepsilon - E_0)/2 + \sqrt{(\varepsilon - E_0)^2/4 - V^2} & \varepsilon - E_0 < -2V \\ (\varepsilon - E_0)/2 & |\varepsilon - E_0| < 2V \\ (\varepsilon - E_0)/2 - \sqrt{(\varepsilon - E_0)^2/4 - V^2} & \varepsilon - E_0 > 2V \end{cases}, \quad (2.27)$$

La elección del signo de las raíces en la componente real indica que la corrección a la energía a un estado lejos de los autovalores de la cadena se cancela. La figura (2.3) muestra gráficamente la solución obtenida.

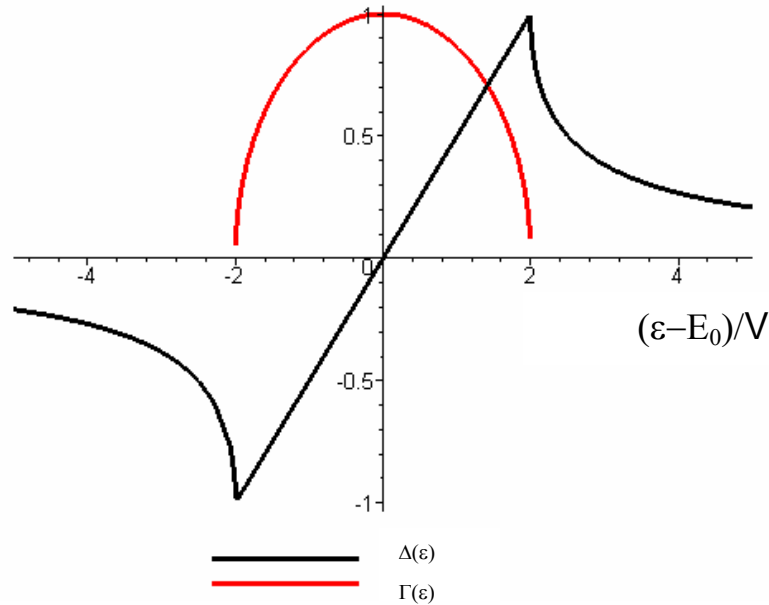


Figura 2.3

Es importante notar nuevamente que al sustituir el sistema finito por el infinito, la naturaleza de los estados ha cambiado. Es decir cuando N es finito Σ es puramente real, en cambio si $N \rightarrow \infty$ Σ tiene parte real e imaginaria.

Esto se debe a que dentro de la banda ($|\varepsilon - E_0| < 2V$) los estados son extendidos, mientras que fuera de ella son localizados. Pronto asociaremos la parte imaginaria Γ con el decaimiento de un estado resonante.

2.5 Probabilidad de Supervivencia en el sistema Enlaces Fuertes

El desarrollo del trabajo incluye como herramienta el uso de la probabilidad de propagación $P_{n,m}(t)$. Esta función permite obtener la probabilidad de que dado un estado inicial en $|n\rangle$ al tiempo $t=0$, este se encuentre en $|m\rangle$ al tiempo t . Esta se obtiene a partir del elemento (n,m) de la función de Green en su representación temporal, ya que ésta representa la amplitud de probabilidad de la propagación. La función de Green dependiente del tiempo

$$G_{n,m}(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_{n,m}(\varepsilon) e^{-i\varepsilon t/\hbar}. \quad (2.28)$$

De donde resulta

$$P_{n,m}(t) = |i\hbar G_{n,m}(t)|^2. \quad (2.29)$$

En el trabajo estudiaremos la *probabilidad de supervivencia* centrándonos en un sitio al cual denominaremos $|0\rangle$, de esta forma

$$P_{00}(t) = |i\hbar G_{00}(t)|^2. \quad (2.30)$$

Si se calcula $P_{00}(t)$ para la cadena de Enlaces Fuertes infinita (i.e. infinita hacia ambos lados del sitio 0), se obtiene

$$P_{00}(t) = \left| J_0(2Vt/\hbar) \right|^2, \quad (2.31)$$

donde $J_n(x)$ es la Función de Bessel de primera especie y de orden n .

2.6 Densidad de estados en el Hamiltoniano “Enlaces Fuertes”.

A partir de la teoría de Funciones de Green se puede obtener la Densidad Local de Estados (LDOS) en el sitio $|n\rangle$, la cual nos permite analizar la dinámica del sistema. Ésta se expresa como

$$N_n(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{n,n}(\varepsilon)]. \quad (2.32)$$

En el gráfico (2.1) se muestra la densidad local de estados para una cadena semi-infinita en el sitio $|0\rangle$. Allí se puede observar que existe una región que se denomina Banda de Estados Permitidos, donde la función LDOS es distinta de cero.

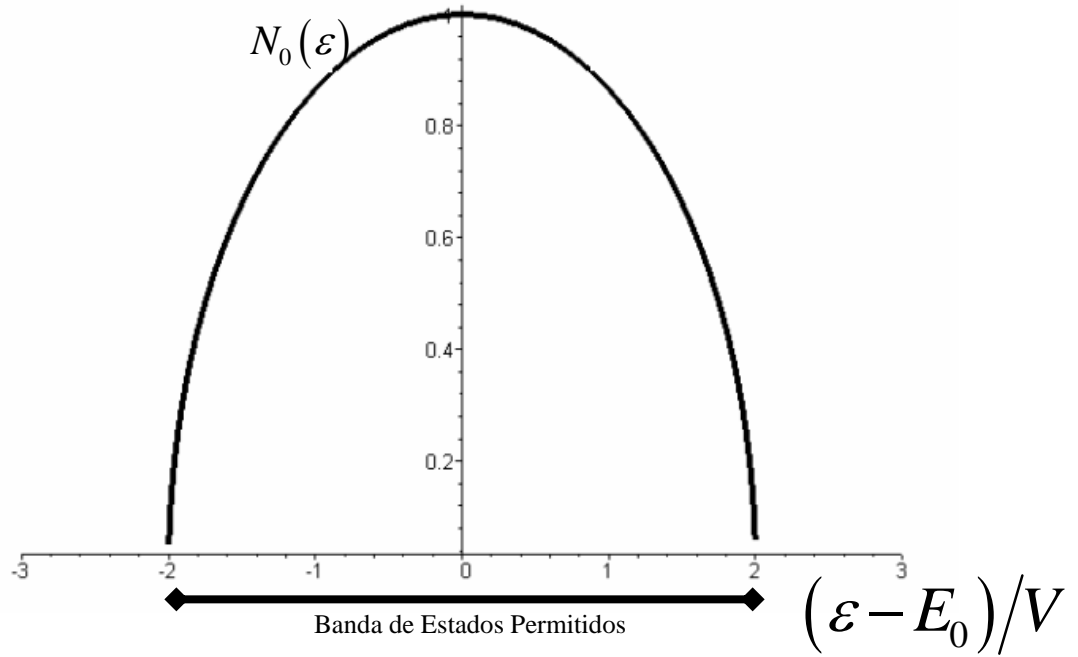


Gráfico 2.1: Densidad local de estados para una cadena semi infinita.

La densidad de estados puede ser diferente de cero en puntos aislados si es que posee estados localizados. Para poder apreciar que existen estados localizados, se puede utilizar la siguiente expresión para la densidad local de estados

$$N_0(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{00}(\varepsilon + i\eta)] \right).$$

De esta forma podemos definir

$$N_0(\varepsilon + i\eta) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{00}(\varepsilon + i\eta)].$$

Al graficar la función $N_0(\varepsilon + i\eta)$ se puede observar que los estados localizados, si existen, aparecen como funciones lorentzianas centradas en la posición del estado localizado, y con un ancho η (ver Gráfico 2.2).

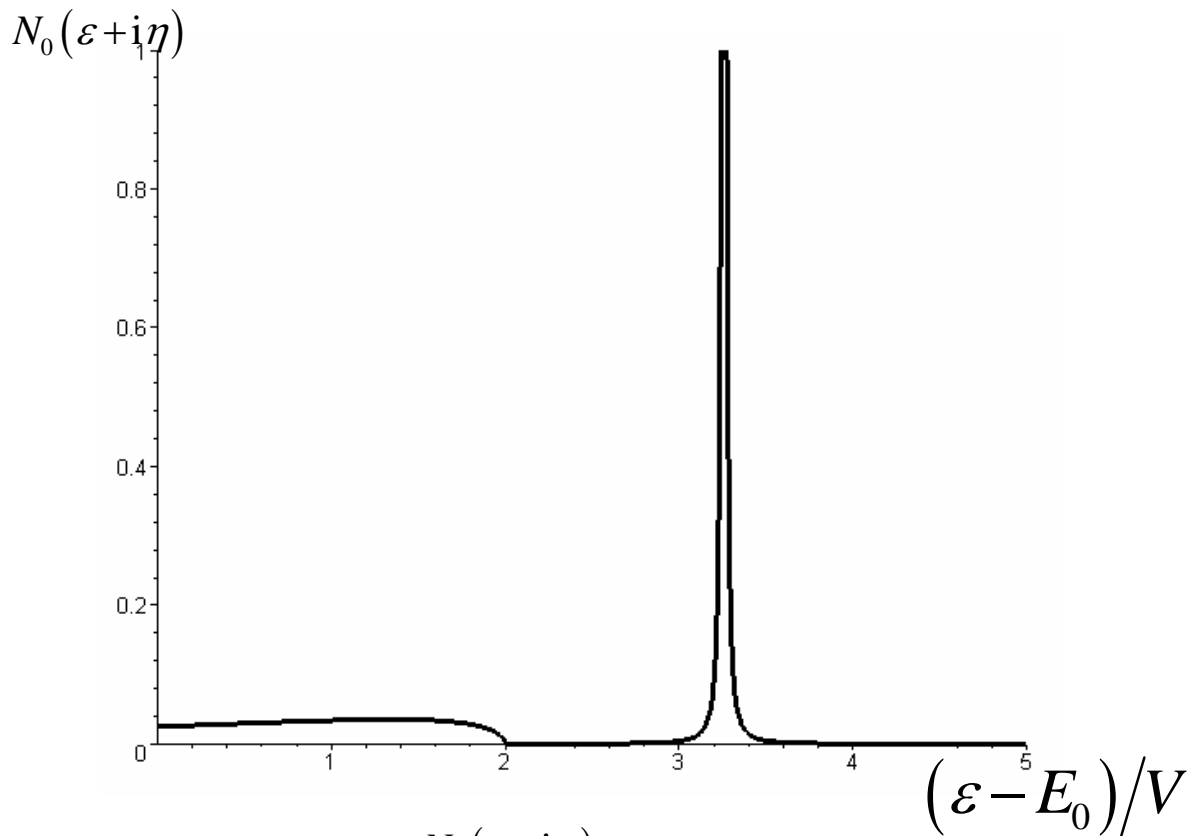


Gráfico 2.2: $N_0(\varepsilon + i\eta)$ para un valor fijo de η

2.7 Estado Resonante.

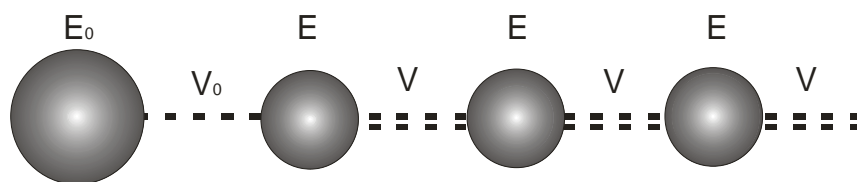


Figura 2.4

Introduciremos ahora un modelo de Enlaces Fuertes que contiene algunos elementos no triviales y que nos permitirá ilustrar como funciona el formalismo de funciones de Green. Consideremos un sistema compuesto por un sitio de energía E_0 acoplado mediante una amplitud de salto (o *Hopping*) V_0 a una cadena de N sitios con energía de sitio E y amplitud de salto V , con $V_0 < V$

(ver Figura 2.4). Este modelo representa un estado superficial (Sitio $|0\rangle$) en “contacto” con un “ambiente” (la cadena Semi-Infinita).

A lo largo del trabajo se usará el concepto de Estados Resonantes que representan la energía modificada del estado superficial y que los mismos pueden identificarse como los polos complejos de la función de Green. En el caso de dimensión finita aún cuando los polos solo pueden ocurrir en valores reales, las resonancias pueden identificarse a través de picos en la densidad espectral. Es decir, cuando el estado superficial “entra en contacto” con el “ambiente”, su energía se ve corregida por la interacción con el resto del sistema (ver Figura 2.5) y ensanchada por la mezcla con el espectro denso de estados extendidos. Consecuentemente, si los polos poseen parte real E_r y parte imaginaria Γ_r , podemos pensar que E_r es la energía corregida del estado superficial y Γ_r representa su ancho de línea. Esto indica que una partícula puesta inicialmente en el sitio $|0\rangle$ decaerá con un tiempo de vida medio $1/\Gamma_r$. En secciones posteriores analizaremos en detalle esta afirmación.

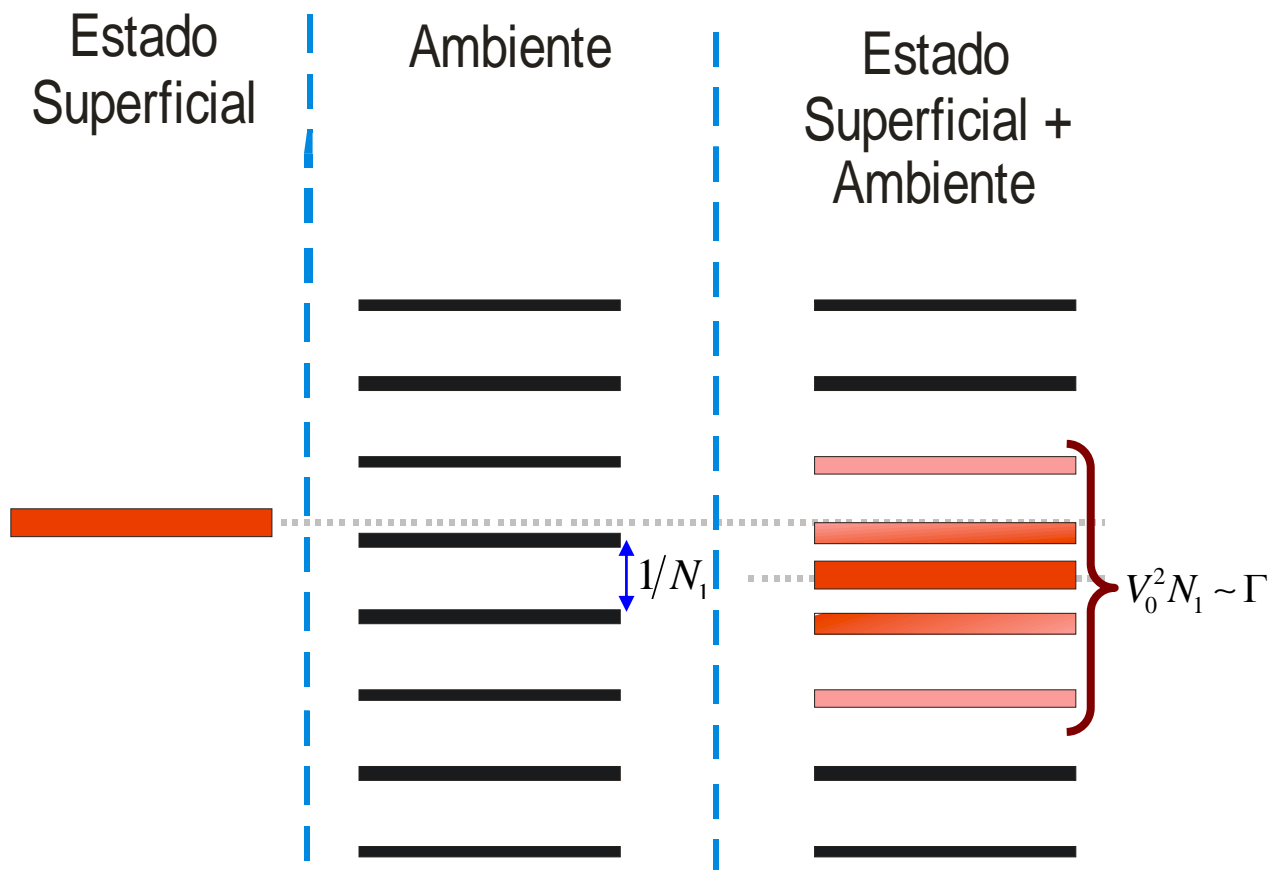


Figura 2.5

En el gráfico 2.3 se puede observar como afectan los estados resonantes a la densidad local de estados. En el gráfico de la izquierda se muestra $N_1(\varepsilon)$ para la cadena semi-infinita, mientras que a la derecha se encuentra la densidad local de estados para el sistema de “estado superficial en contacto con el ambiente”.

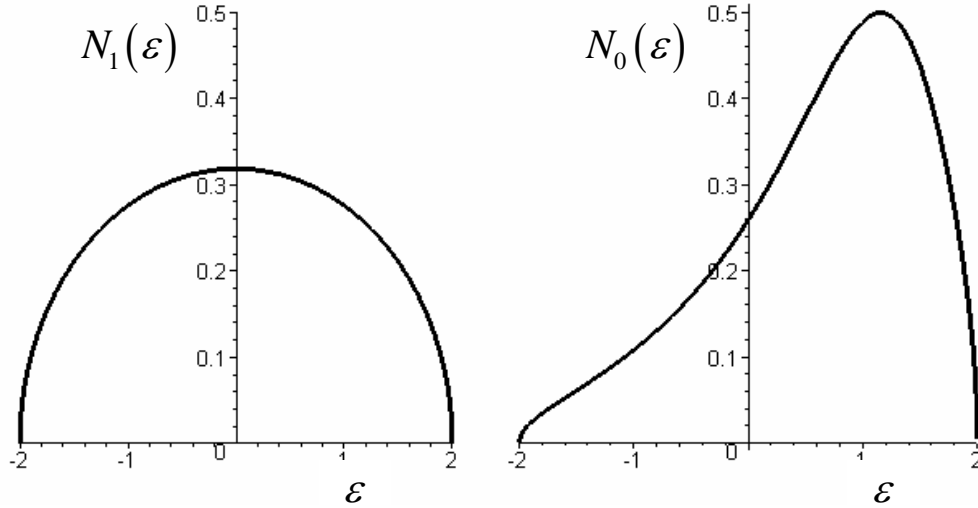


Gráfico 2.3: Izq: Densidad local de estados para una cadena semi-infinita con $E = 0$ y $V = 1$. Der: Densidad local de estados para un sitio de energía $E_0 = 0.5$ y $V_0 = \sqrt{3/4}$ acoplado a una cadena semi-infinita con $E = 0$ y $V = 1$.

A partir de los gráficos se puede ver que

$$N_0(\varepsilon) = L(\varepsilon) \times N_1(\varepsilon), \quad (2.33)$$

donde en secciones posteriores se observará que $L(\varepsilon)$ es una función Lorentziana que posee su centro en el valor de la energía de resonancia E_r y tiene un ancho característico Γ_r .

Si se observa la densidad local de estados en función del sitio n se ve que el estado resonante presenta un pico en la densidad correspondiente al primer sitio, mientras que la densidad en el resto de los sitios casi no presenta variaciones con respecto a la densidad de una cadena semi-infinita (ver Gráfico 2.4).

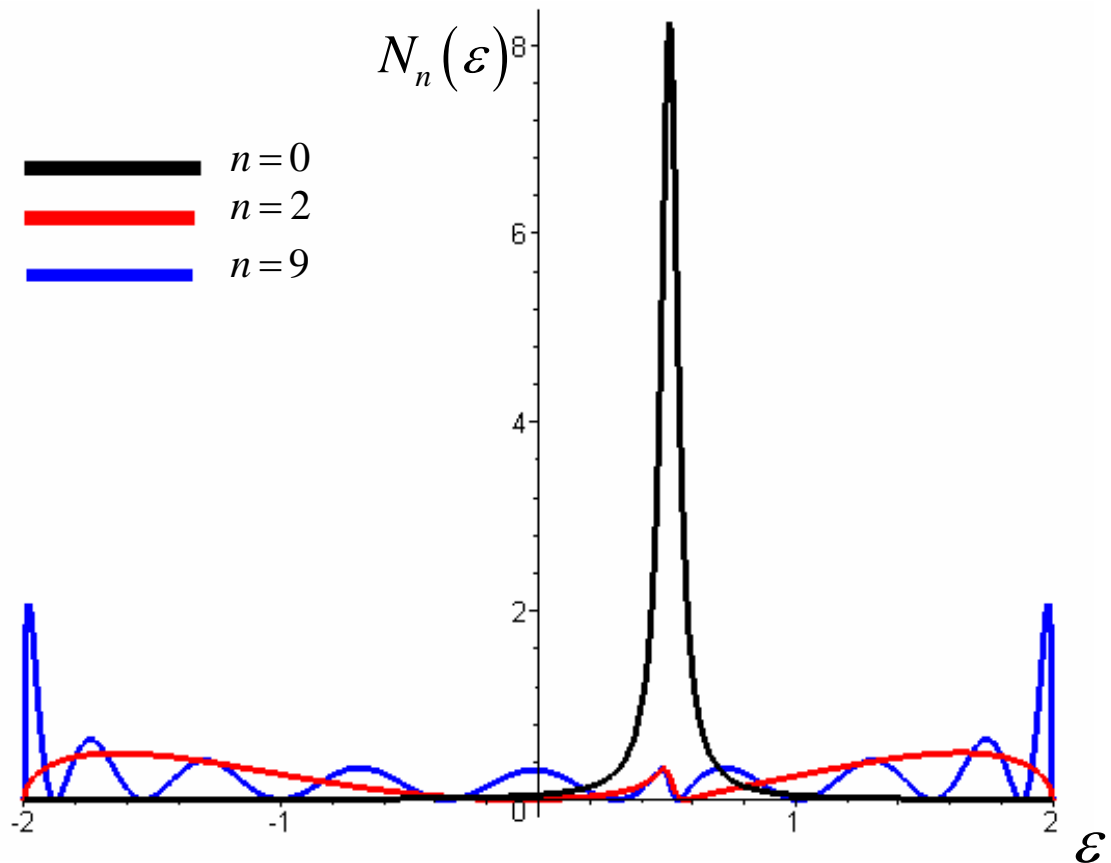


Gráfico 2.4

Si se grafica $N_n(E_r)$ en el valor de la energía de resonancia se puede observar que presenta un pico en el primer sitio (ver gráfico 2.5).

En el gráfico 2.5 se puede observar que el sitio $|1\rangle$ posee un valor muy próximo a cero. Esto puede ser observado si se analiza la función de Green para este sitio

$$G_{11}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E - \frac{V_0^2}{\varepsilon - E_0} - \Sigma_{11}^0(\varepsilon)}$$

Aquí se puede observar que si ε adquiere valores cercanos a E_0 , la función de Green se aproxima a cero.

Esto mismo puede ser observado si se analiza la función de Green para el sitio $|n\rangle$

$$G_m(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E - V_{n-1,n-1}^2 \Sigma_{n-1,n-1}^{0-}(\varepsilon) - V_{n+1,n+1}^2 \Sigma_{n+1,n+1}^{0+}(\varepsilon)} \quad (2.34)$$

donde $\Sigma_{n-1,n-1}^{0-}(\varepsilon)$ representa el ambiente *finito* que el sitio $|n\rangle$ observa a la izquierda, y $\Sigma_{n+1,n+1}^{0+}(\varepsilon)$ representa el ambiente *infinito* que el sitio observa hacia la derecha. De esta ecuación se puede ver que $\Sigma_{n-1,n-1}^{0-}(\varepsilon)$ es una función que depende de $\varepsilon - E$ y de $\varepsilon - E_0$, por lo que si ε se acerca a cualquiera de estos dos valores, pueden aparecer divergencias, lo que implicaría un cero en la densidad local de estados.

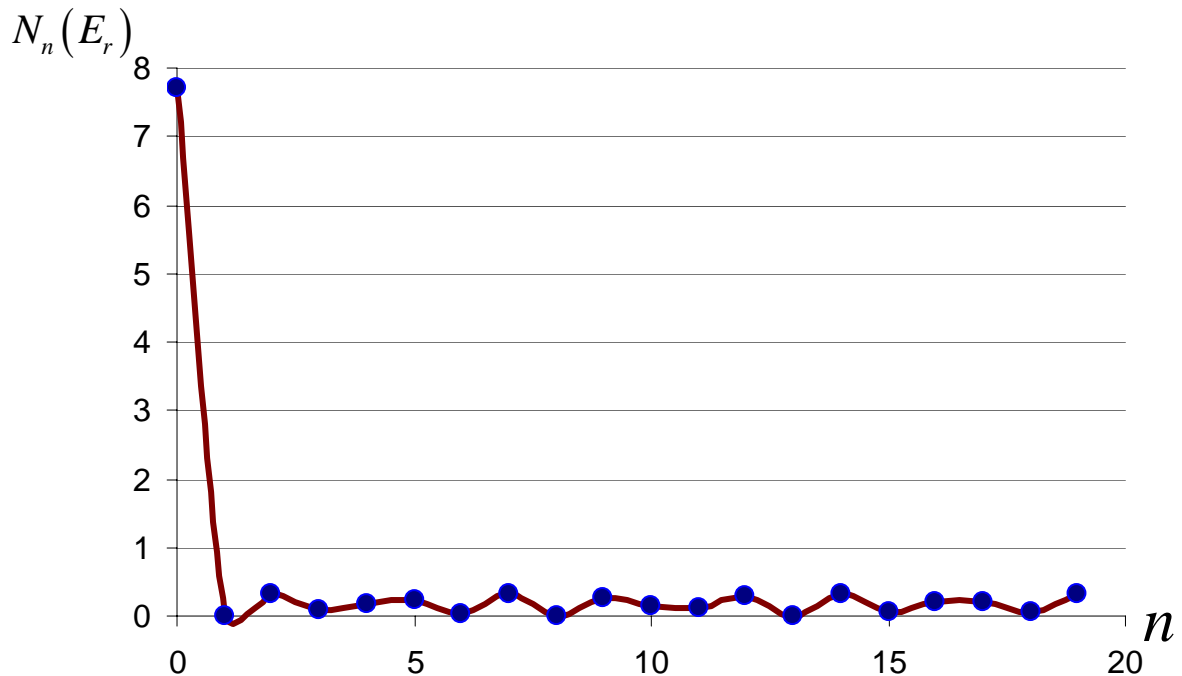


Gráfico 2.5

2.8 Función de Green y amplitud de dispersión elástica

Se ha discutido el significado de propagación contenido en la función de Green. Es interesante completar la relación con los elementos de una matriz de dispersión. Esta relación fue introducidos para un modelo continuo por Fisher y Lee [FL81] y adaptada para un modelo de enlaces fuertes por D'Amato y Pastawski [DP90]. Consideremos un sistema extendido como el de la figura 2.6 en el cual es posible realizar un experimento de dispersión de una onda que se propague a través de la inhomogeneidad ubicada en el centro y representada por el sitio E_0 (ver figura 2.6) [Fey65 pag. 13-14].

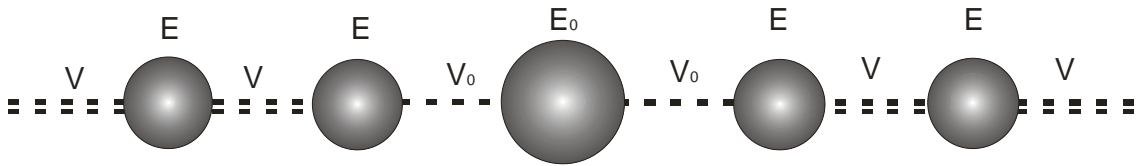


Figura 2.6

Si consideramos dos puntos, L y R ubicados respectivamente a la izquierda y a la derecha de la inhomogeneidad. La semicadena que está a la izquierda de L renormaliza la energía de ese sitio con una cantidad $\Sigma_L(\varepsilon) = \Delta_L(\varepsilon) - i\Gamma_L(\varepsilon)$ que se evalúa según los procedimientos descritos más arriba. Análogamente sería corregida la energía de un sitio a la derecha de la inhomogeneidad $\Sigma_R(\varepsilon) = \Delta_R(\varepsilon) - i\Gamma_R(\varepsilon)$. La amplitud de transmisión de una onda que incide desde la izquierda resulta

$$t_{LR}(\varepsilon) = i\hbar\sqrt{\Gamma_L(\varepsilon)}G_{LR}(\varepsilon)\sqrt{\Gamma_R(\varepsilon)} \quad (2.35)$$

Para interpretar esta formula es útil recordad que $\Gamma_L(\varepsilon)$ es esencialmente la velocidad de grupo de un paquete de ondas construido con la energía ε .

Obviamente las propiedades analíticas de la función de Green y de la matriz de dispersión están íntimamente relacionadas. De cualquiera de ellas se pueden obtener información relevante sobre densidades de estados, fases, interferencias y propiedades estadísticas [FTPM06].

Capítulo 3. Configuraciones moleculares

En este capítulo analizaremos varios modelos de Enlaces Fuertes (Tight Binding). Se estudiará el comportamiento de las energías de resonancia, los autovalores, los fenómenos de localización y las transiciones de fase. Dividimos nuestro análisis en 3 secciones. En la primera se discutirá sobre el sistema de un átomo enlazado débilmente a una cadena de longitud infinita. En la segunda sección avanzaremos en complejidad, por lo que estudiaremos el sistema de dímero sobre un sustrato (cadena lineal). Y por último se mostrarán otras configuraciones moleculares que pueden ser expresadas en función de los sistemas analizados en las primeras dos secciones.

3.1 Átomo adsorbido en un sustrato

En esta sección trabajaremos con el modelo representado en la figura (2.4). Lo primero debemos observar es que los resultados que se obtendrán dependerán de la diferencia de energía $E - E_0$. Para ello veamos que

$$G_{00}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2}(\Delta(\varepsilon) - i\Gamma(\varepsilon))}, \quad (3.1)$$

$$G_{00}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[(\varepsilon - E)/2 + \sqrt{(\varepsilon - E)^2/4 - V^2} \right]} & \varepsilon - E < -2V \\ \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[(\varepsilon - E)/2 - i\sqrt{V^2 - (\varepsilon - E)^2/4} \right]} & |\varepsilon - E| < 2V \\ \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[(\varepsilon - E)/2 - \sqrt{(\varepsilon - E)^2/4 - V^2} \right]} & \varepsilon - E > 2V \end{cases} \quad (3.2)$$

Si se reemplaza ε por $\varepsilon + E$ se obtiene

$$G_{00}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon - (E_0 - E) - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 + \sqrt{\varepsilon^2/4 - V^2} \right]} & \varepsilon < -2V \\ \frac{1}{\varepsilon - (E_0 - E) - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]} & |\varepsilon| < 2V \\ \frac{1}{\varepsilon - (E_0 - E) - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - \sqrt{\varepsilon^2/4 - V^2} \right]} & \varepsilon > 2V \end{cases} \quad (3.3)$$

De esta forma se ve que es equivalente resolver la ecuación (3.2) usando la energías de sitio E y E_0 , a resolver el mismo problema usando $E'_0 = E_0 - E$ y $E' = 0$. Esto confirma que las propiedades físicas de nuestro sistema solo dependen de la diferencia de energía y no de sus valores absolutos. El resultado obtenido simplificará las expresiones analíticas. A partir de esto la función de Green puede expresarse como

$$G_{00}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 + \sqrt{\varepsilon^2/4 - V^2} \right]} & \varepsilon < -2V \\ \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]} & |\varepsilon| < 2V \\ \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - \sqrt{\varepsilon^2/4 - V^2} \right]} & \varepsilon > 2V \end{cases} \quad (3.4)$$

En la ecuación (3.4) se ve que la banda de estados permitidos se entiende desde $-2V$ hasta $2V$. También se puede observar la presencia de regiones en donde los polos de la función de green pueden ser reales puros o pueden contener partes imaginarias. Claramente se puede observar que en las regiones $[-\infty, -2V]$ y $[2V, \infty]$ los polos son reales puros. En la región $[-2V, 2V]$ uno podría pensar que los polos son siempre complejos, sin embargo esto no es así. Para encontrar que puede haber polos reales, se calcula la función en esa región, buscando los valores de ε_r tal que

$$\frac{1}{G_{00}(\varepsilon_r)} = 0, \quad (3.5)$$

$$0 = \varepsilon_r - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon_r/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon_r^2/4} \right]. \quad (3.6)$$

El resultado de esta a esta ecuación es (ver apéndice A-I)

$$\varepsilon_r = \frac{E_0(2V^2 - V_0^2)}{2(V^2 - V_0^2)} - \frac{V_0^2 \sqrt{E_0^2 - 4(V^2 - V_0^2)}}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (3.7)$$

El hecho de que se haya obtenido un único polo confirma que representa la energía modificada del átomo. Es necesario notar que si $V_0 = 0$ el valor del polo coincide con la energía del átomo aislado.

A partir de la ecuación (3.7) se observa que

$$E_0^2 - 4(V^2 - V_0^2) = 0, \quad (3.8)$$

es un valor crítico de E_0 en el que la parte imaginaria del polo se hace cero. Es decir, el polo se encuentra dentro de la banda permitida y posee valor real puro.

De ahora en más fijaremos el valor $V = 1$ para cualquier gráfico que se analice.

En el Gráfico 3.1 se muestra el espacio paramétrico $[E_0, V_0]$ en que la curva correspondiente a la ecuación (3.8) delimita la región en la que los polos son complejos de la que son reales. La parte sombreada se corresponde con las resonancias (polos complejos, que de ahora en más denominaremos Región I).

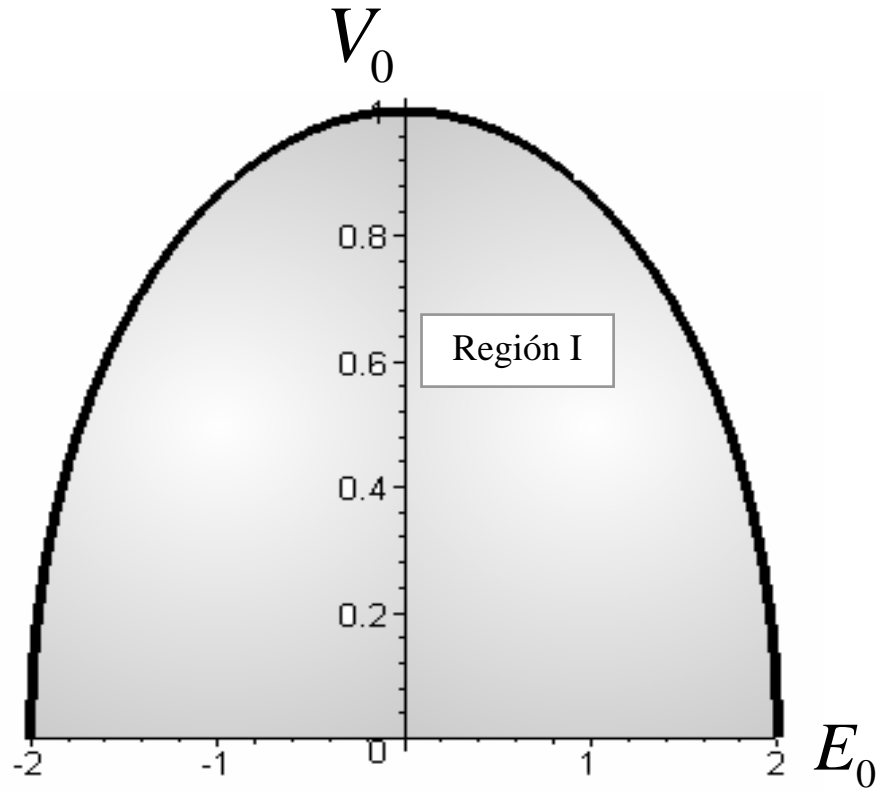


Gráfico 3.1

Aunque la presencia de polos complejos, implica la existencia de estados extendidos y un espectro continuo, existen modelos en que los estados localizados, que correspondan a polos reales, pueden coexistir con el espectro continuo [PM01].

Procedamos a analizar la densidad local de estados en la Región I. Para ello recordemos que

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{00}(\varepsilon)], \quad (3.9)$$

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\varepsilon_r - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon_r/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon_r^2/4} \right]} \right]. \quad (3.10)$$

Usando los cálculos realizados en el apéndice A-II se puede ver que

$$N(\varepsilon) = N_1(\varepsilon) \times \frac{2c\Gamma_r}{(\varepsilon - E_r)^2 + \Gamma_r^2}, \quad (3.11)$$

$$N(\varepsilon) = N_1(\varepsilon) \times L_{(\varepsilon_r, \Gamma_r)}(\varepsilon). \quad (3.12)$$

De este modo la densidad queda expresada como producto de dos funciones. La primera corresponde a la densidad local de estado de una cadena semi-infinita. Mientras que $L_{(\varepsilon_r, \Gamma_r)}(\varepsilon)$ es la función Lorentziana centrada en E_r y de ancho Γ_r . Si se compara la expresión (3.7) contra las ecuaciones (23) y (25) del apéndice, se observa que $\varepsilon_r = E_r - i\Gamma_r$. i.e. la parte real e imaginaria del polo de la función de green son respectivamente el centro y el ancho de la función Lorentziana. Con lo cual podemos interpretar que esta función representa un estado de resonancia en la energía E_r y con decaimiento Γ_r .

Al graficar E_r en función de E_0 (gráfico 3.2) se observa que existen valores que pueden superar el borde de banda, lo cual nos indica que $L_{(\varepsilon_r, \Gamma_r)}(\varepsilon)$ está centrada fuera del borde de Banda permitida. Desde otro punto de vista podemos pensar que al interactuar el estado de sitio con el ambiente, este “expulsa” el polo hacia un valor cuya componente real queda fuera de la banda permitida. Esto ocurre aún sin modificar la naturaleza del autoestado asociado al estado de sitio el cual sigue siendo extendido.

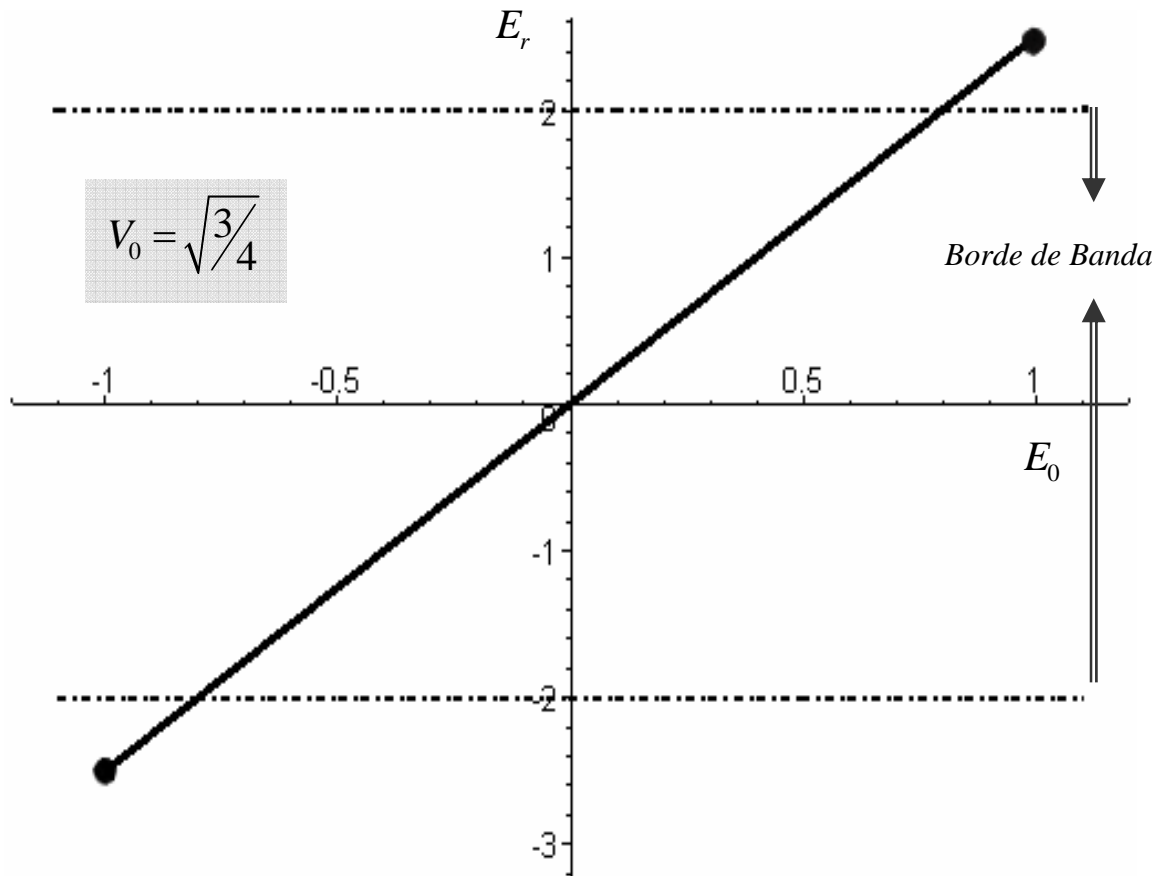


Gráfico 3.2: E_r como función de E_0 en la región I.

Por otro lado si se ve el gráfico 3.3 se puede confirmar que la parte imaginaria se hace efectivamente cero cuando E_0 tiende al borde de la Región I, es decir cuando $E_0 = \pm\sqrt{4(V^2 - V_0^2)}$. En nuestro caso al usar $V = 1$ y $V_0 = \sqrt{3/4}$ los bordes se encuentran en ± 1 .

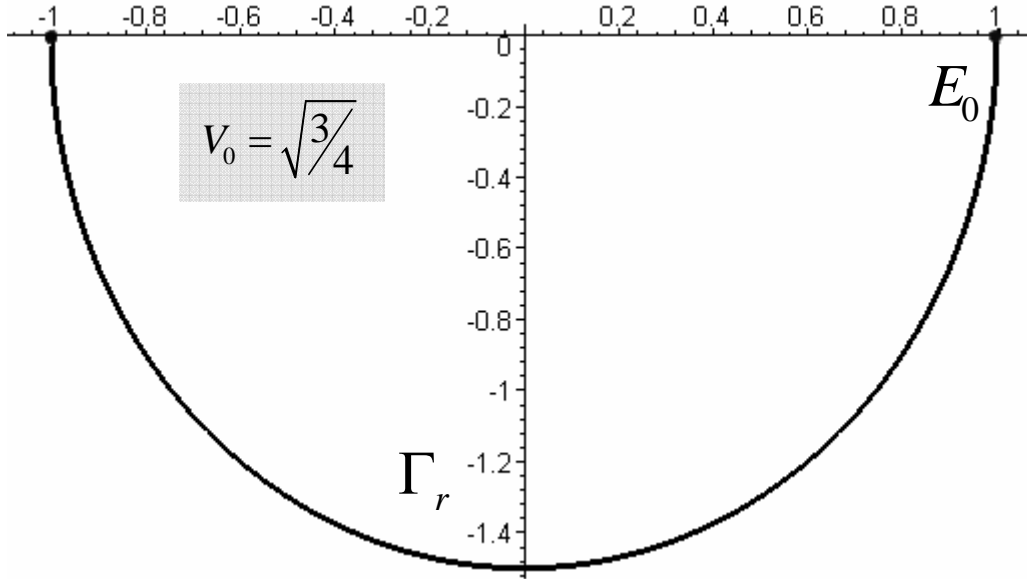


Gráfico 3.3: Γ_r en función de E_0 .

Una vez analizada la Región I, podemos pasar a observar qué sucede en los intervalos $\left[-2V, -\sqrt{4(V^2 - V_0^2)}\right]$ y $\left[\sqrt{4(V^2 - V_0^2)}, 2V\right]$. Aprovechando las propiedades de simetría del problema vemos que se puede obtener un análisis completo con solo observar el intervalo $\left[\sqrt{4(V^2 - V_0^2)}, 2V\right]$.

En el gráfico (3.4) se han delimitado tres regiones. La primera es la estudiada en los párrafos anteriores. La Región II está definida en el intervalo $\left[\sqrt{4(V^2 - V_0^2)}, 2V - V_0^2/V\right]$ y la región III en $\left[2V - V_0^2/V, 2V\right]$. La división entre estas regiones ocurre para el valor $E_0 = 2V - V_0^2/V$, a partir del cual se observan estados localizados (región III). Este valor coincide con el punto en el que el polo de la función de Green toca el borde de banda permitida, i.e. cuando se cumple simultáneamente que ε_r es real y que $\varepsilon_r = 2V$.

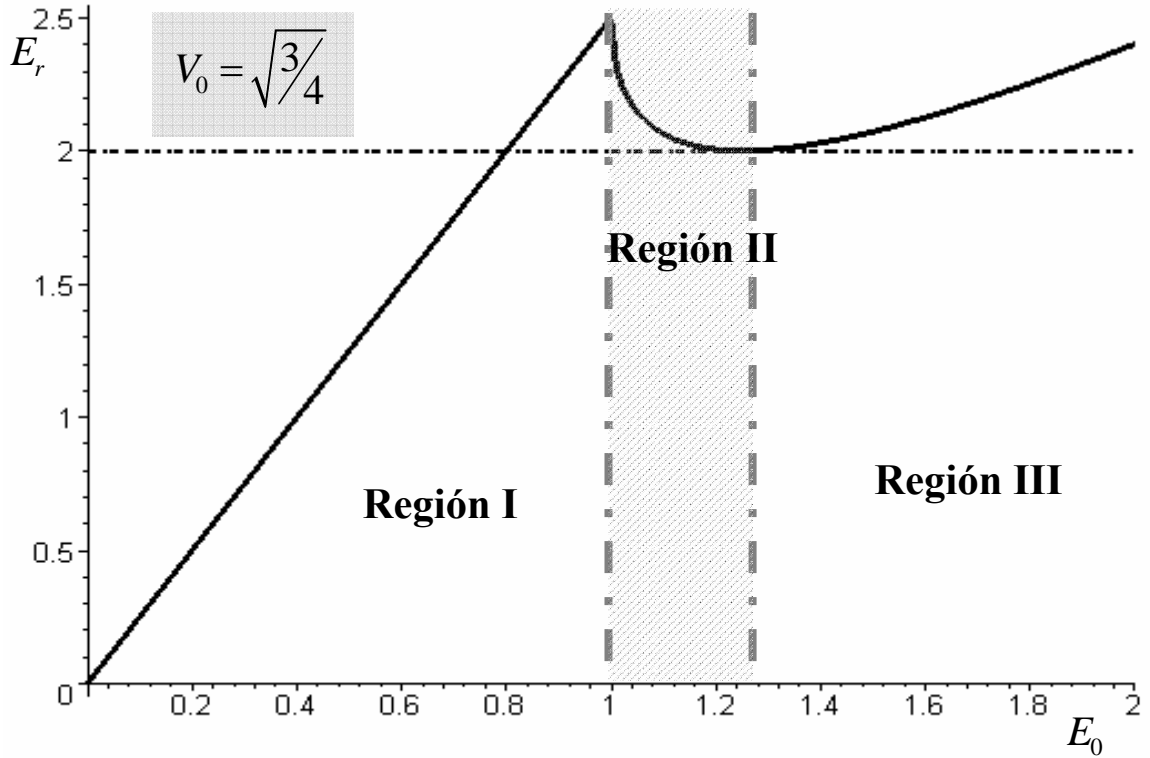


Gráfico 3.4

Para verificar la afirmación se procede a graficar la densidad local de estados, usando como argumento $\varepsilon + i\eta$. Es decir, se hará uso de la propiedad

$$N_0(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{00}(\varepsilon + i\eta)] \right). \quad (3.13)$$

Por lo tanto, se graficará

$$N_0(\varepsilon + i\eta) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{00}(\varepsilon + i\eta)], \quad (3.14)$$

donde se usará η fijo.

Al usar este tipo de gráficos, nos aseguramos poder observar los estados localizados, ya que las funciones deltas de Dirac, que de otra manera tendrían ancho infinitesimal, se “ensanchan” al agregarle una componente imaginaria.

En los gráficos 3.5, 3.6 y 3.7 se puede observar $N(\varepsilon)$ para varios parámetros E_0 . Los gráficos representan las regiones I, II y III respectivamente. En el primero podemos observar cómo el peso de la Lorentziana, desplaza la

densidad hacia la derecha. En el gráfico 3.6 no aparece ningún estado localizado a pesar de que el polo de la función de Green tiene parte imaginaria cero. Al no corresponderse con un autoestado normalizable del sistema, a los polos en esta región se los denominan *Niveles Virtuales*. Estos son discutidos en el contexto de las singularidades de una matriz de dispersión en la base de momentos [LL77, HMT89, Hog95]. En nuestro contexto debemos adaptar estos conceptos a una función de Green en la representación energía. En el gráfico 3.7, en cambio, se observa la presencia de estados localizados. Cabe recalcar que los estados localizados son Deltas de Dirac, por lo que si graficamos $N_0(\varepsilon)$, i.e. hacemos $\eta \rightarrow 0$, no pueden ser observados.

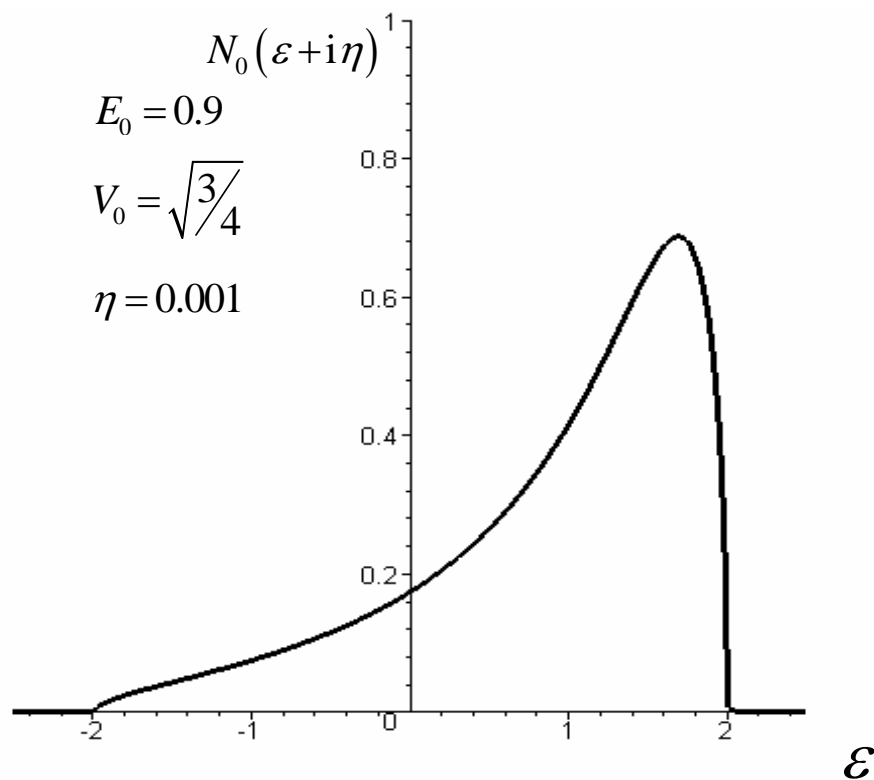


Gráfico 3.5

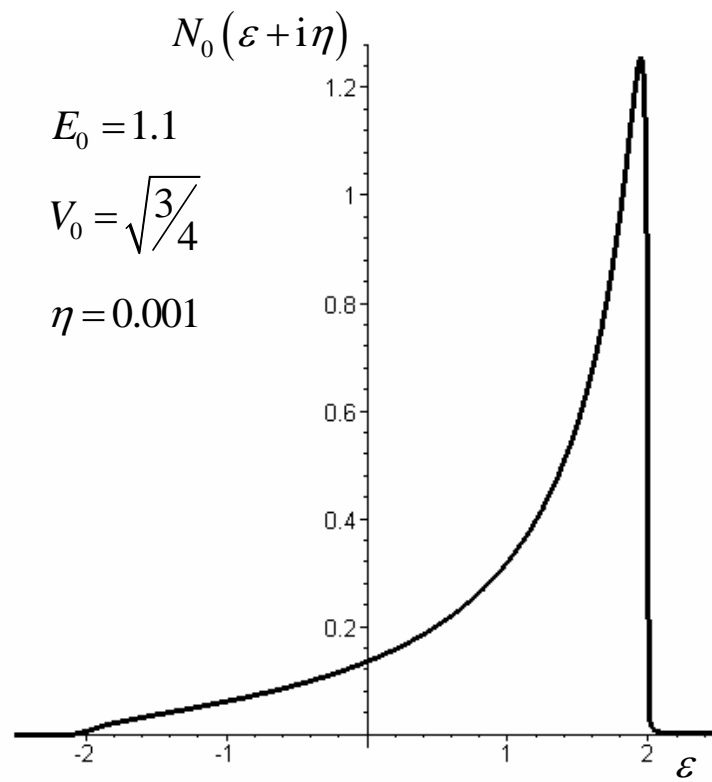


Gráfico 3.6

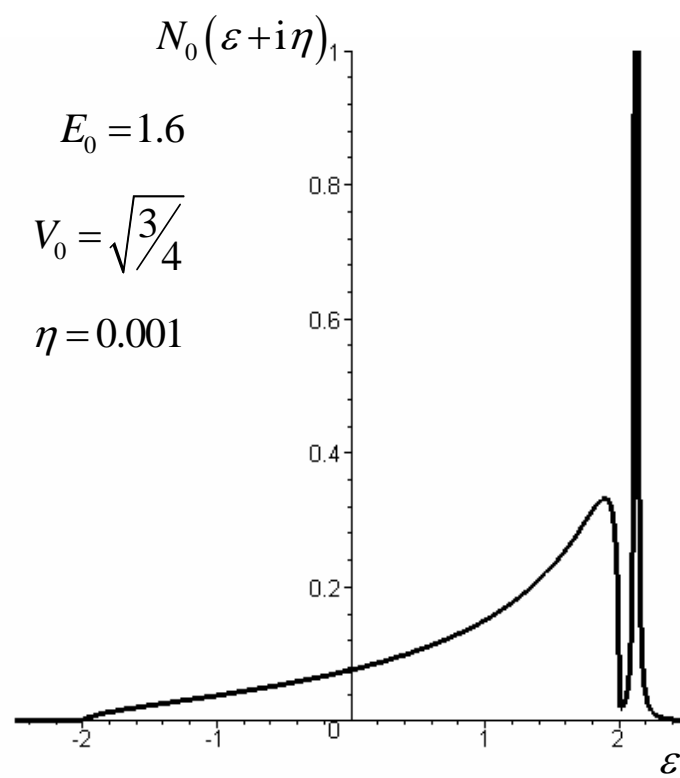


Gráfico 3.7

Analicemos en detalle que sucede en la región II. Para ello debemos introducir las denominadas hojas de Riemann.

Usemos como ejemplo la función $e^{i\sqrt{\lambda}t}$, que podría representar la evolución cuántica que depende de una autoenergía obtenida a través de una hipotética ecuación secular $E = \sqrt{\lambda}$ definido en el intervalo $[0, \infty)$, donde $\sqrt{\lambda} = \alpha + i\beta$. A partir de ella podemos definir la función λ -parametrizada

$$\Phi_{\lambda}(t) = \begin{cases} e^{i\sqrt{\lambda}t} = e^{i\alpha t} e^{-\beta t} & 0 \leq \beta \\ e^{-i\sqrt{\lambda}t} = e^{i\alpha t} e^{-\beta t} & \beta < 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

Esta función tiene diferentes propiedades asintóticas dependiendo del valor de β . A partir de esto es que se puede definir la primera y la segunda hoja de Riemann:

Primera Hoja de Riemann $\rightarrow \beta \geq 0$

Segunda Hoja de Riemann $\rightarrow \beta < 0$

Al observar el límite de la función λ -parametrizada

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-\beta t} = \begin{cases} 0 & \beta > 0 \\ 1 & \beta = 0 \\ \infty & \beta < 0 \end{cases}, \quad (3.16)$$

se ve que en la segunda hoja de Riemann la función λ -parametrizada es divergente en el tiempo y resulta no-integrable. Esto lleva a denominar *no-física* a esta hoja de Riemann. En el gráfico 3.8 se muestra la representación de dos hojas de Riemann. En él se puede observar como al moverse con el parámetro $\sqrt{\lambda} = \alpha + i\beta$ se puede pasar de una hoja a la otra.

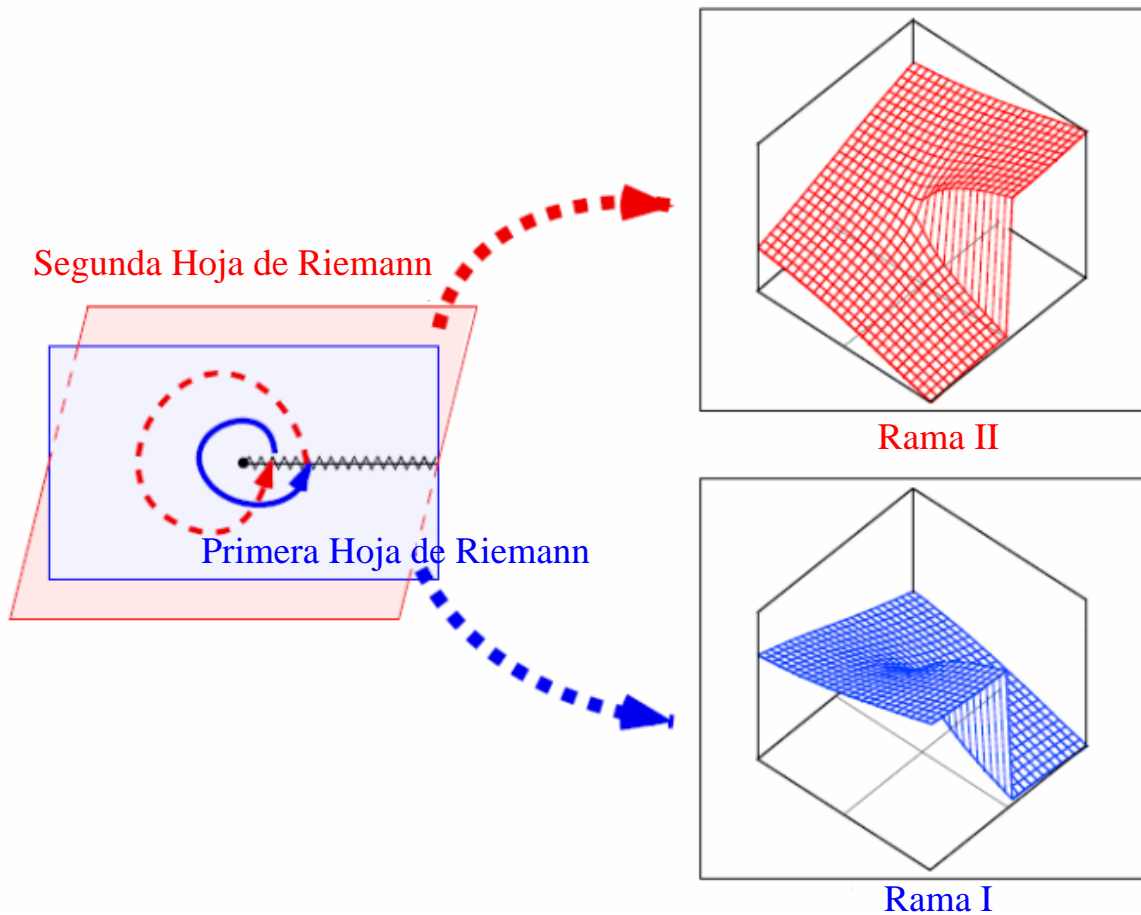


Gráfico 3.8: Representación de dos hojas de Riemann.

Esta característica puede encontrarse en nuestro sistema analizando el comportamiento de $\text{Im}(\varepsilon_r(E_0))$, en donde se reemplaza E_0 por $E_0 - i\eta$. Según hemos discutido con referencia a la ecuación (2.35), el agregar una parte imaginaria negativa a un estado aislado es equivalente a ponerlo en interacción con un medio absorbente [DP90]. Éste condición física permitirá visualizar que el polo de la función de Green en la región II se encuentra dentro de la hoja de Riemann *no-física* del Sistema, mientras que en la región III se encuentra dentro de hoja física.

En el gráfico 3.9 se observa el comportamiento de la función $\text{Im}(\varepsilon_r(E_0 - i\eta))$ con un valores fijos de η . Se puede apreciar que es similar al gráfico 3.3, con la diferencia en el valor $E_0 = 1$ la función tiene un salto brusco

provocado por el intercambio de soluciones del sistema, esto se debe al factor $i\eta$ introducido en el argumento. En el gráfico 3.10 se amplía esta región y se procede a graficar la misma función para distintos valores de η . En él se observa como en el límite $\eta \rightarrow 0$, $\text{Im}(\varepsilon_r(E_0 - i\eta))$ tiende a cero a para $E_0 \geq 1$, lo cual se corresponde con el gráfico 3.3. Si se amplía el gráfico en la región próxima al valor $E_0 = 1.25$ (ver gráfico 3.11), se puede observar que la función tiene signo positivo en la región $1 < E_0 < 1.25$ y cambia de signo en el mismo punto, $E_0 = 1.25$, para todos los valores de η . Esto permite ver que dentro de la región $1 < E_0 < 1.25$ las soluciones se encuentran dentro de la hoja de Riemann no-física, mientras que en la región $E_0 > 1.25$ las soluciones son físicas, lo cual indica que existen autoestados normalizables, son los estados localizados. El valor $E_0 = 1.25$ coincide con la división entre la región II y la región III, es decir $E_0 = 2V - \frac{V_0^2}{V}$. Luego al efectuar $\eta \rightarrow 0$, se ve que el polo en la región II sigue estando en la hoja de Riemann no-física, lo cual implica que estos son niveles virtuales.

Para confirmar los resultados numéricos, se puede observar que en el límite cuando $E_0 \rightarrow \infty$, la función $\text{Im}(\varepsilon_r(E_0 - i\eta))$ tiende al valor de $-\eta$ (ver gráfico 3.12), lo cual se corresponde con el factor de decaimiento $-i\eta$ que se le agregó a la energía local.

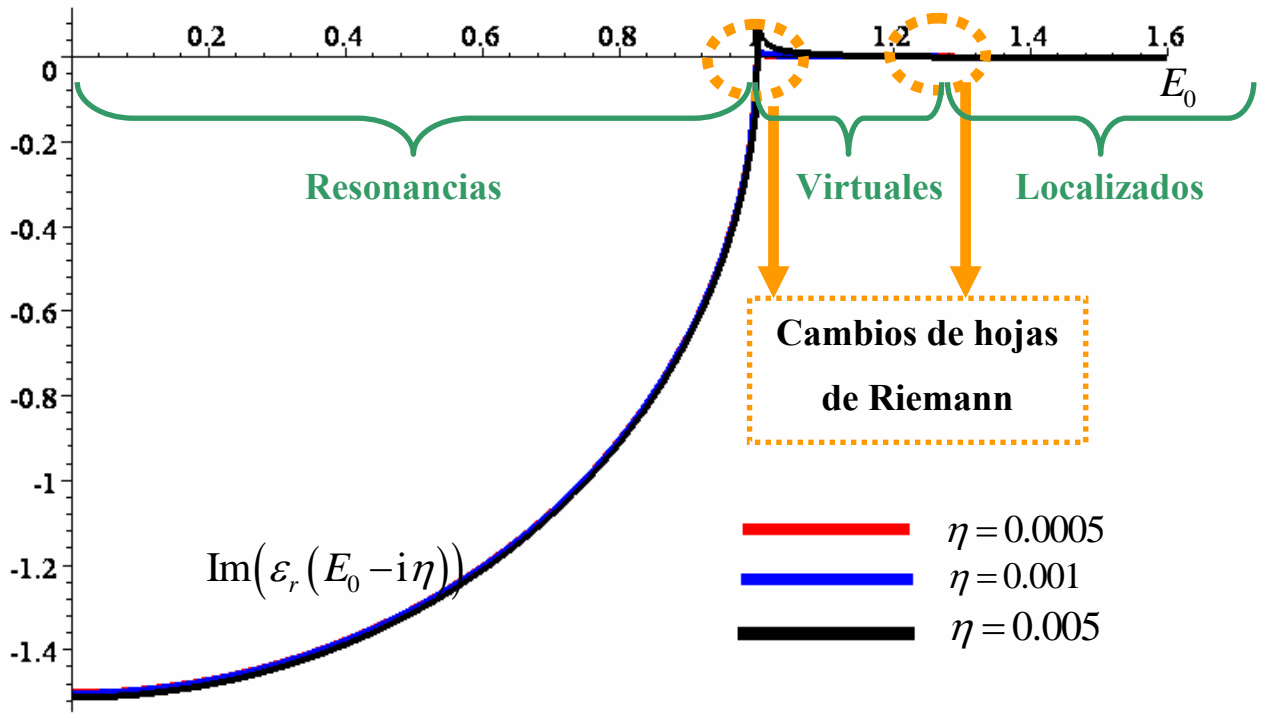


Gráfico 3.9

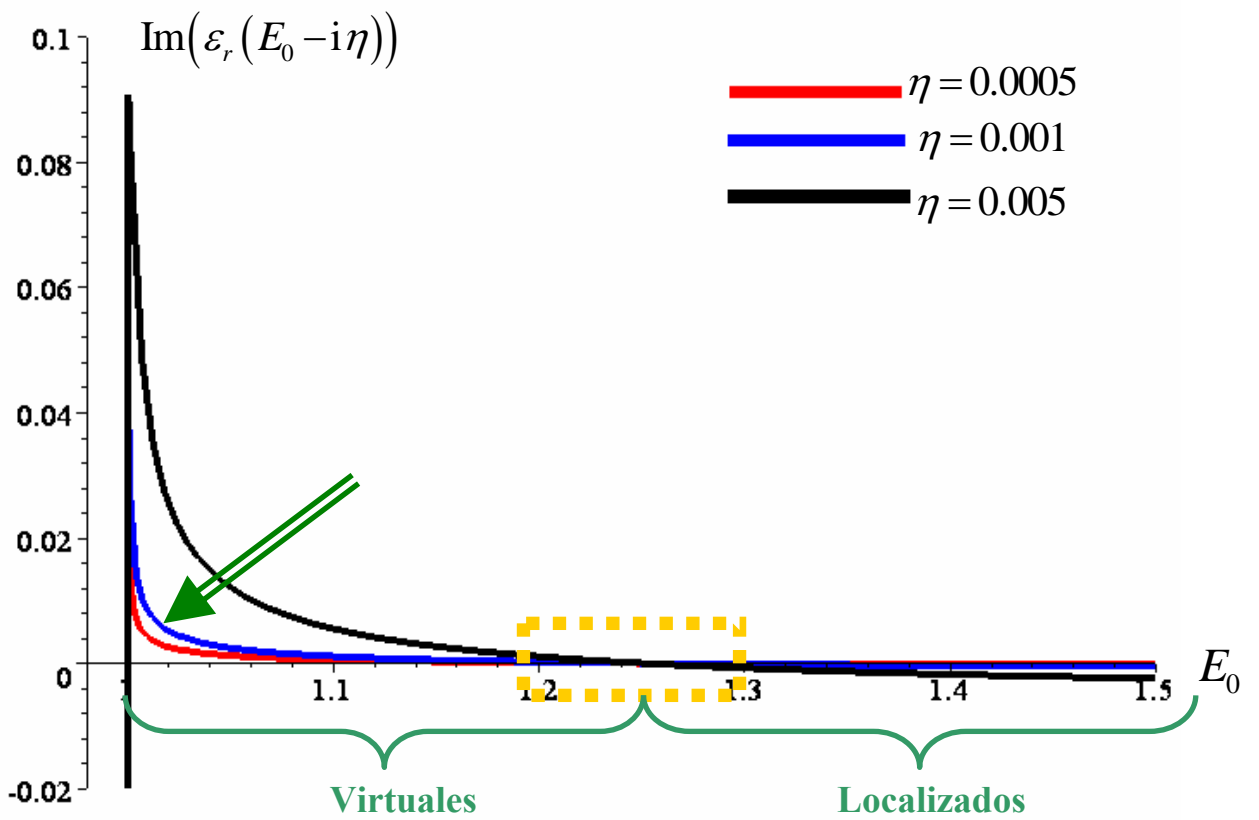


Gráfico 3.10

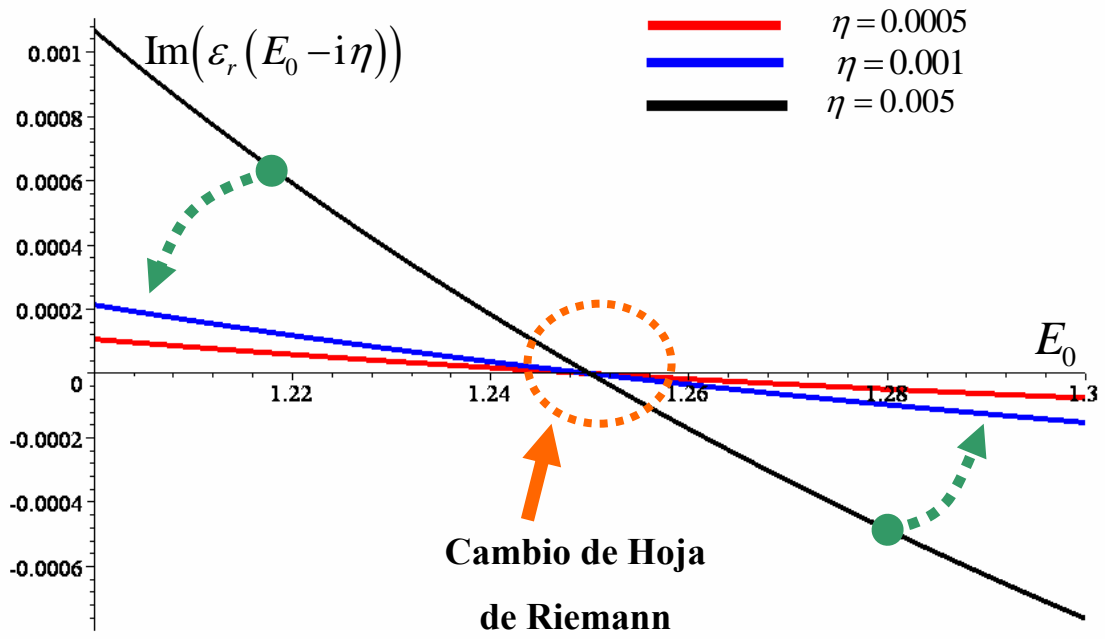


Gráfico 3.11

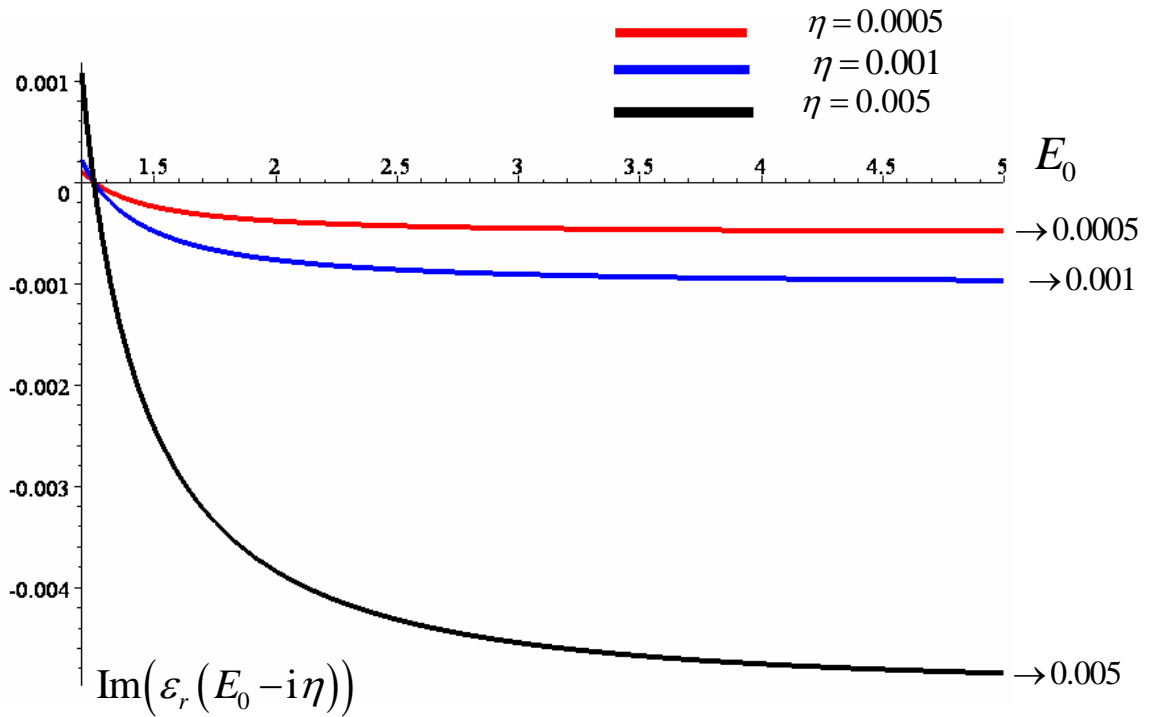


Gráfico 3.12

Por último procederemos a completar el gráfico 3.1 con las curvas que delimitan las tres regiones (Ver Gráfico 3.8). Recordando que solo estudiamos la situación en que $0 < V_0 < V$, podemos observar las tres regiones, en gris la I, en rojo la II y en blanco (sin color) la III (el caso $-V < V_0 < 0$ es simétrico al analizado). En este gráfico se ve que si V_0 se acerca a cero, la región II tiende a desaparecer, i.e. la transición es casi directa en la región uno y la Región II. En la región $V_0 > V$ el sistema “cambia” de configuración, en otras palabras el átomo deja de estar enlazado débilmente al primer sitio de la cadena para conformar un dímero absorbido sobre un sustrato. Este caso lleva a otro nivel de complejidad en el que los dos niveles del dímero interactúan con el continuo del sustrato. En la próxima sección se considerará el caso en que esta interacción es débil.

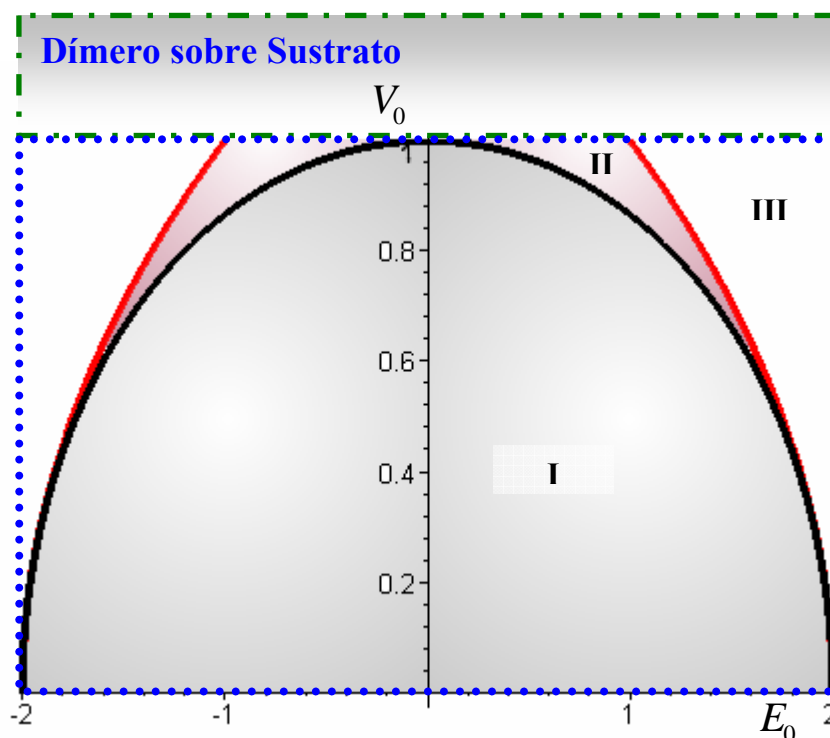


Gráfico 3.13

3.2 Dímero sobre un sustrato

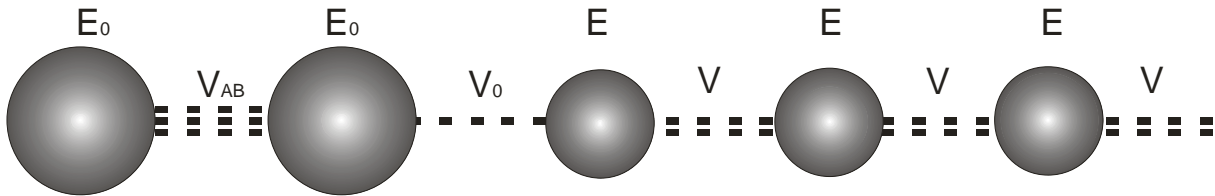


Figura 3.1

En este modelo se consideran dos sitios con energía E_0 con amplitud de salto V_{AB} unida por medio de una interacción débil V_0 a una cadena con energías de sitio E y amplitud de salto V (ver figura 3.1).

Este modelo nos interesa particularmente, ya que nos permite estudiar que efectos produce un ambiente absorbente, sobre la frecuencia de salto entre los dos primeros sitios. Es decir, si colocamos una partícula en el sitio 0 esta posee una cierta probabilidad de pasar al sitio 1 y luego de volver, esto da lugar a una frecuencia de oscilación (ver gráfico 3.14). En el sistema aislado la frecuencia es $\omega_0 = 2V_{AB}/\hbar$. Al adherir los dos primeros sitios a la cadena infinita, se ve que la frecuencia se modifica en un valor $\Delta\omega$, por lo que $\omega = \omega_0 + \Delta\omega$.

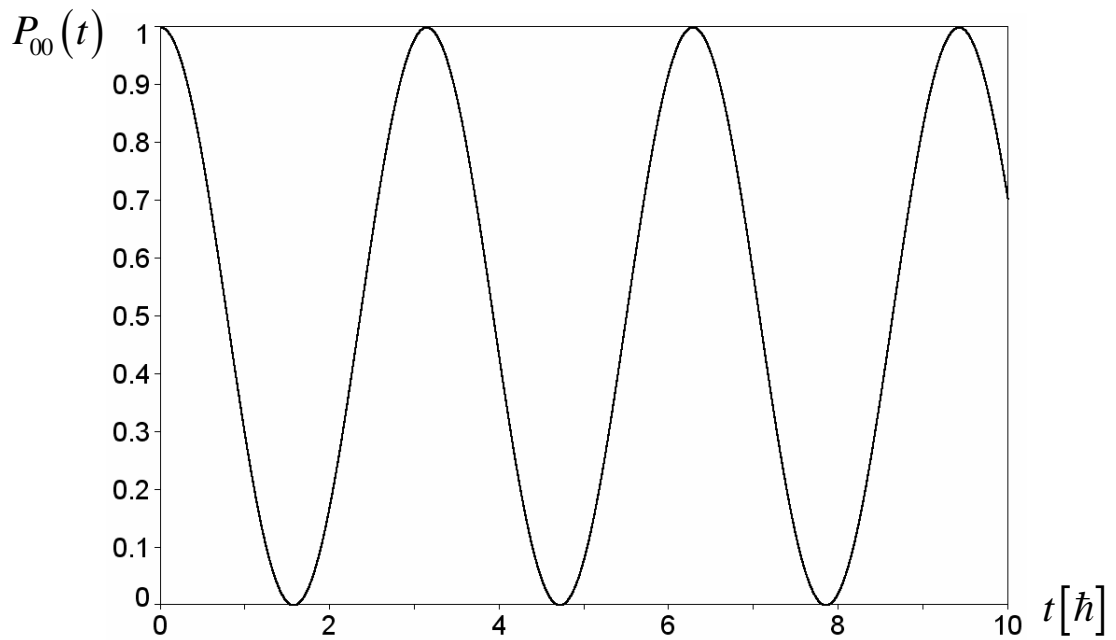


Gráfico 3.14: Probabilidad de encontrar la partícula en el sitio 0 a un tiempo t dado que inicialmente se encontraba en el sitio 0.

Por otra parte, el ambiente produce efectos de pérdida de amplitud sobre el sistema conformado por los dos primeros sitios. Esto significa que si se observa $P_{00}(t)$, se notará un decaimiento en forma aproximadamente exponencial además del comportamiento oscilatorio esperado. En el capítulo 4 se verá que también para tiempos largos el decaimiento se torna una ley de potencias del tipo t^{-3} que puede interpretarse como el predominio de los procesos de difusión cuántica [FP06]. En el gráfico 3.15 podemos observar cómo se produce el decaimiento de la probabilidad de supervivencia.

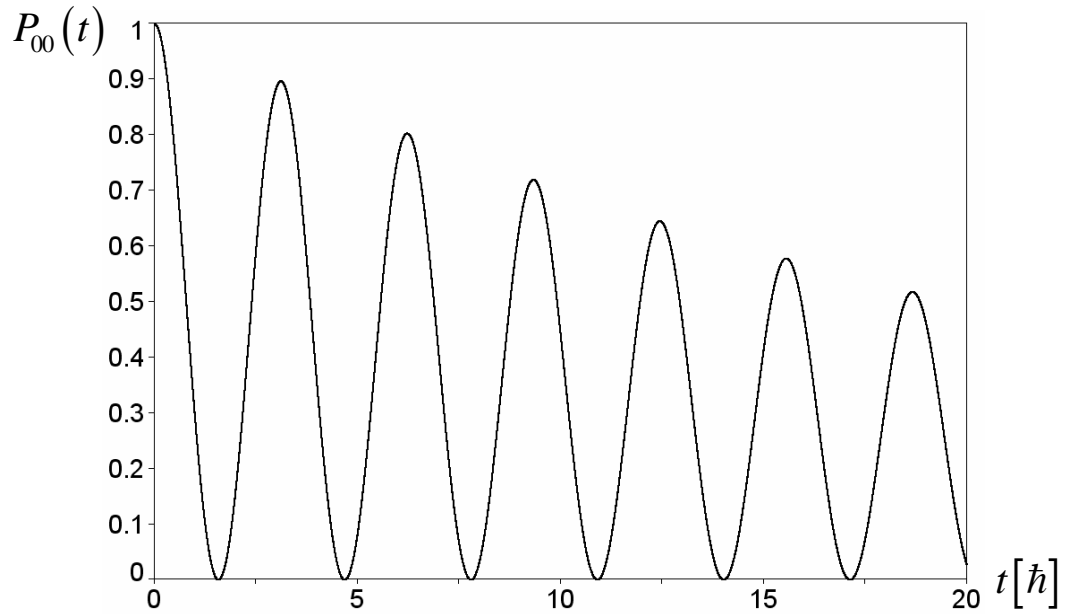


Gráfico 3.15

Procedamos a analizar la función de Green de nuestro sistema.

$$G_{00}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - E_0 - \frac{V_0^2}{V^2} \Sigma(\varepsilon)}}, \quad (3.17)$$

donde $\Sigma(\varepsilon)$ proviene de la ecuación (2.25).

De la misma forma que en el modelo anterior (sección 3.1), se puede usar $\tilde{E} = 0$ y $\tilde{E}_0 = E_0 - E$.

Por el momento solo analizaremos el caso en que $E_0 = 0$. Teniendo esto presente, la función de Green se expresa como

$$G_{00}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 + \sqrt{\varepsilon^2/4 - V^2} \right]}} & \varepsilon < -2V \\ \frac{1}{\varepsilon - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]}} & |\varepsilon| < 2V \\ \frac{1}{\varepsilon - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - \sqrt{\varepsilon^2/4 - V^2} \right]}} & \varepsilon > 2V \end{cases} \quad (3.18)$$

Esta función de Green da lugar a la existencia de dos polos, que asociaremos con las correcciones al sistema de los dos sitios aislados. Al igual que en la sección 3.1 se ve que en el intervalo $|\varepsilon| > 2V$ los polos son reales puros, por lo que centraremos nuestra atención en la región en que $|\varepsilon| < 2V$.

De acuerdo con la ecuación (42) del apéndice B-I, las soluciones para los polos de la función de Green son

$$\varepsilon_r^2 = \frac{V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) - V_0^4 \pm V_0^2 \sqrt{(V_{AB}^2 + V_0^2)^2 - 4V_{AB}^2 V^2}}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (3.19)$$

Las soluciones complejas de 3.19 (es decir las que no están sobre el eje real) pueden ser escritos de la siguiente forma

$$\varepsilon_r^2 = R e^{i\theta}, \quad (3.20)$$

$$\varepsilon_r = \sqrt{R} e^{\pm i \frac{\theta}{2} + i \pi n} \quad n = 0; 1, \quad (3.21)$$

de las cuatro posibles soluciones, solo dos corresponden a energías con componente imaginaria negativa, lo que es condición para ser físicamente aceptables.

En la figura 3.2 se puede observar la posición de las cuatro soluciones posibles. Para obtener decaimiento global en la evolución, las soluciones deben tener parte imaginaria negativa, por lo que se eligen como soluciones

$$\varepsilon_{r1} = \sqrt{R} e^{i \frac{\theta}{2} + \pi} \quad \text{y} \quad \varepsilon_{r2} = \sqrt{R} e^{-i \frac{\theta}{2}}. \quad (3.22)$$

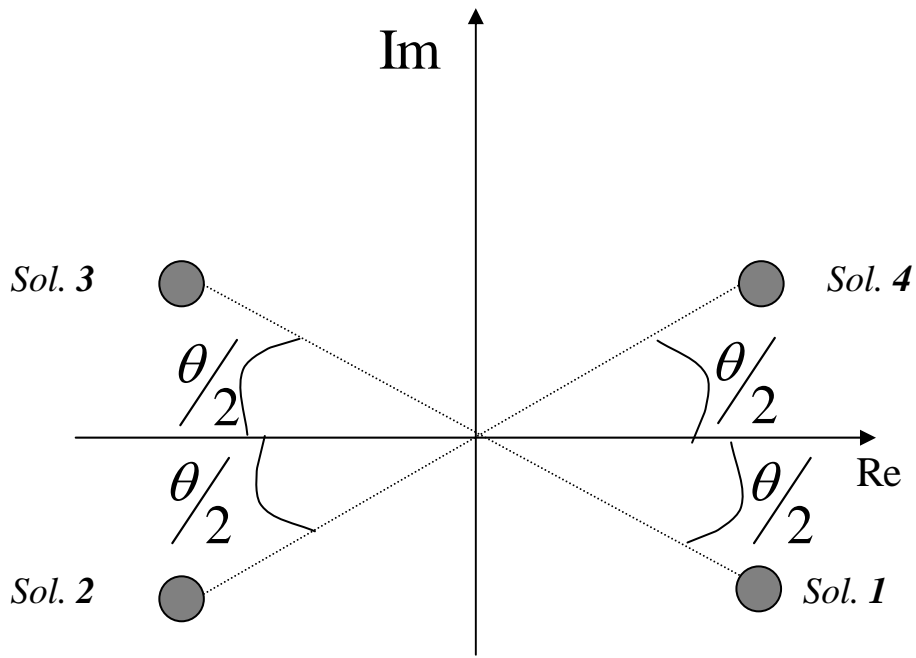


Figura 3.2

Analicemos cuando tenemos polos complejos. A partir de 3.19 vemos que una condición para que existan estados resonantes (i.e. polos complejos) es

$$\left(V_{AB}^2 + V_0^2 \right)^2 - 4V_{AB}^2 V^2 < 0, \quad (3.23)$$

$$V_{AB}^4 + V_0^4 + 2V_{AB}^2 V_0^2 - 4V_{AB}^2 V^2 < 0, \quad (3.24)$$

$$V_{AB}^4 - 2V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) + V_0^4 < 0, \quad (3.25)$$

Resolviendo la ecuación cuadrática se obtiene

$$V_{AB}^2 = (2V^2 - V_0^2) \pm 2\sqrt{V^2 (V^2 - V_0^2)}, \quad (3.26)$$

$$V_{AB} = \pm \left[(2V^2 - V_0^2) \pm 2\sqrt{V^2 (V^2 - V_0^2)} \right]^{1/2}, \quad (3.27)$$

De acuerdo con la ecuación (3.27) existen 4 puntos donde sucede el cambio de signo. En el gráfico 3.16 se muestra el discriminante $(V_{AB}^2 + V_0^2)^2 - 4V_{AB}^2 V^2$ como función de V_{AB} , apreciándose los cuatro puntos donde la curva corta al eje. A partir de esto se puede concluir que las regiones que poseen polos complejos vienen dadas por

$$V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} < V_{AB} < V + (V^2 - V_0^2)^{1/2}, \quad (3.28)$$

y por

$$-V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} < V_{AB} < -V + (V^2 - V_0^2)^{1/2}. \quad (3.29)$$

En el gráfico 3.17 se aprecia la región donde los polos poseen parte imaginaria distinta de cero, usando V_{AB} y V_0 como variables. Cabe recordar que se acaba de estudiar una condición *suficiente* para que los polos sean complejos.

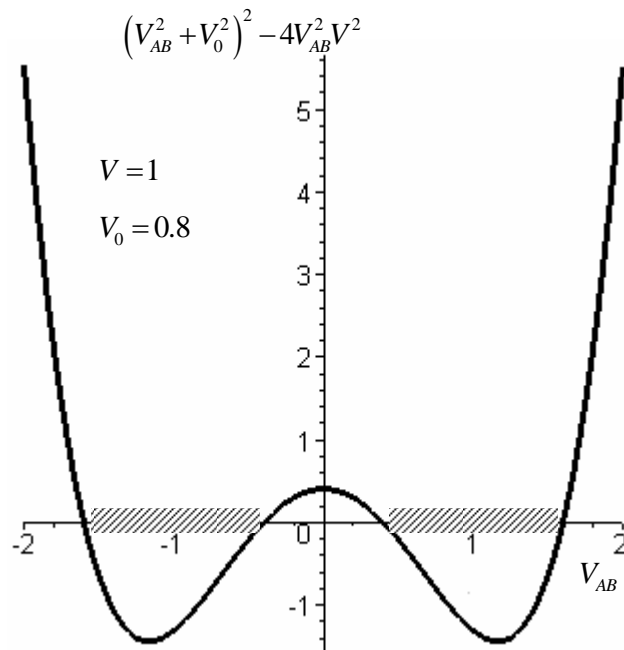


Gráfico 3.16: $(V_{AB}^2 + V_0^2)^2 - 4V_{AB}^2 V^2$ para un valor fijo de V y V_0

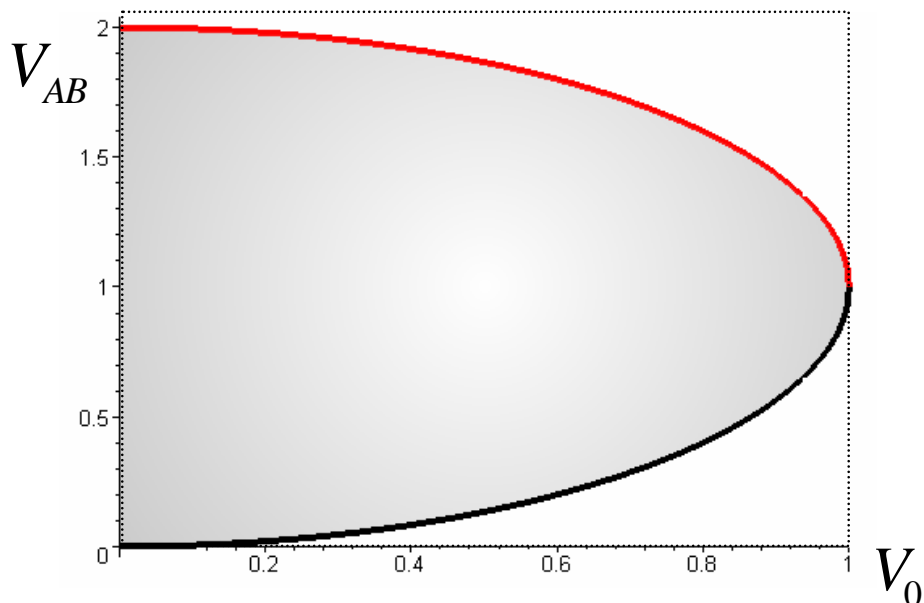


Gráfico 3.17: Gris: Región de estados resonantes para $V=1$

Otro tipo de condición para que los polos sean complejos es el caso en que la raíz de la ecuación (3.19) es positiva y ε_r^2 adquiere valor negativo, con lo cual las soluciones tendrían parte real igual a cero.

La región en la que se cumplen estas condiciones esta dada por $|V_{AB}| < \left| V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|$. Para realizar el análisis de los polos de G en esa región se debe tener en cuenta una propiedad fundamental de función Raíz Compleja: *la parte imaginaria de \sqrt{z} presenta un corte de rama cuando $z \in \mathbb{R}^{<0}$* (ver figura 3.3, extraído de la página <http://mathworld.wolfram.com/SquareRoot.html>).

En nuestro caso este corte aparece cuando $|V_{AB}| = \left| V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|$ (Ver grafico 3.18).

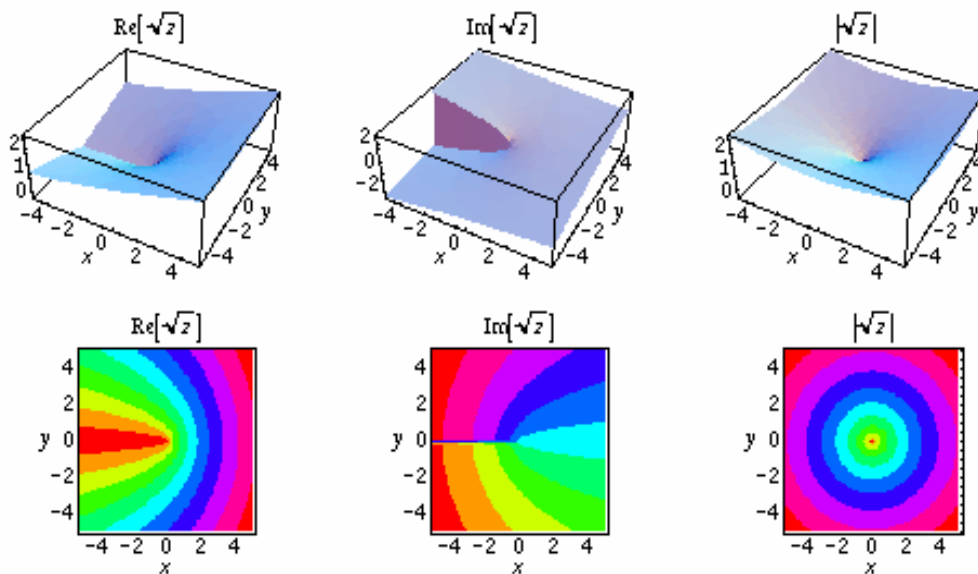


Figura 3.3

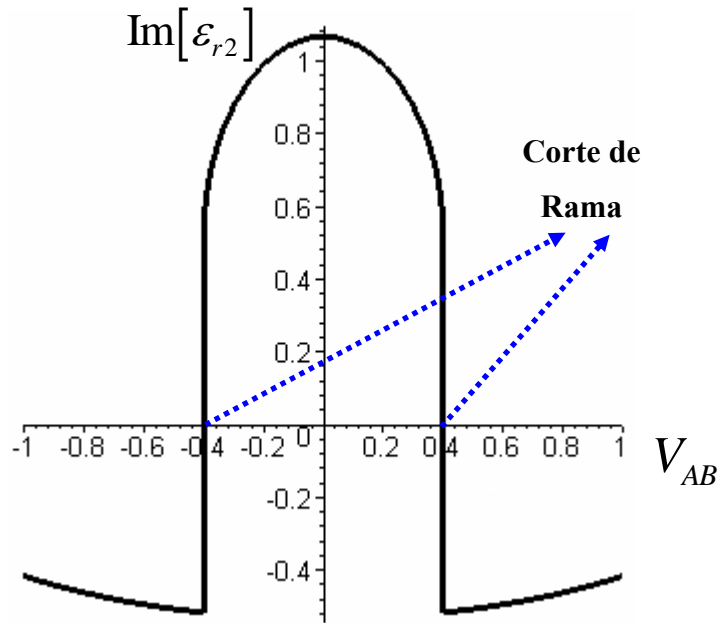


Gráfico 3.18

En el gráfico 3.18 se observa que el polo pasa a tener parte imaginaria positiva. Esto indica que la solución obtenida es no-física, ya que las evoluciones en esta región serían divergentes. Debido a esto procedamos a analizar el comportamiento de una de las raíces descartadas (Ver gráfico 3.19). Aquí se encuentra que la otra raíz también presenta el efecto del corte de rama. Sin embargo, esta solución posee una parte imaginaria negativa cuando $|V_{AB}| < \left| V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|$. Esto nos indica que la “solución 3” (basado en la figura 3.2) se convierte en una posible solución física.

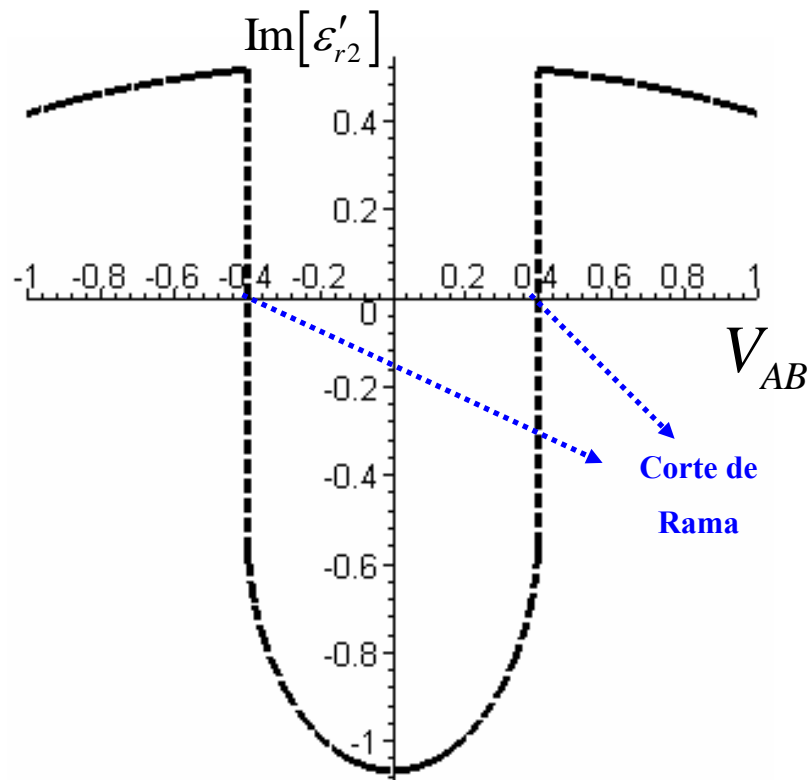


Gráfico 3.19: Comportamiento de la “solución 3”

En el gráfico 3.20 se superponen los gráficos (3.18) y (3.19). Se ve que al empalmar ambas soluciones, es posible obtener una función continua que posee parte imaginaria negativa en todo el rango de valores. Esta función se obtiene al “sustituir” la solución 2 de la figura 3.2 por la solución 3 en el punto

$$|V_{AB}| = \left| V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|.$$

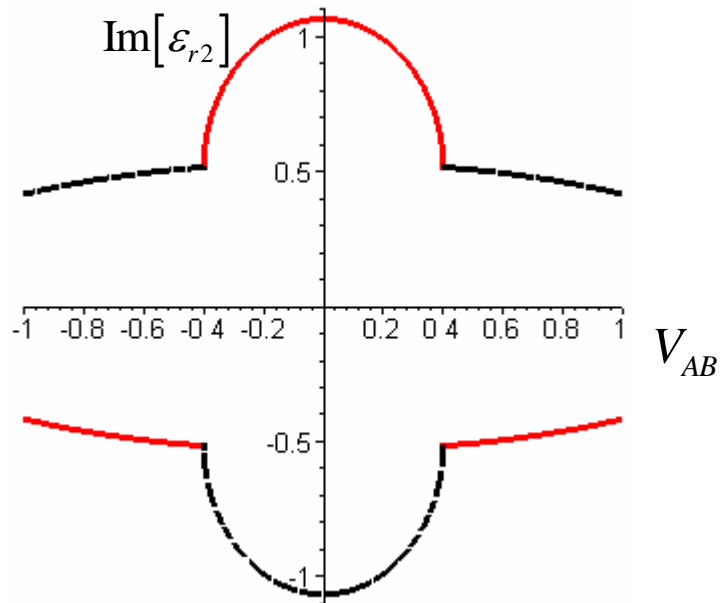


Gráfico 3.20

Si ahora se observa el otro polo (i.e. la solución 1 de la figura 3.2) se puede ver que el corte de rama tiene una menor influencia (ver gráfico 3.21) ya que antes del corte, z posee parte imaginaria positiva, esto evita tener que cambiar de rama, es decir, la solución sigue siendo físicamente válida.

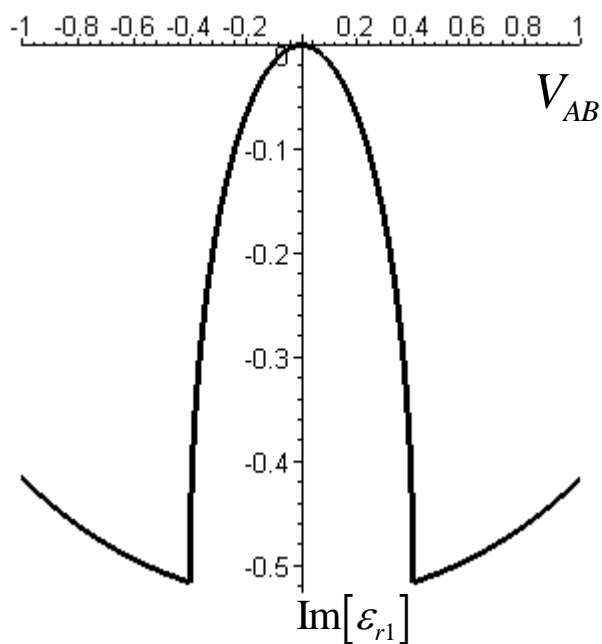


Gráfico 3.21

En el siguiente gráfico podemos apreciar la parte imaginaria de los dos polos combinados, es decir el comportamiento general de los dos polos.

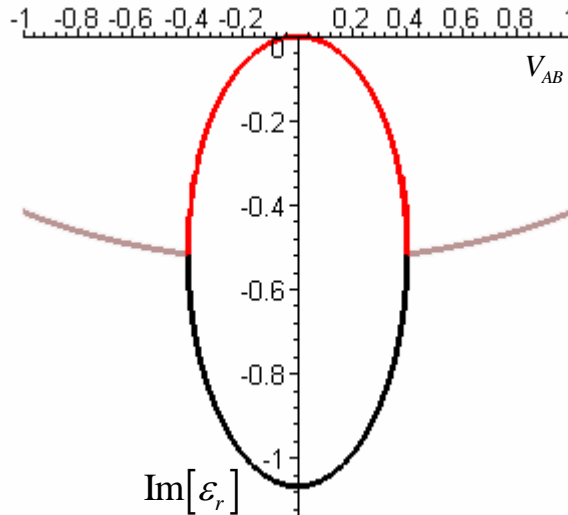


Gráfico 3.22: Las curvas grises representan la parte imaginaria que coincide para ambos polos. Cuando V_{AB} es menor que el valor crítico, la parte imaginaria del polo que corresponde a un estado superficial débilmente acoplado se muestra en rojo mientras que la parte imaginaria del estado más absorbido se muestra en negro.

Es importante destacar la influencia de la no analiticidad en el tratamiento del problema. Como se verá más adelante, esta irregularidad, da lugar a una transición de fase en la dinámica cuántica.

Procedamos ahora a analizar qué sucede cuando $|V_{AB}| > \left| V + (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|$. A partir de este punto vemos que ε_r^2 es real. Nuevamente se deben elegir dos soluciones de las 4 posibles. Para poder elegir las soluciones correctas se debe considerar que en el límite de V_{AB} muy grande, la frecuencia con la que oscila un estado inicial situado en el primer sitio debe ser la del sistema aislado.

$$\omega \rightarrow \omega_0 = \frac{2V_{AB}}{\hbar}. \quad (3.30)$$

donde ω es la frecuencia de oscilación de $P_{00}(\varepsilon)$.

En el sistema aislado la frecuencia se puede expresar como

$$\omega_0 = \frac{\Delta\varepsilon}{\hbar} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\hbar}, \quad (3.31)$$

donde ε_1 y ε_2 son los autovalores del sistema.

Usando la igualdad (3.31) para la representación de la frecuencia e interpretando la parte real de la función de Green como los “autovalores” de los dos primeros sitios corregidos por la presencia del “ambiente”, es posible obtener la frecuencia ω que represente las oscilaciones observadas en el gráfico

3.15. De esta forma la frecuencia se expresa como $\omega = \frac{\varepsilon_{r1} - \varepsilon_{r2}}{\hbar}$.

Si se analiza la frecuencia resultante para cada par de posibles soluciones, se puede ver que existe un único par que cumple la condición (3.30). De esta forma llegamos a la conclusión que las soluciones 1 y 4 (es decir las continuaciones analíticas, sobre el eje real, de estas soluciones) son las únicas que cumplen el límite

$$\omega_0 = \lim_{V_{AB} \rightarrow \infty} \omega. \quad (3.32)$$

En el gráfico 3.23 se puede comparar ω (negro) contra ω_0 (rojo). Aquí también se aprecia que cuando $V_{AB} \rightarrow \infty$, $\omega \rightarrow \omega_0$. Otra característica que podemos observar es que existe un régimen en el cual el sistema deja de oscilar. Físicamente esto ocurre porque el ambiente interactúa muy fuertemente con el sistema impidiendo su dinámica a través de lo que se denomina Efecto Zenón Cuántico. Este es un efecto intrínseco a la mecánica cuántica y se origina en el hecho que una medición colapsa el estado cuántico y obliga a empezar una nueva evolución. Sin embargo, puede, como en este caso, originarse de cómo un efecto puramente dinámico que no involucre a un observador clásico [PU98]. Es necesario aclarar que el sistema sigue presentando *pequeñas oscilaciones de*

alta frecuencia asociadas a la singularidad de van Hove de la densidad local de estados que a su vez da cuenta de los procesos difusivos [FP06]. La diferencia es que la frecuencia de las pequeñas oscilaciones tienen frecuencia constante al variar el valor de V_{AB} .

Es importante destacar cómo surge la transición de fase. Recordemos que en ese punto, las soluciones elegidas cambian de hojas de Riemann, lo que requiere que se intercambien entre sí para poder obtener un comportamiento físico correcto.

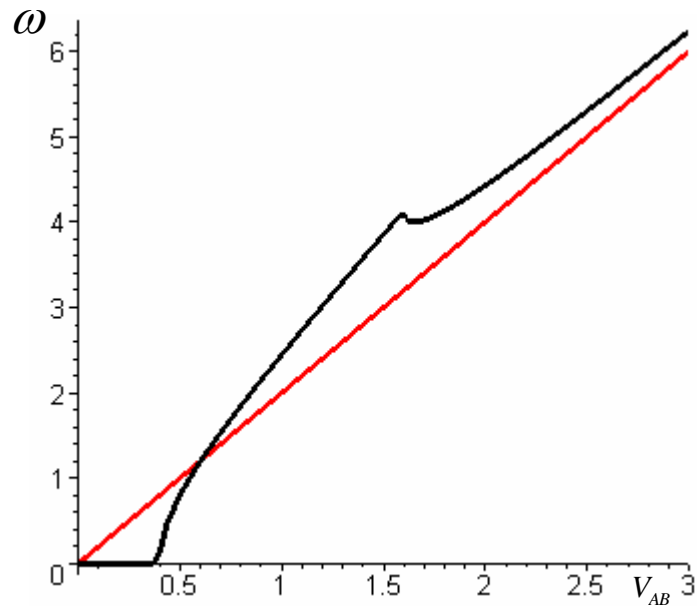


Gráfico 3.23

Procedamos ahora a analizar otro punto importante: la densidad local de estados. Para ello se numeran cuatro regiones, basándonos en los gráficos (3.24) y (3.25).

Región I de dinámica sobreamortiguada o régimen de Zenón. Se representa en verde en los gráficos.

$$I \Rightarrow |V_{AB}| < \left| V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|, \quad (3.33)$$

La región II, que se representa en azul, corresponde a resonancias acopladas que proveen las oscilaciones de Rabi.

$$II \Rightarrow \left| V - (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right| < |V_{AB}| < \left| V + (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right|, \quad (3.34)$$

La región III, representada en rojo, se identificará con niveles virtuales.

$$III \Rightarrow \left| V + (V^2 - V_0^2)^{1/2} \right| < |V_{AB}| < \sqrt{2(2V^2 - V_0^2)}, \quad (3.35)$$

Finalmente, en amarillo se representa la región IV que se corresponde con estados localizados:

$$IV \Rightarrow \sqrt{2(2V^2 - V_0^2)} < |V_{AB}|. \quad (3.36)$$

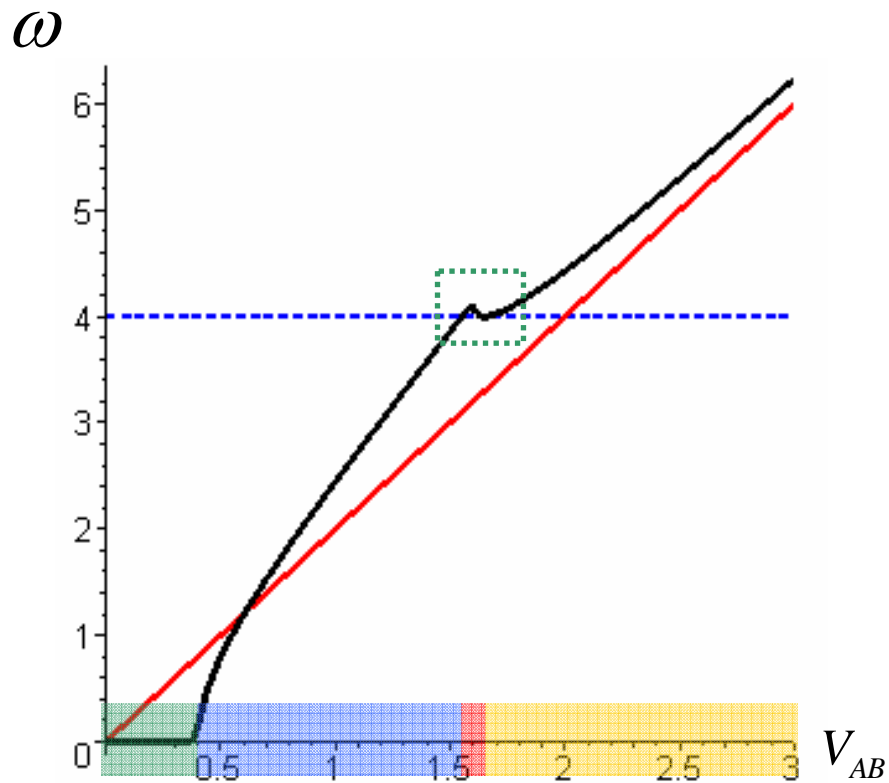


Gráfico 3.24

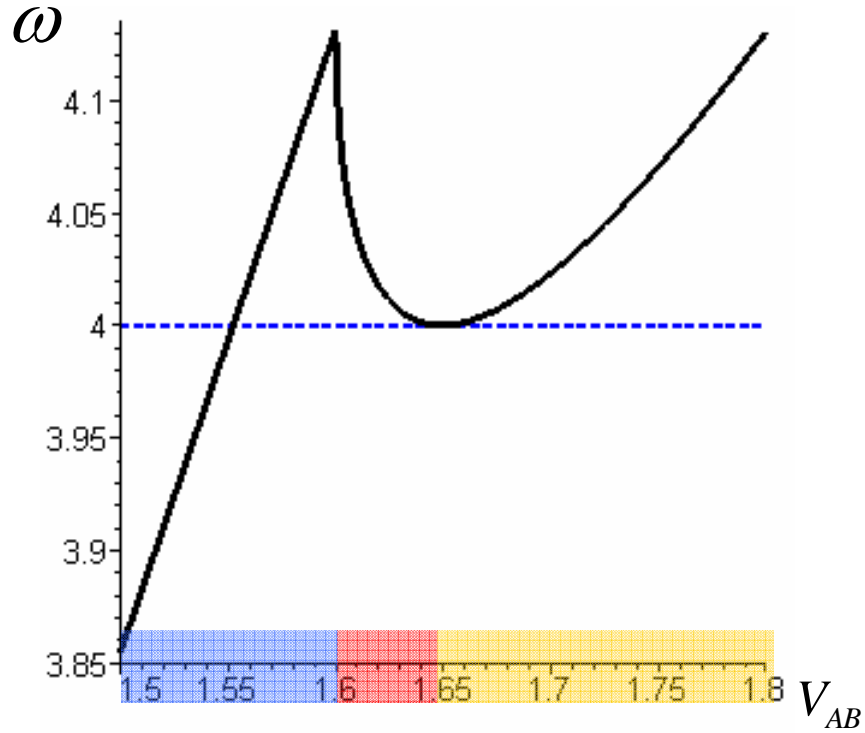


Gráfico 3.25

Empecemos analizando la Región II. En ella se debe calcular

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{00}(\varepsilon)], \quad (3.37)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\varepsilon - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]}} \right]. \quad (3.38)$$

A partir de los cálculos realizados en el apéndice B-II se ve que se puede expresar la densidad local de estados como

$$N(\varepsilon) = \tilde{N}_2(\varepsilon) \times \frac{2c\Gamma}{[\varepsilon - \varepsilon_r]^2 + \Gamma^2} \times \frac{2c\Gamma}{[\varepsilon + \varepsilon_r]^2 + \Gamma^2}. \quad (3.39)$$

Aquí se aprecia que la densidad puede ser expresada como producto de la densidad del ambiente (cadena lineal seminfinita), por dos Lorentzianas de igual ancho, pero con centros opuestos.

Si se analizan los valores de ε_r y $-\varepsilon_r$ se ve que coinciden con la parte real de los polos de la función de Green. También se aprecia que Γ coincide con la parte imaginaria de los polos de la función de Green.

Físicamente podemos interpretar que los autovalores del sistema aislado se “convierten” en estados de resonancia con energías ε_r y $-\varepsilon_r$, y decaimiento característico Γ . Esto implica que si se coloca un estado inicial en el sitio 0, la probabilidad de supervivencia de este estado, es decir $P_{00}(t)$, oscilará con frecuencia $\omega = 2\varepsilon_r/\hbar$ y decaerá exponencialmente con un factor $1/\Gamma$ (Ver gráfico 3.14).

Dentro de las regiones III y IV se observa que los polos de la función de Green son puramente reales. La separación entre las regiones III y IV se encuentra en $V_{AB} = \pm\sqrt{2(2V^2 - V_0^2)}$. En este punto $\omega = 4V$, esto implica que los polos de la función de green se encuentran justo sobre el borde de banda permitida. Realizando un análisis similar al de la sección 3.1 se puede ver que en la región III los polos se encuentran dentro de la hoja de Riemann no Física, lo cual da lugar a los denominados *niveles virtuales*.

Observando los gráficos (3.26-3.33) se puede analizar el comportamiento de la densidad local de estados al variar V_{AB} . El valor de V_0 es fijo, por lo que se usa el gráfico 3.24 como referencia. Para obtener los gráficos, nuevamente se usó la ecuación (3.14) con $\eta = 0.001$. Realizando el mismo tipo de análisis que en la sección anterior se puede observar que en la región IV se existen estados localizados, mientras que en la región III no. Esto permite identificar

nuevamente los estados que se encuentran en la región III, como estados virtuales.

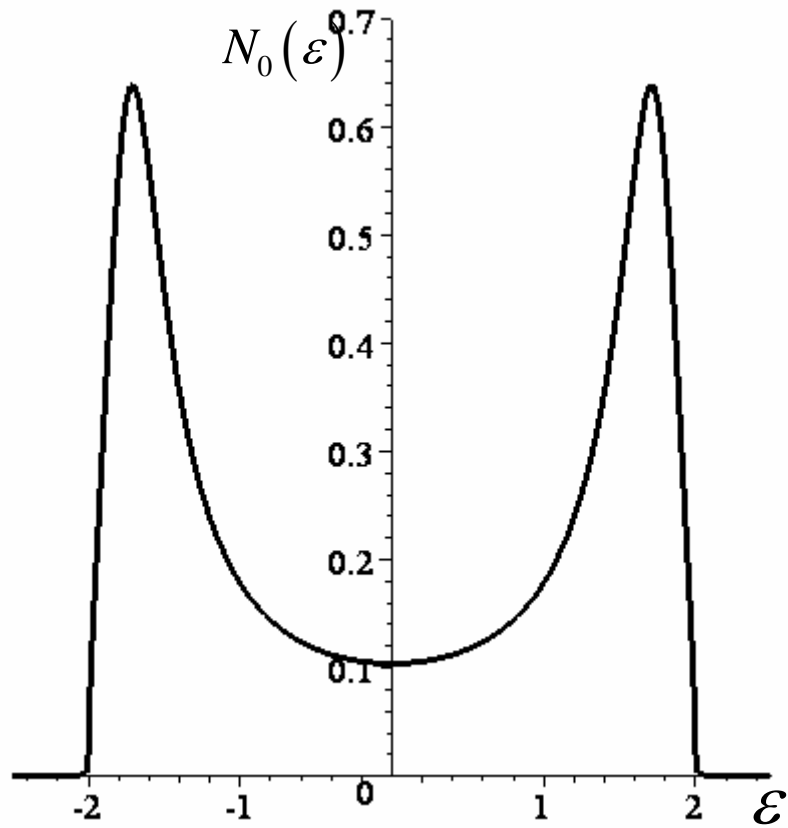


Gráfico 3.26: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.4$ (corresponde a la región II).

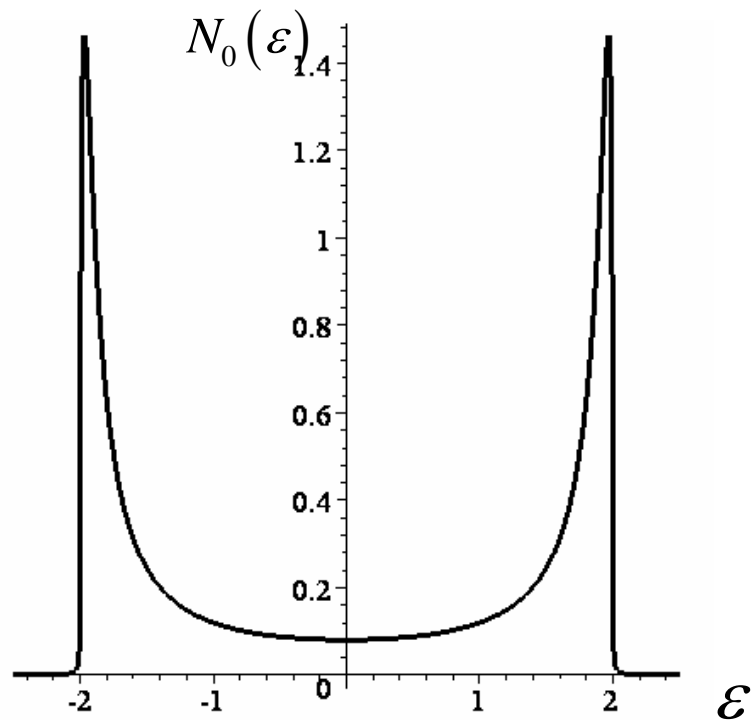


Gráfico 3.27: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.59$ (corresponde a la región II).

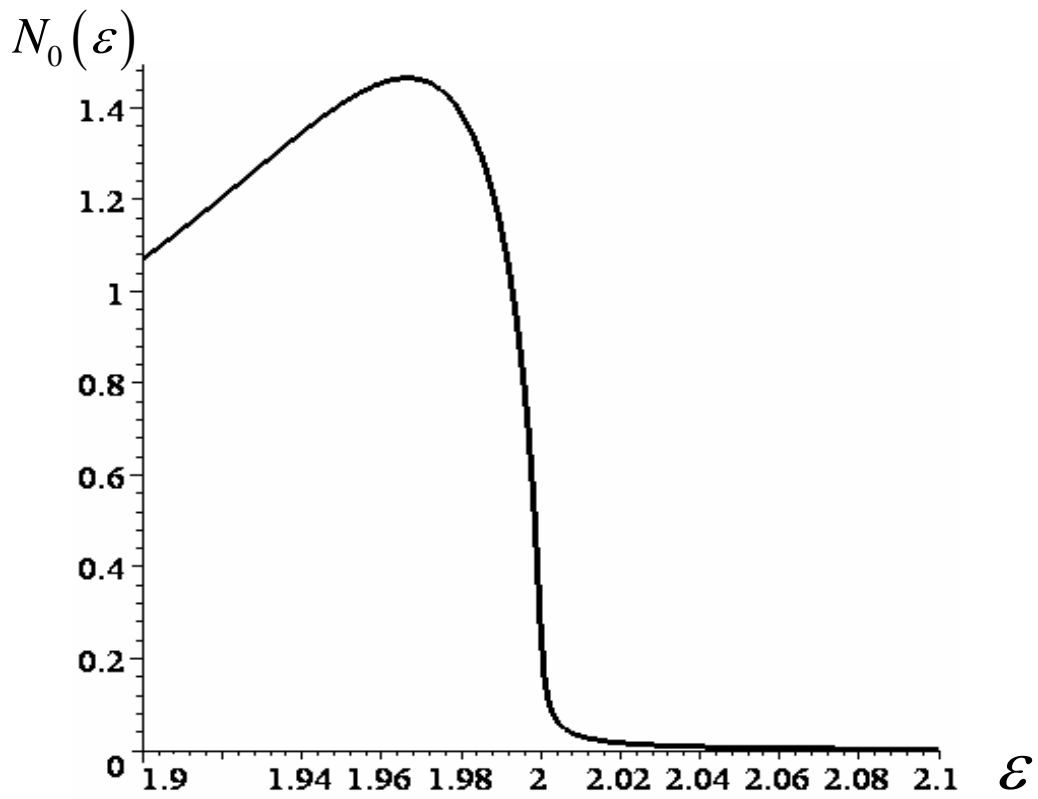


Gráfico 3.28: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.59$ aumentada en la región próxima al borde de banda permitida.

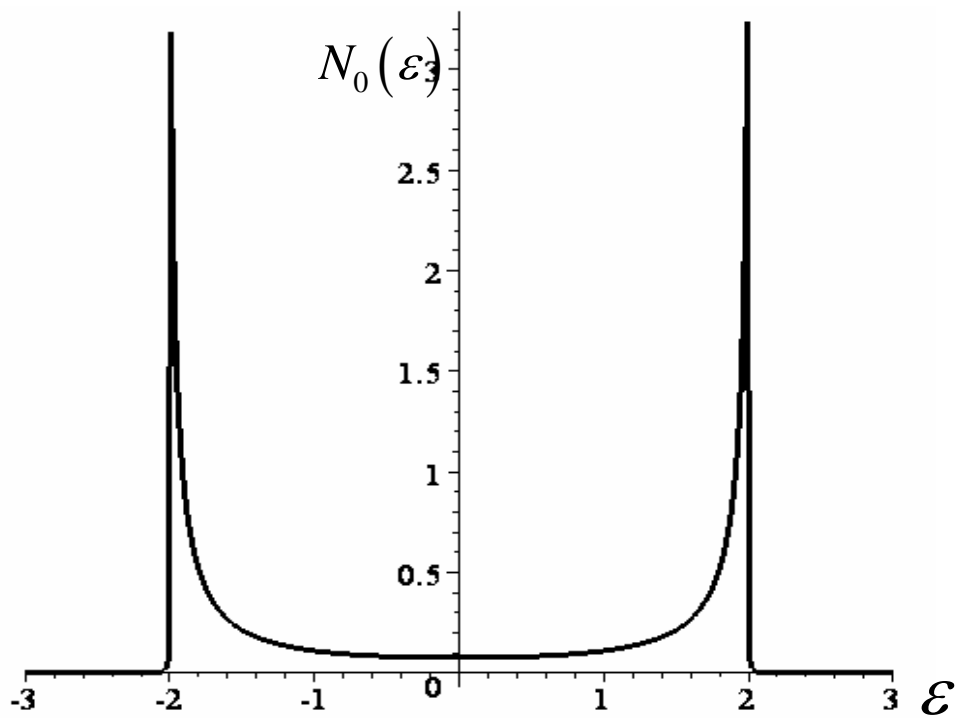


Gráfico 3.29: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.63$ (corresponde a la región III).

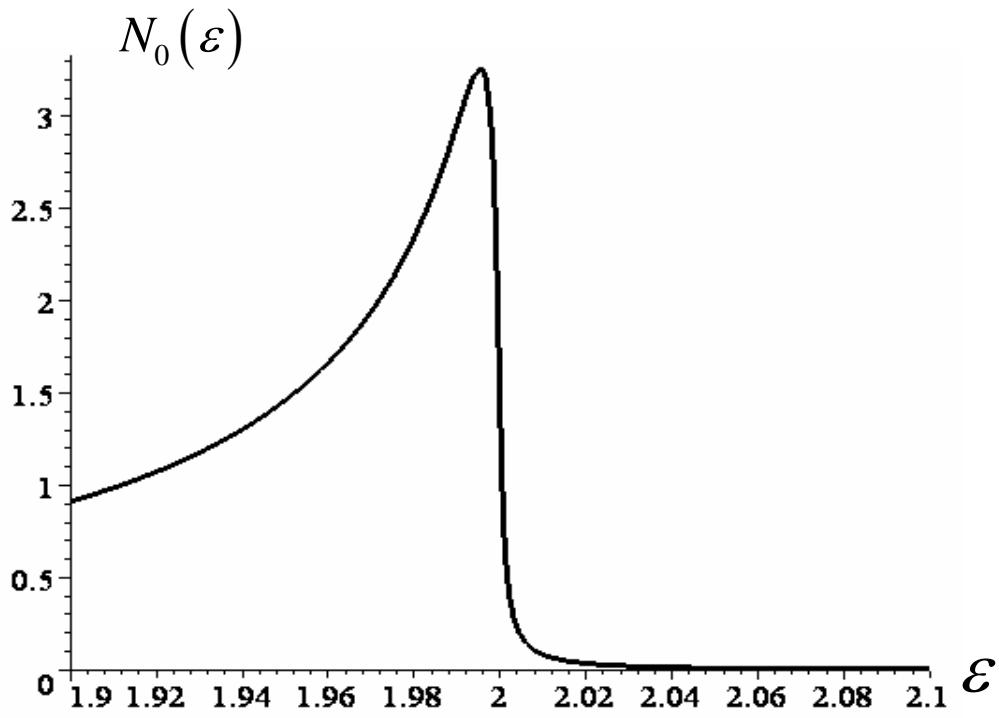


Gráfico 3.30: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.63$ aumentada en la región próxima al borde de banda permitida.

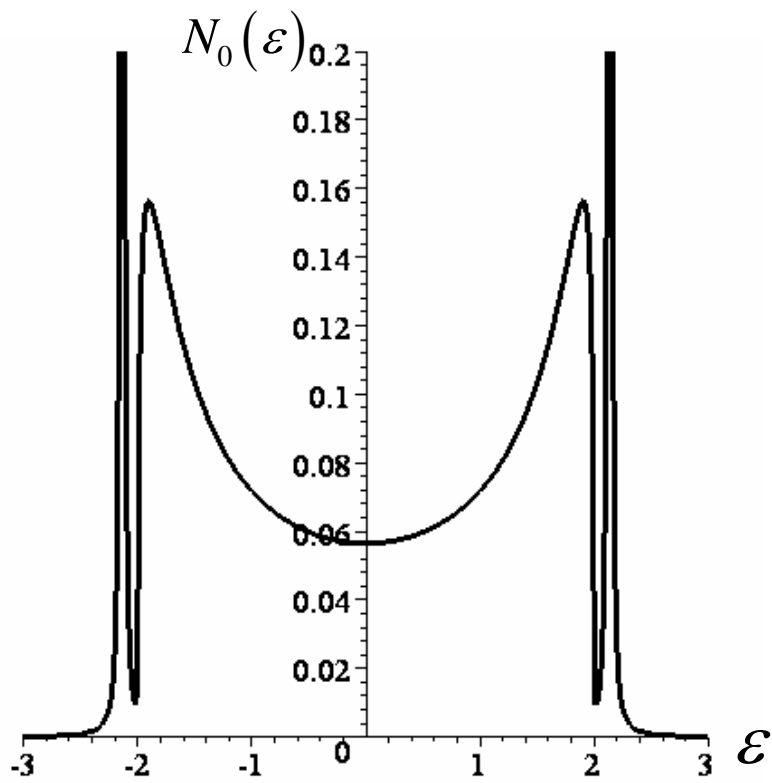


Gráfico 3.31: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.9$ (corresponde a la región III).

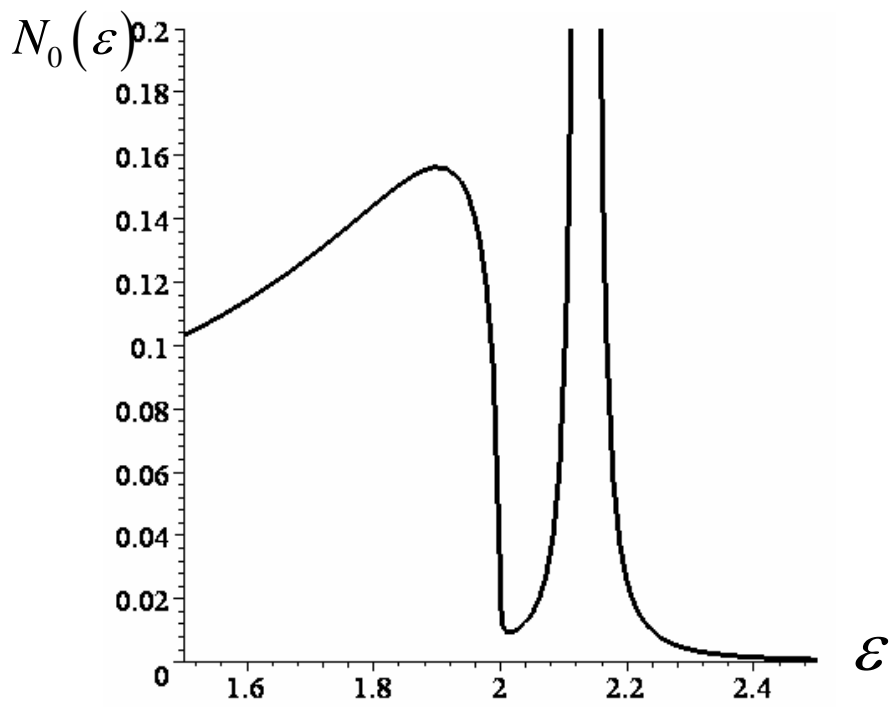


Gráfico 3.32: Densidad local de estados para $V_{AB} = 1.9$ aumentada en la región próxima al borde de banda permitida.

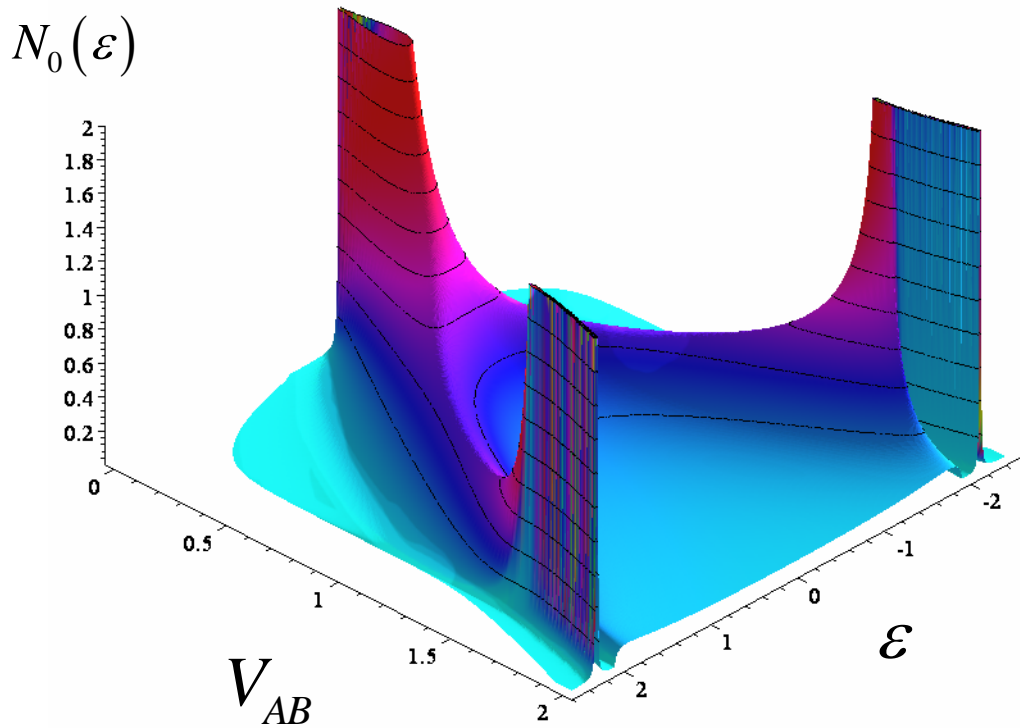


Gráfico 3.33: Densidad local de estados variando V_{AB} y ε .

El gráfico 3.33 muestra cómo se modifica la densidad local de estados al variar el parámetro V_{AB} . En él se puede apreciar la formación de los estados localizados cuando aumenta el valor de V_{AB} . Otro fenómeno que se observa es la unificación de los dos estados resonantes cuando V_{AB} se encuentra en la región I. Esto indica que el sistema tiende a separar el primer sitio (ya que V_{AB} es muy chico). En consecuencia, se volvería a obtener un estado resonante, semejante al estudiado en la sección 3.1, más un sitio “aislado”.

En el gráfico 3.22 se aprecia que el comportamiento de los polos es diferente a partir del punto crítico $|V_{AB}| = V - (V^2 - V_0^2)^{1/2}$. Uno se “mueve” hacia “arriba” en el plano complejo y el otro hacia “abajo”. Esto indica que ambos polos adquieren “anchos” Γ distintos. Usando el apéndice B-III se ve que la densidad de estados puede ser expresada como el producto de la densidad de la cadena lineal, por dos Lorentzianas de distintos anchos centradas en cero (ver ecuación 76 del apéndice), donde el ancho se corresponde con la parte imaginaria de los polos de la función de Green.

En el gráfico 3.34 se muestra la densidad local de estados para un valor de V_{AB} en la región I. Aquí se ve que efectivamente los estados resonantes se encuentran centrados en el valor $\varepsilon = 0$.

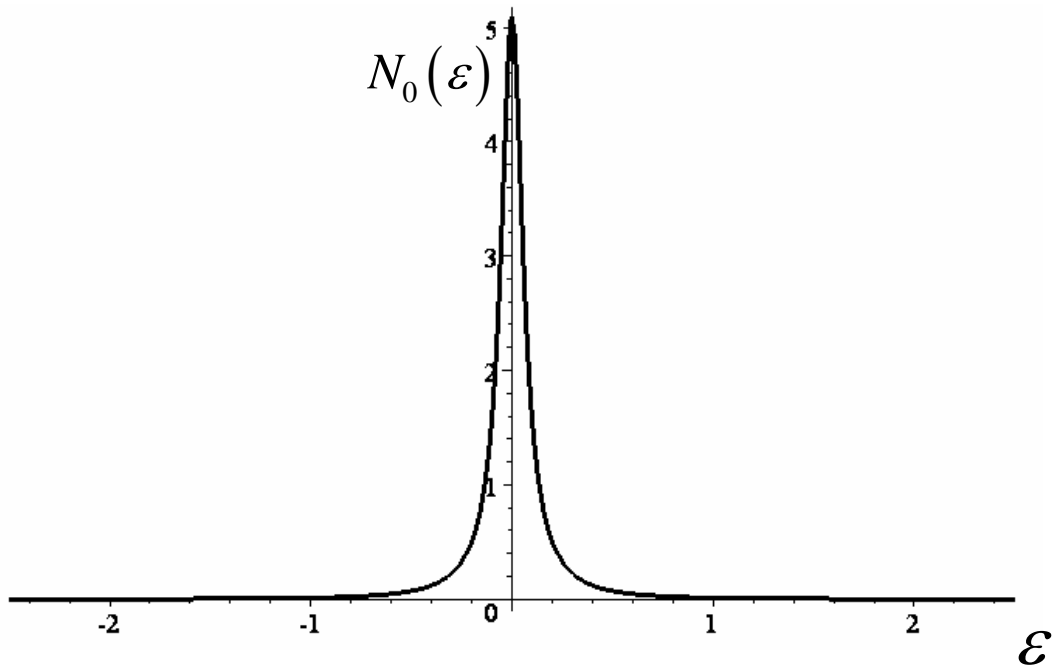


Gráfico 3.34: Densidad local de estados con $V_{AB} = 0.2$

Para verificar que los cálculos realizados son correctos se procede a tomar el límite

$$V_{AB} \rightarrow 0. \quad (3.40)$$

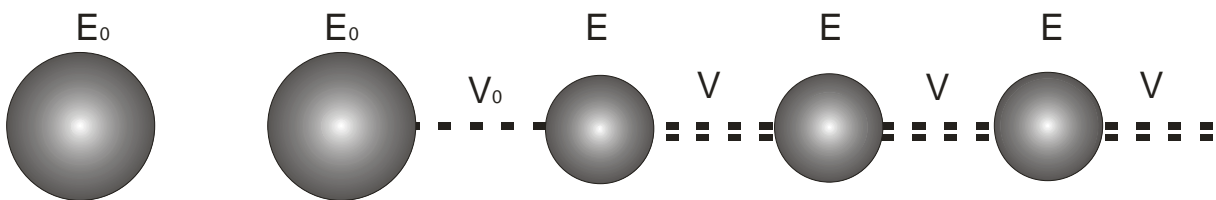


Figura 3.4

El sistema que se obtiene es separable (ver figura 3.4), i.e. obtenemos dos subsistemas “independientes”:

- Un Sitio Aislado (Autoestado con energía 0)
- Átomo adsorbido en una cadena lineal

Recordando que $E_0 = 0$ y $E = 0$, deberíamos ver que en la región I se cumple

$$\lim_{V_{AB} \rightarrow 0} \varepsilon_{r1} = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{V_{AB} \rightarrow 0} \varepsilon_{r2} = \varepsilon_r, \quad (3.41)$$

donde ε_r es el polo de la función de Green del sistema átomo adsorbido a un sustrato.

A partir de las ecuaciones (73) y (74) del apéndice se ve que:

$$\Gamma_1^2 = 0, \quad (3.42)$$

$$\Gamma_2^2 = \frac{V_0^4}{[V^2 - V_0^2]}. \quad (3.43)$$

Recordando que parte real de los polos en esta región es cero, obtenemos:

$$\varepsilon_{r1} = -i\Gamma_1 = 0, \quad (3.44)$$

$$\varepsilon_{r2} = -i\Gamma_2 = -i \frac{V_0^2}{\sqrt{V^2 - V_0^2}}. \quad (3.45)$$

Al comparar las ecuaciones (3.45) y (3.7), se puede corroborar que se cumplen las condiciones (3.41), con lo cual confirmamos que al tomar límites obtenemos una resonancia más un estado de sitio aislado.

3.3 Átomo embebido y dímero embebido

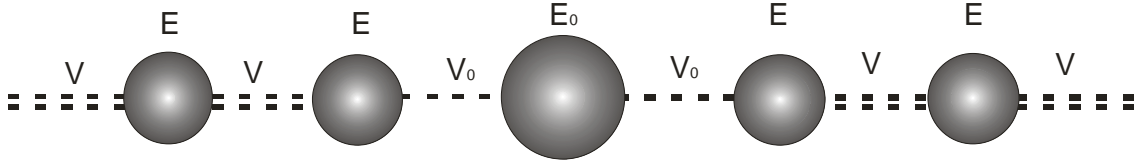


Figura 3.5: Átomo embebido

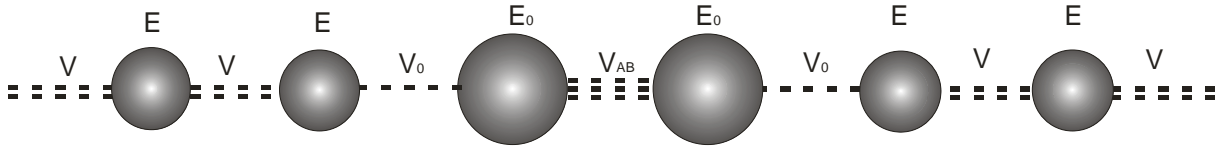


Figura 3.6: Dímero embebido

Con el objeto de mostrar que los resultados de las secciones anteriores tienen naturaleza general, en esta sección se analizarán los sistemas esquematizados en las figuras (3.5) y (3.6). Estos fueron elegidos por la particularidad que son fácilmente reducibles a los casos considerados anteriormente. Se verá que ambos sistemas son separables, y pueden ser expresados como combinación de los sistemas estudiados en las secciones 3.1 y 3.2.

El sistema de átomo embebido posee el siguiente hamiltoniano en la base de sitio

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{n=-\infty, n \neq 0}^{\infty} & \left[V(|n\rangle\langle n+1| + c.c.) + E(|n\rangle\langle n|) \right] \\
 & + V_0(|0\rangle\langle 1| + |-1\rangle\langle 0| + c.c.) + E_0(|0\rangle\langle 0|)
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & & & \\ \ddots & E & V & & & & & & \\ & V & E & V_0 & & & & & \\ & & V_0 & E_0 & V_0 & & & & \\ & & & V_0 & E & V & & & \\ & & & & V & E & \ddots & & \\ & & & & & & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Si procedemos a realizar el siguiente cambio de base

$$|n_+\rangle = \frac{|n\rangle + |-n\rangle}{\sqrt{2}} \quad n > 0, \quad (3.48)$$

$$|n_-\rangle = \frac{|n\rangle - |-n\rangle}{\sqrt{2}} \quad n > 0, \quad (3.49)$$

$$|0\rangle = |0\rangle, \quad (3.50)$$

se puede ver que el hamiltoniano queda expresado de la siguiente forma

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & & & \\ \ddots & E & V & & & & & & \\ & V & E & & & & & & \\ & & & E_0 & V_0/\sqrt{2} & & & & \\ & & & V_0/\sqrt{2} & E & V & & & \\ & & & & V & E & \ddots & & \\ & & & & & & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

donde la matriz está expresada en la base $\{\dots, 2_-, 1_-, 0, 1_+, 2_+, \dots\}$ (ver apéndice C).

La nueva base obtenida representa los estados simétricos y antisimétricos del sistema. Este cambio permite ver que el sistema es separable. A partir de la

matriz 3.51 se aprecia que la parte antisimétrica se comporta como una cadena lineal mientras que la parte simétrica representa un átomo adsorbido a una cadena lineal, por medio de un enlace $V_0/\sqrt{2}$ (ver figura 3.7). A partir del análisis independiente de cada subsistema vemos que se puede obtener una descripción global del problema.

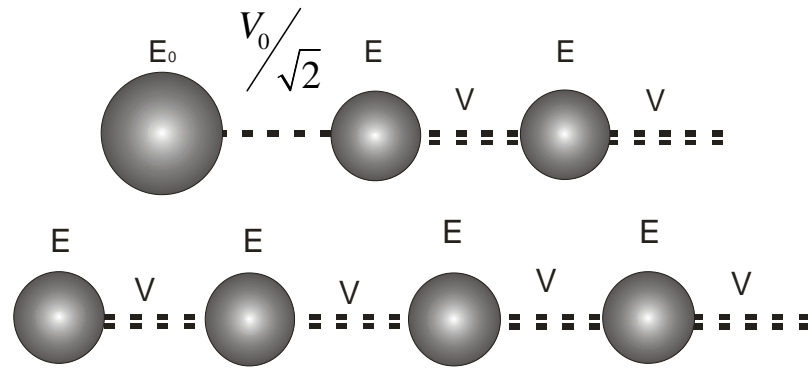


Figura 3.7: representación de los subsistemas del átomo embebido

Procedamos a analizar el sistema de dímero embebido. Para ello usaremos la base de estados de sitios

$$\{\dots, |-n\rangle, \dots, |-1\rangle, |a\rangle, |b\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle, \dots\}$$

donde $|a\rangle$ y $|b\rangle$ son los sitios del dímero. De esta forma el hamiltoniano queda expresado como

$$\begin{aligned} H = & \sum_{n=-\infty, n \neq 0}^{\infty} [V(|n\rangle\langle n+1| + c.c.) + E|n\rangle\langle n|] \\ & + V_0(|a\rangle\langle -1| + |b\rangle\langle 1| + c.c.) \\ & + V_{AB}(|a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a|) + E_0(|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b|) \end{aligned} \quad (3.52)$$

A partir de la matriz (3.58) observamos que el sistema es separable, por lo que la parte antisimétrica y simétrica son independientes. También se observa que ambas parte representan el sistema desarrollado en la sección 3.1 (ver figura 3.8), donde las energías son

$$\tilde{E}_1 = E_0 + V_{AB}, \quad (3.59)$$

$$\tilde{E}_2 = E_0 - V_{AB}. \quad (3.60)$$

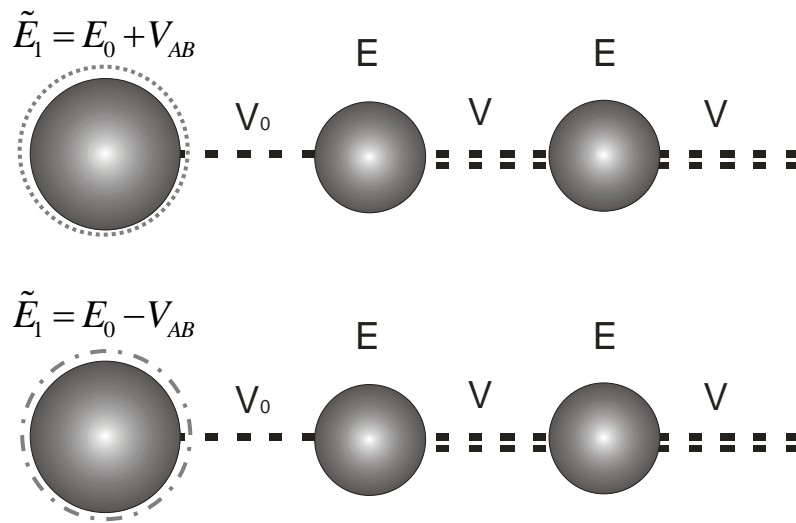


Figura 3.8

La reducción de estos sistemas a casos particulares de los sistemas de átomo absorbido y dímero absorbido nos permite verificar que la física discutida tiene validez suficientemente general. La naturaleza separable de los problemas nos hace el análisis espectral relativamente fácil. Sin embargo, esto aún no agota las alternativas. Al analizar problemas de dispersión elástica o sistemas de múltiples caminos, estos estados elementales pueden resultar mezclados y dar lugar a interesantes fenómenos de interferencia.

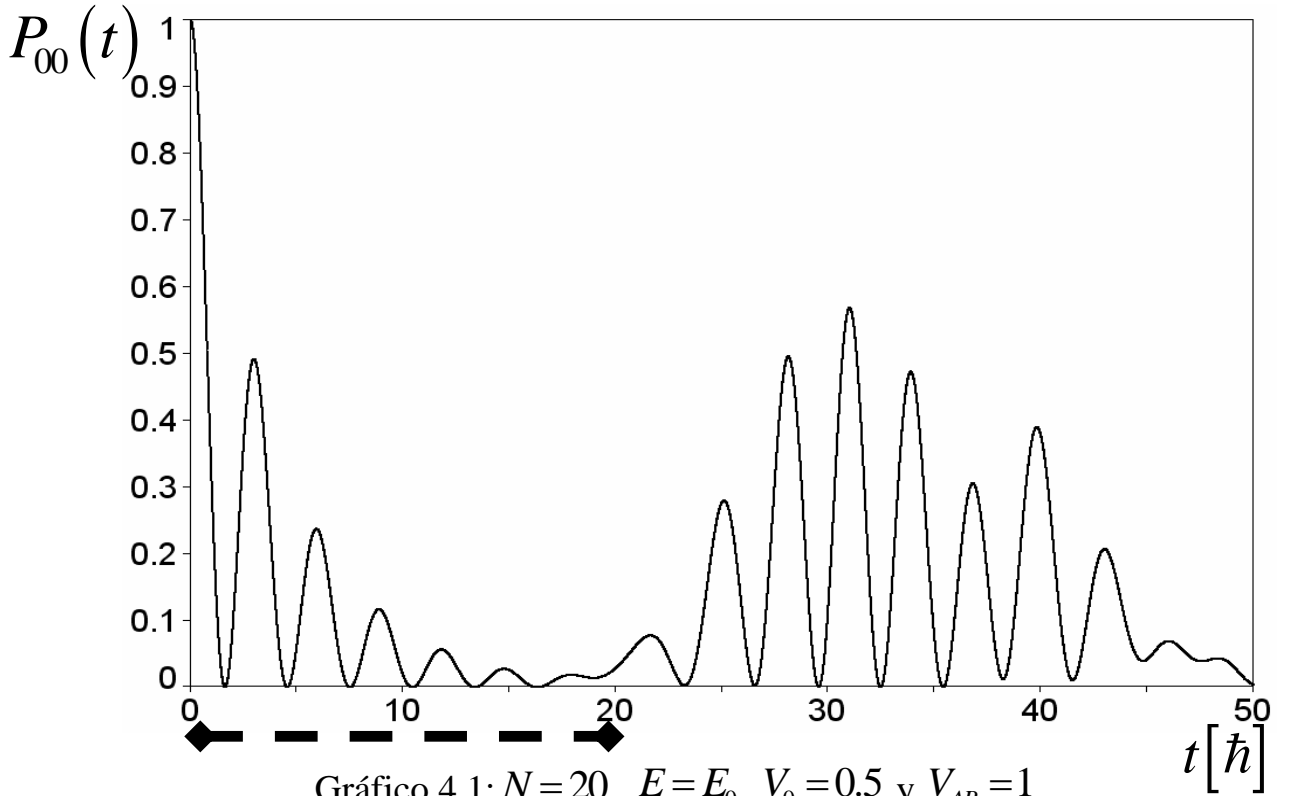
Capítulo 4. Límite termodinámico

En el capítulo 3 analizamos esencialmente 2 tipos de sistemas que interactúan con “ambientes absorbentes”. En ambos casos trabajamos con cadenas lineales infinitas. El trabajo se basa en expresiones analíticas para la energía de renormalización $\Sigma(\varepsilon)$, donde el límite termodinámico de longitud infinita se efectúa en base a propiedades de simetría. Estas expresiones analíticas nos permitieron encontrar puntos donde hay transiciones de fases, y regiones con resonancias, niveles virtuales y estados localizados. En el caso finito el espectro es discreto y en consecuencia, la dinámica cuántica solo puede construirse con un conjunto finito de frecuencias. La pregunta que nos realizamos es, ¿Podemos observar en forma gradual cómo la transición de fase dinámica, que implica una manifestación de no-analiticidad de los observables, emerge a partir del sistema finito?. En este capítulo, procederemos a analizar el sistema de dímero adsorbido por una cadena lineal finita de longitud N . Para ello desarrollaremos las herramientas que nos permitan observar la frecuencia de oscilación y se analizará ω para distintos valores de N y V_{AB} .

4.1 Dinámica de un sistema finito

Cuando el sistema de dímero está adsorbido a una cadena de longitud N , la frecuencia de oscilación ω no puede aparecer como una expresión analítica. La dinámica se define mediante una compleja suma de componentes oscilatorios donde las $O(N^2)$ frecuencias de transiciones están pesadas por distintos coeficientes. Para extraer las propiedades relevantes de la dinámica no hay más alternativa que recurrir a métodos numéricos.

Partimos de una solución numérica tradicional de la dinámica basada en la evaluación de las autofunciones y autovalores del sistema finito. El programa que se muestra en el Apéndice E, nos permite calcular la probabilidad de supervivencia de un estado $|0\rangle$ en el primer sitio. Este permite variar la energía y los potenciales de interacción de nuestro sistema. En el gráfico (4.1) podemos observar una forma típica para la probabilidad de supervivencia. La probabilidad $P_{00}(t)$ oscila, a la vez que decae exponencialmente. Podemos observar que a tiempos largos, del orden del tiempo de Heisenberg $\hbar/\langle N(\varepsilon) \rangle$, aparecen los efectos correspondientes a la naturaleza finita del sistema (eco mesoscópico). Como en el trabajo estamos interesados en propiedades que sean independientes de la naturaleza finita, debemos considerar tiempos anteriores que el de este eco. Por ejemplo, en el gráfico (4.1) solo usaremos la evolución hasta el tiempo 20.



Para poder extraer la información a partir de los gráficos, se procede a ajustarlos con una función que evidencie la dinámica del sistema. Para ello debemos tener en cuenta que la evolución es resultado de varios procesos. Primero notemos que toda evolución cuántica comienza de forma cuadrática. Luego, debido a la Regla de oro de Fermi, el sistema posee un comportamiento oscilatorio, en forma de senos y cósenos, con un decaimiento exponencial. De este modo la función de ajuste sería

$$\tilde{P}(t) = \left[\cos(\omega t) + \frac{1}{\tau\omega} \sin(\omega t) \right]^2 e^{-\frac{2t}{\tau\hbar}}. \quad (4.1)$$

Si bien esta función realiza un buen ajuste, debemos considerar el efecto de la probabilidad de retorno de amplitud que, después de haber decaído sufre un proceso de difusión cuántica en la cadena. Como este retorno es efectivo al punto de modificar la ley de decaimiento de exponencial a ley de potencia, su

consideración es muy relevante. Una discusión detallada de la física involucrada en este proceso se puede encontrar en [FP06]. En este trabajo consideraremos que la difusión se corresponde con una oscilación que comienza a tiempos largo y que decae en forma cúbica. De esta forma, la función de ajuste es

$$\tilde{P}(t) = \left[\cos(\omega t) + \frac{1}{\tau\omega} \text{sen}(\omega t) \right]^2 e^{-\frac{2t}{\tau h}} + \frac{1}{t^3} (\beta^2 - \beta \cos(\omega_2 t))^2 \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau h}} \right). \quad (4.2)$$

Al usar la función $\tilde{P}(t)$ para ajustar los datos, podemos extraer el valor de la frecuencia ω . En el gráfico (4.2) se muestra el ajuste realizado a una de las curvas. En él se puede apreciar que el ajuste es muy bueno, salvo para la región en la que interfieren la amplitud de probabilidad de supervivencia pura con la amplitud de probabilidad de retorno (ver [FP06] para más detalles). Esta región corresponde precisamente a la transición entre las dos leyes temporales.

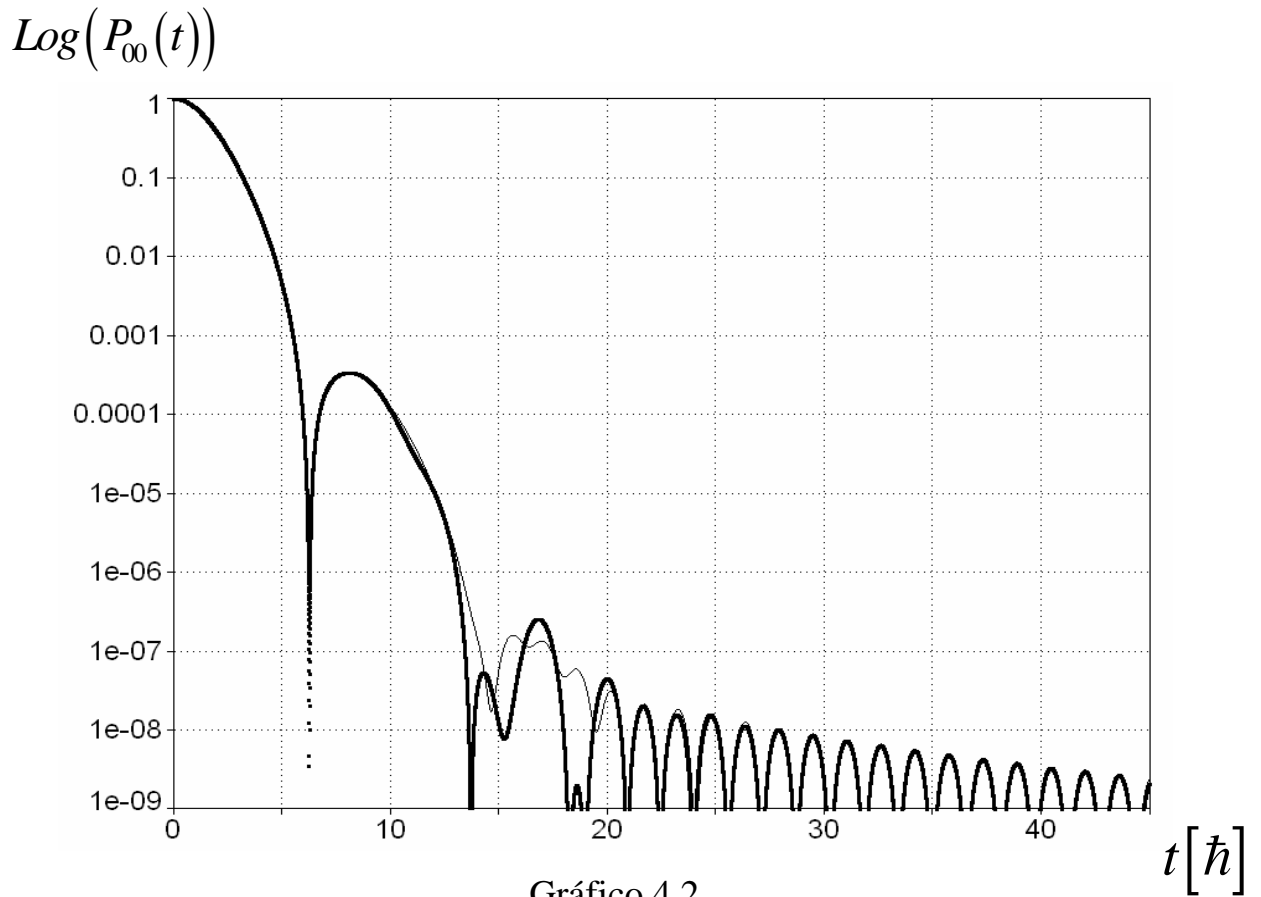


Gráfico 4.2

4.2 Límite termodinámico de la frecuencia de oscilación.

Para dilucidar si la transición de fase mostrada en el gráfico (3.24) se puede observar en el sistema finito, se procede a realizar soluciones numéricas tomando diferentes valores de N

$$N = \{10; 25; 50; 100\}$$

A su vez, para cada valor de N , se usan distintos valores de V_{AB}

$$V_{AB} = \{0.37; 0.38; 0.39; 0.40; 0.41; 0.42; 0.43; 0.44; 0.45\}$$

Recordemos que la transición de fase debe ocurrir en el punto $V_{AB} = 0.40$ y que en nuestro caso usamos $E_0 = E$, $V_0 = 0.8$ y $V = 1$ para realizar los gráficos.

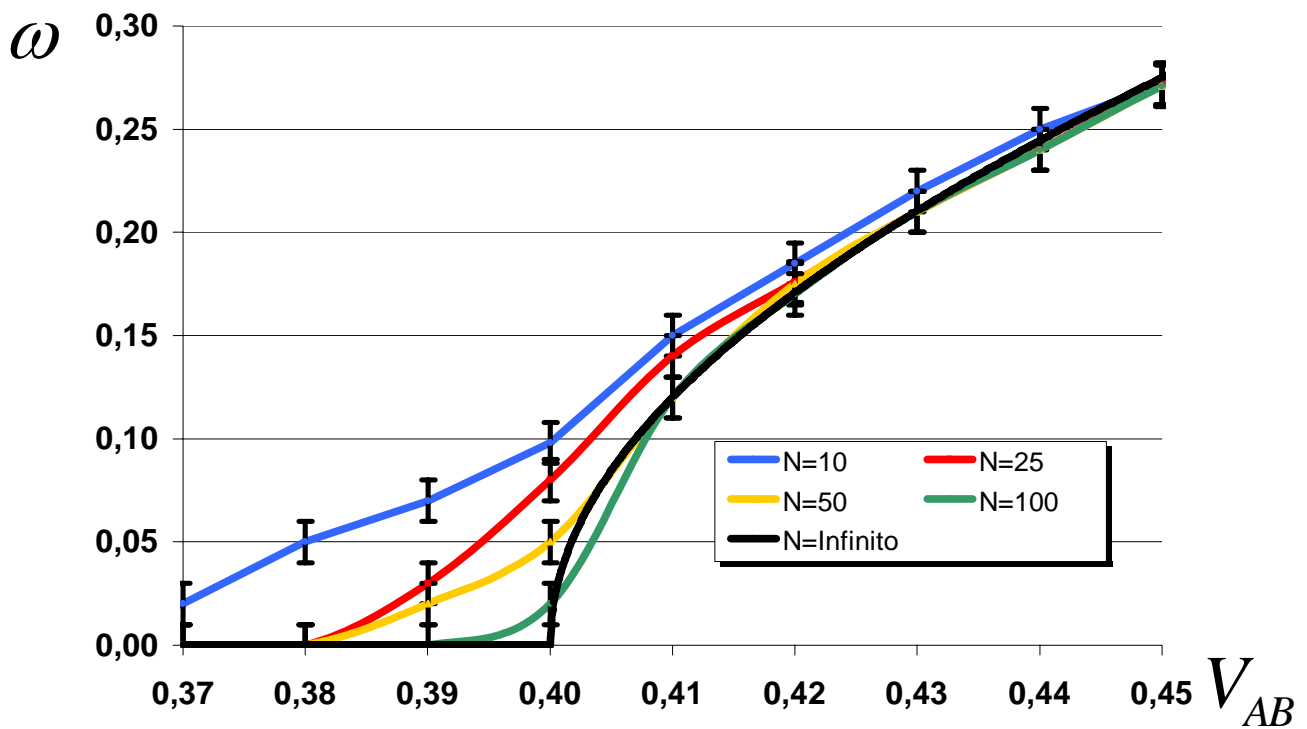


Gráfico 4.3

En el gráfico (4.3) se muestran los resultados obtenidos. En él se puede observar que efectivamente al aumentar el valor de N , la pendiente $\frac{d\omega}{dV_{AB}}$ se vuelve progresivamente discontinua hasta definir una transición de fase. La curva negra representa el límite termodinámico obtenido en la sección 3.2.

Capítulo 5. Conclusiones

En este capítulo resumiremos los principales resultados encontrados a lo largo del trabajo. En la sección 5.1 hablaremos de los estados resonantes y su comportamiento. En la siguiente sección debatiremos sobre la densidad local de estados obtenida en los sistemas estudiados. Después se indica cómo una transición de fase en la dinámica cuántica se define en el límite termodinámico. Finalmente, cerraremos el capítulo mencionando posibles extensiones del trabajo.

5.1 Estados resonantes.

En el capítulo 3 estudiamos el comportamiento de los estados resonantes en varios tipos de modelos. En el modelo de átomo en sustrato observamos la existencia de un solo estado resonante para el cual podíamos identificar la parte real del polo con la energía del estado resonante. Asimismo, la parte imaginaria la asociamos con el ancho del estado resonante en la densidad local de estados. Obtuvimos una expresión analítica para la densidad de estados, la cual nos permite diferenciar por un lado la contribución debida a la cadena lineal y por el otro la del estado resonante. Al comparar la energía del estado resonante contra la energía del sitio aislado, se ve que son distintas. Esto permite afirmar que el “ambiente” cuántico interactúa con el sistema de modo tal que modifica su energía original (ver gráfico 5.1).

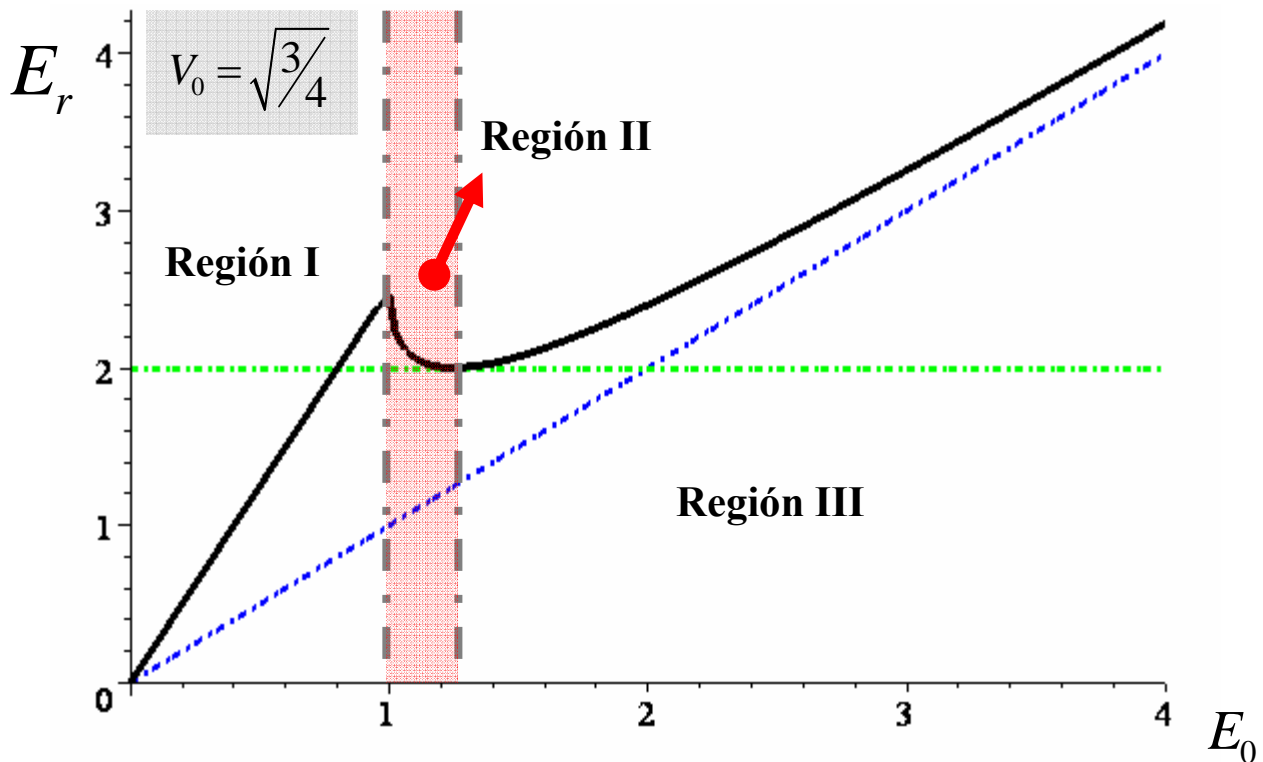


Gráfico 5.1: *Negro:* Energía del estado resonante; *Verde:* Borde de banda permitida; *Azul:* energía del sitio aislado.

En el gráfico 5.1 se ve que la energía del estado resonante es siempre mayor que la energía del sitio aislado, incluso en algunos casos el valor de E_r supera el valor de borde de banda permitida. Por otro lado, como era de esperarse, cuando E_0 es muy grande, se ve que E_r converge al valor de E_0 . Esto indica que se puede despreciar el efecto del “ambiente” cuando la energía de sitio es muy grande comparada contra la energía de la cadena.

Al observar el sistema de dímero sobre un sustrato, se encuentran resultados similares, aunque en este caso existe una transición de fase dinámica cuántica. En el gráfico 5.2 se puede apreciar como la frecuencia de oscilación depende del parámetro V_{AB} . Allí se ve que existen cuatro regiones diferenciadas en colores. El punto que divide la región verde de la azul, representa una transición de fase en la dinámica cuántica. En el trabajo, se vio que las propiedades de *no analiticidad* dan origen a esta transición de fase. A partir de ese punto hacia la izquierda los polos poseen distintos decaimientos, es decir la parte imaginaria de los dos polos se comportan distintos. Uno tiende a convertirse en un autoestado de energía E_0 , mientras que el otro converge al valor que tendría en el polo del sistema “átomo sobre un sustrato” con energía $\tilde{E}_0 = 0$. De esta forma confirmamos que los cálculos obtenidos, permiten encontrar el sistema “átomo + átomo con cadena” al valuar V_{AB} en cero. También se puede ver a partir de la ecuación 3.17 que si V_0 se hace cero, se obtiene el sistema “dímero + cadena”.

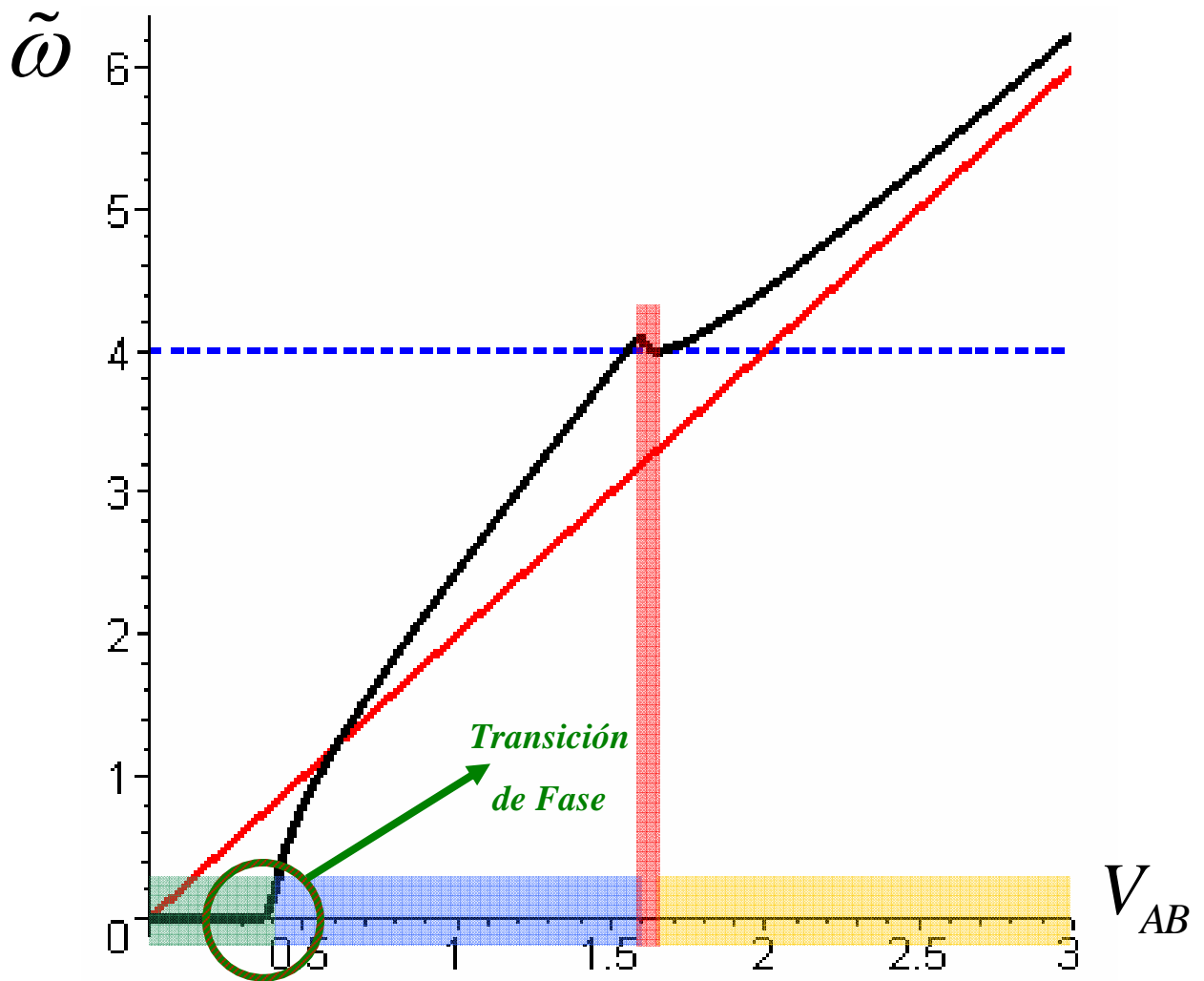


Gráfico 5.2: **Negro:** frecuencia de oscilación del dímero acoplado; **Rojo:** Frecuencia de oscilación del dímero aislado.

5.2 Densidad local de estados:

Al analizar la densidad de estados en los dos primeros sistemas estudiados en el capítulo 3, se encontraron esencialmente tres regiones (en el dímero sobre un sustrato, consideramos la región I y II como una sola). En una de las regiones se observó que existían estados resonantes. A ellos los identificamos como los polos de la función de Green con parte imaginaria distinta de cero. Mientras que los polos reales puros, podían ser de dos tipos: *Estados Localizados* o *Niveles Virtuales*. En este trabajo encontramos que a

pesar que los polos son reales puros, estos no se corresponden necesariamente con estados localizados, sino que a *niveles Virtuales*. Se pudo observar que los polos en esta región se encontraban en una hoja de Riemann no física, mientras que los polos en la región III se encontraban dentro de la hoja física. En los gráficos 5.3 y 5.4 se puede apreciar las regiones de los sistemas “átomo sobre sustrato” y “dímero sobre sustrato” respectivamente.

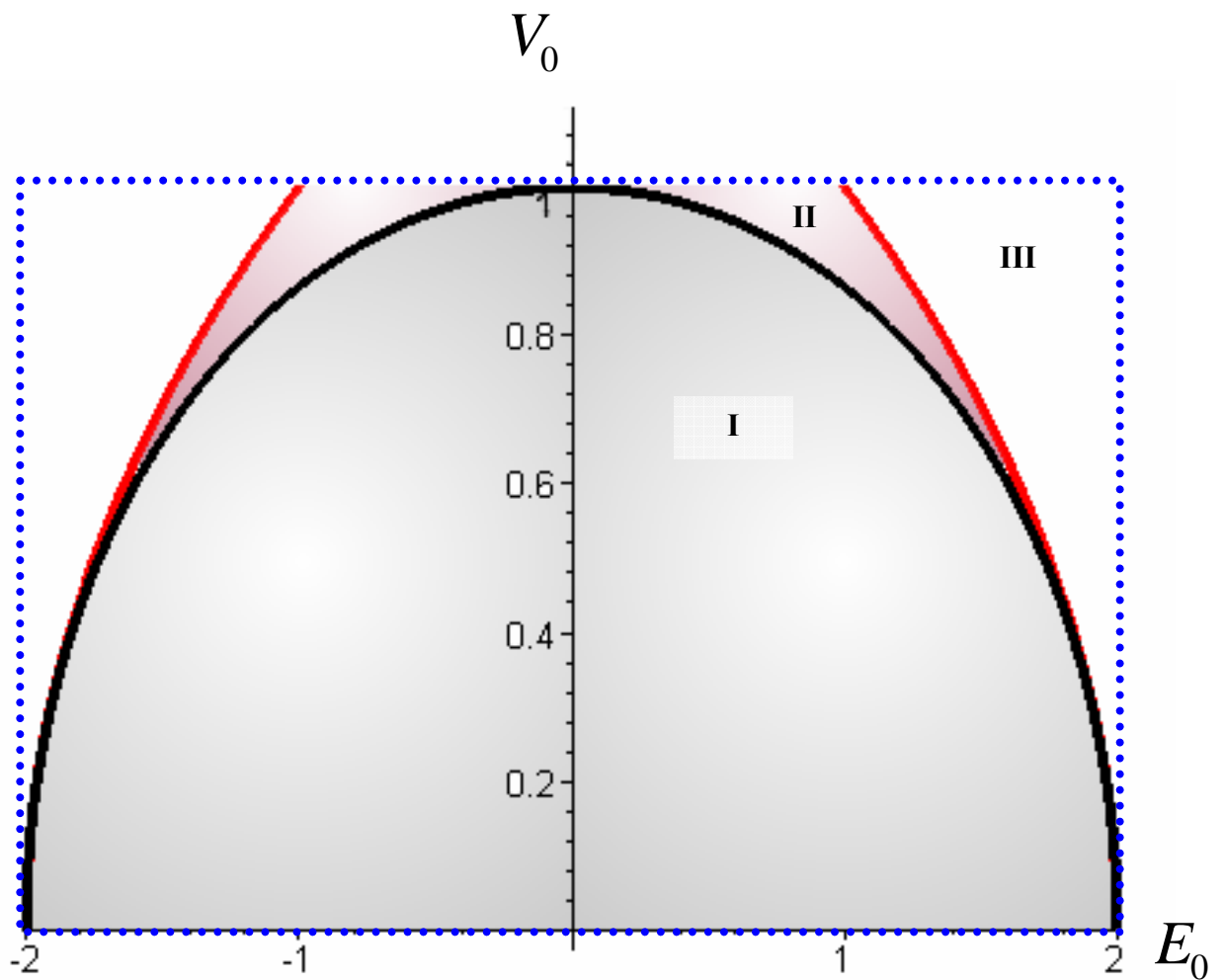


Gráfico 5.3: Regiones en el modelo de Átomo sobre sustrato

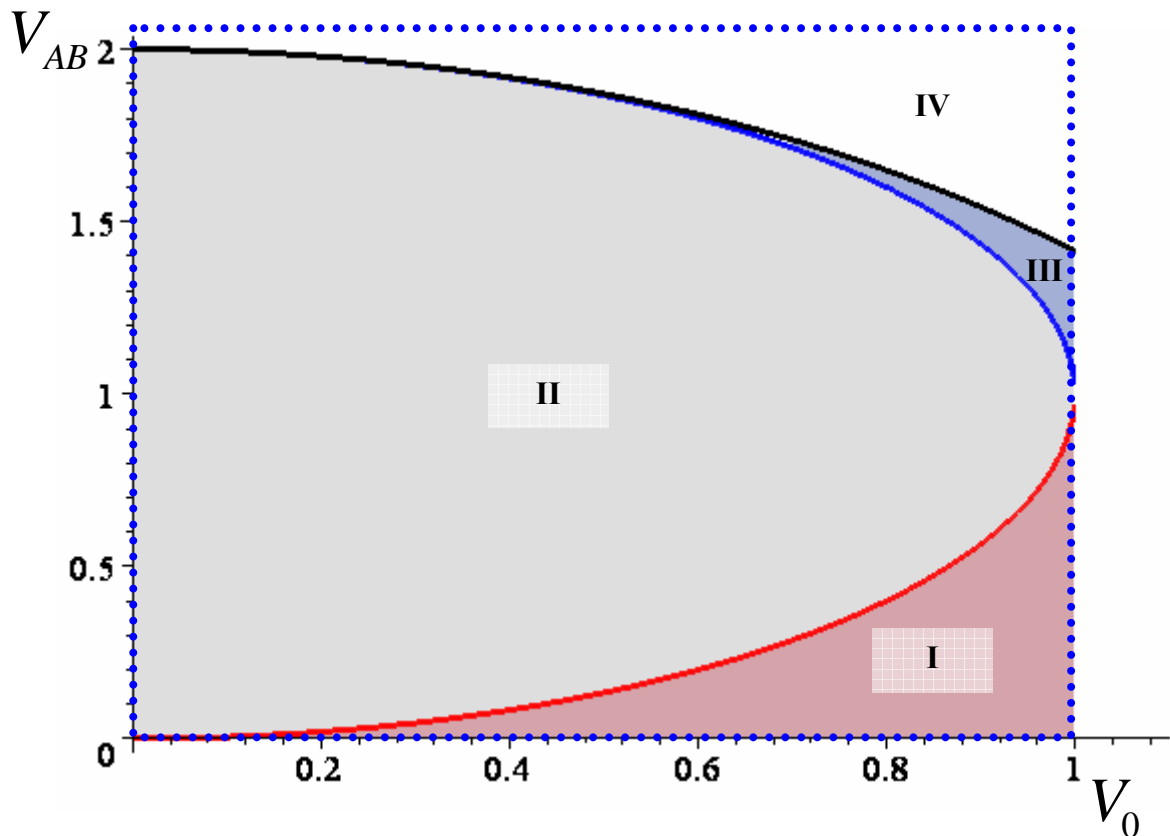


Gráfico 5.4: Regiones en el modelo de Dímero sobre sustrato

5.3 Límite Termodinámico:

Al analizar la dinámica del sistema dímero sobre sustrato, se observó la existencia de una transición de fase (ver gráfico 5.2). La misma se debe a propiedades de no analiticidad del sistema infinito. En el caso finito, no podemos hablar de propiedades analíticas, ya que nuestro sistema es discreto. En consecuencia, en el capítulo 4 se analizó la dinámica del sistema finito (dímero + cadena lineal de longitud N). Esta nos permitió corroborar que si N es grande, la transición de fase analizada en la sección 3.2 puede ser observada como resultado de tomar el límite termodinámico (ver gráfico 5.5).

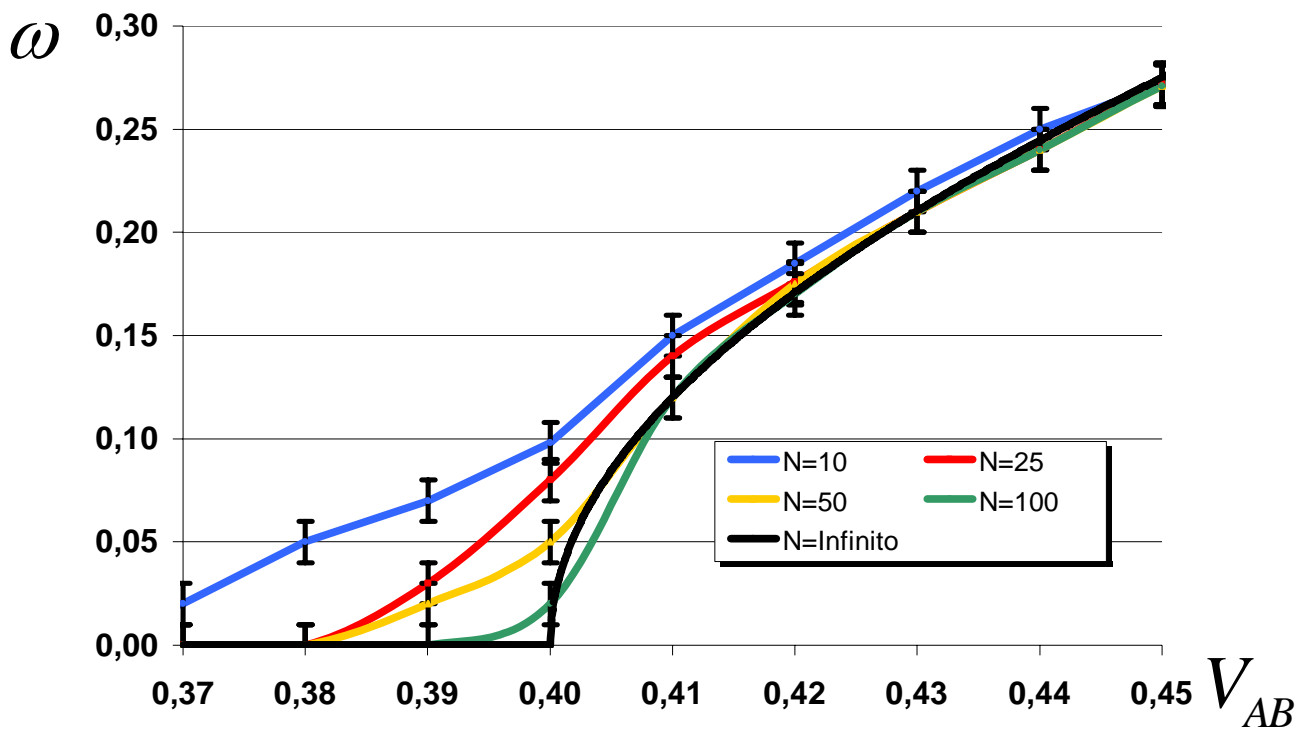


Gráfico 5.5

5.4 Resultados Globales

A lo largo del trabajo estudiamos sistemas que interactúan con un ambiente cuántico absorbente. Pudimos observar que los efectos producidos por este “ambiente” no son simplemente extraer probabilidad del sistema, como ocurre en una aproximación Markoviana, sino que determina cambios mayúsculos en la dinámica. Esto es posible debido a que estamos resolviendo la dinámica cuántica del “ambiente” en forma exacta. Llegamos a observar transiciones de fases que pueden obtenerse aun cuando la longitud de la cadena no es infinita. Esto brinda la oportunidad de poder estudiar las transiciones en distintos sistemas. Por ejemplo se han observado estas transiciones en sistemas de espines en RMN en sólidos [ADLP06] [ALP07]. A lo largo del trabajo hemos hecho hincapié en las propiedades de no-analiticidad. Esto nos llevó a encontrar

regímenes en los que los polos se encontraban dentro de hojas de Riemann no-físicas, los cuales asociamos con *niveles virtuales*. Este sistema simple nos permitió estudiar paso a paso y con gran detalle las soluciones del sistema. Si bien el sistema estudiado no parece tener mayor complejidad, contiene suficiente riqueza para proveer de resultados importantes que permiten crear las bases para crecer en complejidad. En la sección 3.3 se observó cómo expresar sistemas de mayor complejidad en términos de resultados ya conocidos. Esto permite crear un camino sobre el cual avanzar y corroborar nuevos resultados.

Un aspecto interesante a profundizar será predecir una manifestación física de los niveles virtuales. Se espera que en un futuro próximo se realicen experimentos en otras áreas sobre las cuales se pueda corroborar el resultado central obtenido en el trabajo: la aparición de distintos regímenes en la oscilación de Rabi inducidos por un ambiente no-Markoviano (ver gráfico 5.6).

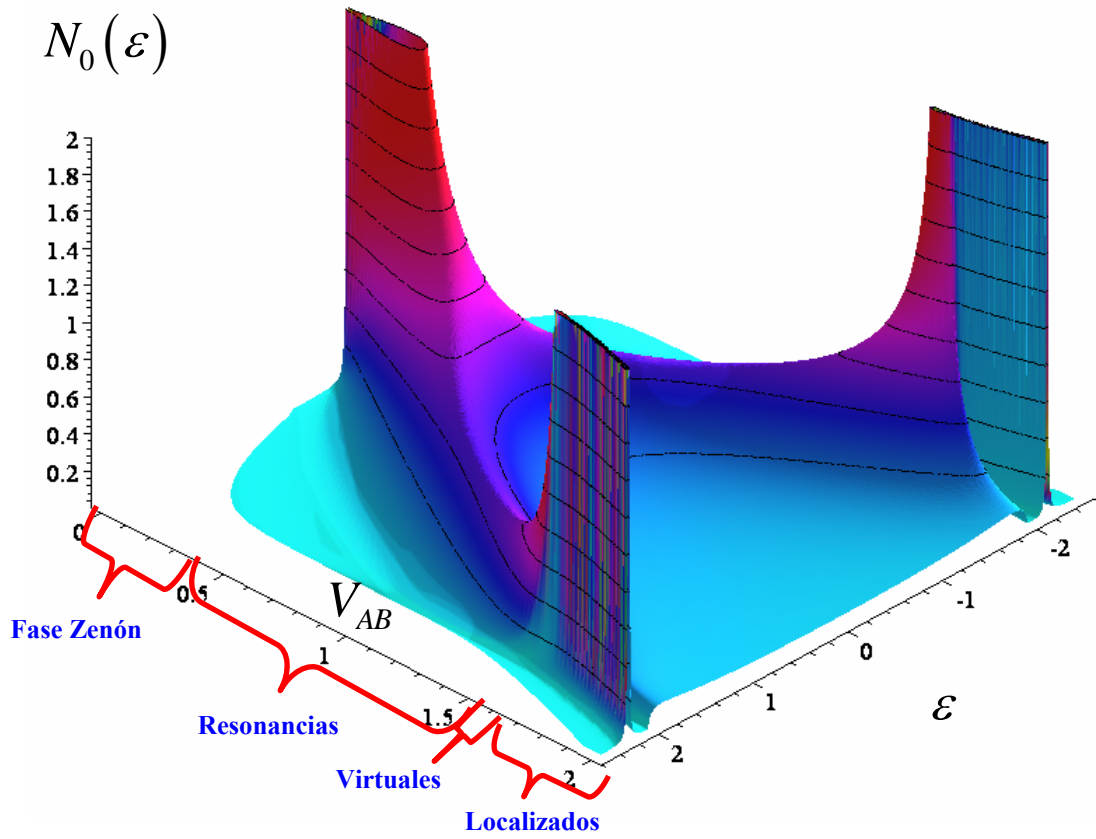


Gráfico 5.6: Densidad local de estados variando V_{AB} y ε .

Apéndice

Apéndice A Estado de un sitio interactuando con el ambiente.

A-I Polos de la Función de Green

Resolviendo la ecuación (3.6) se obtiene

$$\varepsilon_r \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) - E_0 = i \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon_r^2/4}, \quad (1)$$

$$\left(\varepsilon_r \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) - E_0 \right)^2 = -\frac{V_0^4}{V^4} (V^2 - \varepsilon_r^2/4), \quad (2)$$

$$\varepsilon_r^2 \left(1 + \frac{V_0^4}{4V^4} - \frac{V_0^2}{V^2} \right) + E_0^2 - 2E_0\varepsilon_r \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) = -\frac{V_0^4}{V^2} + \frac{V_0^4\varepsilon_r^2}{4V^4}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_r^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{V^2} \right) - 2\varepsilon_r E_0 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) + \left(E_0^2 + \frac{V_0^4}{V^2} \right) = 0, \quad (4)$$

$$\varepsilon_r^2 (V^2 - V_0^2) - \varepsilon_r E_0 (2V^2 - V_0^2) + (V^2 E_0^2 + V_0^4) = 0, \quad (5)$$

cuyas soluciones son

$$\varepsilon_r = \frac{E_0 (2V^2 - V_0^2) \pm \sqrt{E_0^2 (2V^2 - V_0^2)^2 - 4(V^2 E_0^2 + V_0^4)(V^2 - V_0^2)}}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (6)$$

$$\varepsilon_r = \frac{E_0 (2V^2 - V_0^2) \pm \sqrt{4V^4 E_0^2 + V_0^4 E_0^2 - 4V^2 V_0^2 E_0^2 - 4V^4 E_0^2 + 4V^2 V_0^2 E_0^2 - 4V_0^4 V^2 + 4V_0^6}}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_r = \frac{E_0 (2V^2 - V_0^2) \pm V_0^2 \sqrt{E_0^2 - 4(V^2 - V_0^2)}}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (8)$$

$$\varepsilon_r = \frac{E_0(2V^2 - V_0^2)}{2(V^2 - V_0^2)} \pm \frac{V_0^2 \sqrt{E_0^2 - 4(V^2 - V_0^2)}}{2(V^2 - V_0^2)}. \quad (9)$$

A-II Densidad de Estados

Partiendo de la ecuación (3.10) obtenemos

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{\varepsilon \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) - E_0 + i \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}} \right], \quad (10)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{\varepsilon \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) - E_0 - i \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\left(\varepsilon \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) - E_0 \right)^2 + \frac{V_0^4}{V^4} (V^2 - \varepsilon^2/4)} \right]. \quad (11)$$

Recordando que para calcular $N(\varepsilon)$ usamos $\varepsilon \in \mathbb{R}$ por lo que

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\left(\varepsilon \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) - E_0 \right)^2 + \frac{V_0^4}{V^4} (V^2 - \varepsilon^2/4)}, \quad (12)$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{\frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\varepsilon^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right)^2 + E_0^2 - 2\varepsilon E_0 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) + \frac{V_0^4}{V^2} - \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{4V^4}}, \quad (13)$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{\frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\varepsilon^2 + \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{4V^4} - \varepsilon^2 \frac{V_0^2}{V^2} + E_0^2 - 2\varepsilon E_0 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2}\right) + \frac{V_0^4}{V^2} - \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{4V^4}}, \quad (14)$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{\frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\varepsilon^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{V^2}\right) + E_0^2 - 2\varepsilon E_0 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2}\right) + \frac{V_0^4}{V^2}}, \quad (15)$$

$$= \left[\frac{1}{\pi V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right] \frac{V_0^2}{\varepsilon^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{V^2}\right) + E_0^2 - 2\varepsilon E_0 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2}\right) + \frac{V_0^4}{V^2}}, \quad (16)$$

Si analizamos la densidad local de estados ($N_1(\varepsilon)$) para la cadena semi infinita, vemos que

$$N_1(\varepsilon) = \left[\frac{1}{\pi V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right], \quad (17)$$

por lo que

$$N(\varepsilon) = N_1(\varepsilon) \frac{V_0^2}{\varepsilon^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{V^2}\right) + E_0^2 - 2\varepsilon E_0 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2}\right) + \frac{V_0^4}{V^2}}, \quad (18)$$

$$= N_1(\varepsilon) \frac{V^2 V_0^2}{\varepsilon^2 (V^2 - V_0^2) + V^2 E_0^2 - \varepsilon E_0 (2V^2 - V_0^2) + V_0^4}, \quad (19)$$

$$= N_1(\varepsilon) \frac{\frac{V^2 V_0^2}{(V^2 - V_0^2)}}{\varepsilon^2 - \varepsilon \frac{E_0 (2V^2 - V_0^2)}{(V^2 - V_0^2)} + \left(\frac{V^2 E_0^2 + V_0^4}{(V^2 - V_0^2)} \right)}, \quad (20)$$

$$= N_1(\varepsilon) \frac{\frac{V^2 V_0^2}{(V^2 - V_0^2)}}{\left(\varepsilon - \frac{E_0(2V^2 - V_0^2)}{2(V^2 - V_0^2)} \right)^2 + \left[\left(\frac{V^2 E_0^2 + V_0^4}{(V^2 - V_0^2)} \right) - \left(\frac{E_0(2V^2 - V_0^2)}{2(V^2 - V_0^2)} \right)^2 \right]}. \quad (21)$$

Ahora si denominamos

$$c = \frac{V^2 V_0^2}{2(V^2 - V_0^2) \Gamma_r}, \quad (22)$$

$$E_r = \frac{E_0(2V^2 - V_0^2)}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (23)$$

$$\Gamma_r = \left[\left(\frac{V^2 E_0^2 + V_0^4}{(V^2 - V_0^2)} \right) - \left(\frac{E_0(2V^2 - V_0^2)}{2(V^2 - V_0^2)} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (24)$$

$$= \frac{V_0^2 \sqrt{E_0^2 - 4(V^2 - V_0^2)}}{2(V^2 - V_0^2)}, \quad (25)$$

obtenemos

$$N(\varepsilon) = N_1(\varepsilon) \frac{2c \Gamma_r}{(\varepsilon - E_r)^2 + \Gamma_r^2}. \quad (26)$$

Apéndice B Estado de dos sitios interactuando con el ambiente.

B-I Polos de la Función de Green

En la región $|\varepsilon| < 2V$ los polos de la Función de Green se obtienen de resolver

$$0 = \varepsilon - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]}, \quad (27)$$

$$\varepsilon \left[\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right] \right] = V_{AB}^2, \quad (28)$$

$$\varepsilon^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right) + i \frac{V_0^2}{V^2} \varepsilon \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} = V_{AB}^2, \quad (29)$$

$$i \frac{V_0^2}{V^2} \varepsilon \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} = V_{AB}^2 - \varepsilon^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right), \quad (30)$$

$$-\frac{V_0^4}{V^4} \varepsilon^2 (V^2 - \varepsilon^2/4) = V_{AB}^4 + \varepsilon^4 \left(1 - \frac{V_0^2}{V^2} + \frac{V_0^4}{4V^4} \right) - 2\varepsilon^2 V_{AB}^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right), \quad (31)$$

$$\varepsilon^4 \frac{V_0^4}{4V^4} - \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^2} = V_{AB}^4 + \varepsilon^4 - \varepsilon^4 \frac{V_0^2}{V^2} + \varepsilon^4 \frac{V_0^4}{4V^4} - 2\varepsilon^2 V_{AB}^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right), \quad (32)$$

$$-\varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^2} = V_{AB}^4 + \varepsilon^4 \left(1 - \frac{V_0^2}{V^2} \right) - 2\varepsilon^2 V_{AB}^2 \left(1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right), \quad (33)$$

$$0 = \varepsilon^4 (V^2 - V_0^2) - \varepsilon^2 V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) + \varepsilon^2 V_0^4 + V^2 V_{AB}^4, \quad (34)$$

$$0 = \varepsilon^4 (V^2 - V_0^2) - \varepsilon^2 \left[V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) - V_0^4 \right] + V^2 V_{AB}^4. \quad (35)$$

De aquí podemos resolver la ecuación de segundo grado en ε^2 , con lo cual obtenemos

$$\varepsilon^2 = \frac{V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) - V_0^4 \pm \sqrt{[V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) - V_0^4]^2 - 4V^2 V_{AB}^4 (V^2 - V_0^2)}}{2(V^2 - V_0^2)}. \quad (36)$$

Dentro de la raíz obtenemos

$$\sqrt{\dots} = \sqrt{V_{AB}^4 (2V^2 - V_0^2)^2 - 2V_{AB}^2 V_0^4 (2V^2 - V_0^2) + V_0^8 - 4V^4 V_{AB}^4 + 4V_0^2 V^2 V_{AB}^4} \quad (37)$$

$$\sqrt{\dots} = \sqrt{4V^4 V_{AB}^4 + V_0^4 V_{AB}^4 - 4V^2 V_0^2 V_{AB}^4 - 2V_{AB}^2 V_0^4 (2V^2 - V_0^2) + V_0^8 - 4V^4 V_{AB}^4 + 4V_0^2 V^2 V_{AB}^4} \quad (38)$$

$$\sqrt{\dots} = \sqrt{V_0^4 V_{AB}^4 - 2V_{AB}^2 V_0^4 (2V^2 - V_0^2) + V_0^8}, \quad (39)$$

$$\sqrt{\dots} = V_0^2 \sqrt{V_{AB}^4 - 4V_{AB}^2 V^2 + 2V_{AB}^2 V_0^2 + V_0^4}, \quad (40)$$

$$\sqrt{\dots} = V_0^2 \sqrt{(V_{AB}^2 + V_0^2)^2 - 4V_{AB}^2 V^2}. \quad (41)$$

De aquí vemos que

$$\varepsilon^2 = \frac{V_{AB}^2 (2V^2 - V_0^2) - V_0^4 \pm V_0^2 \sqrt{(V_{AB}^2 + V_0^2)^2 - 4V_{AB}^2 V^2}}{2(V^2 - V_0^2)}. \quad (42)$$

Cabe aclarar que el signo debe ser elegido de forma tal que los polos tengan parte imaginaria Negativa.

B-II Densidad de Estados en la región II

La densidad de estados de 2 sitios acoplado a un ambiente lo podemos expresar usando la ecuación (3.9) y la función de green (3.18).

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{\varepsilon - \frac{V_{AB}^2}{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]}} \right], \quad (43)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]}{\varepsilon \left[\varepsilon - \frac{V_0^2}{V^2} \left[\varepsilon/2 - i\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right] \right] - V_{AB}^2} \right], \quad (44)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{\varepsilon \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] + i \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 + i \varepsilon \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}} \right], \quad (45)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{\left[\varepsilon \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] + i \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right] \left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 - i \varepsilon \frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \right]}{\left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 \right]^2 + \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^4} \left[V^2 - \varepsilon^2/4 \right]} \right], \quad (46)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \frac{\frac{V_0^2}{V^2} \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4} \left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 \right] - \varepsilon^2 \frac{V_0^2}{V^2} \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] \sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 \right]^2 + \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^4} \left[V^2 - \varepsilon^2/4 \right]}, \quad (47)$$

$$= \left[\frac{\sqrt{V^2 - \varepsilon^2/4}}{\pi V^2} \right] \frac{\varepsilon^2 V_0^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_0^2 \left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 \right]}{\left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 \right]^2 + \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^4} \left[V^2 - \varepsilon^2/4 \right]}. \quad (48)$$

Usando (17) vemos que

$$N(\varepsilon) = \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{V_0^2 V_{AB}^2}{\left[\varepsilon^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] - V_{AB}^2 \right]^2 + \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^4} \left[V^2 - \varepsilon^2/4 \right]}, \quad (49)$$

$$= \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{V_0^2 V_{AB}^2}{\varepsilon^4 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right]^2 + V_{AB}^4 - 2\varepsilon^2 V_{AB}^2 \left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right] + \varepsilon^2 \frac{V_0^4}{V^2} - \varepsilon^4 \frac{V_0^4}{4V^4}}, \quad (50)$$

$$= \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{V_0^2 V_{AB}^2}{\varepsilon^4 \left[\left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right]^2 - \frac{V_0^4}{4V^4} \right] - \varepsilon^2 \left[\frac{V_{AB}^2 \left[2V^2 - V_0^2 \right] - V_0^4}{V^2} \right] + V_{AB}^4}, \quad (51)$$

$$= \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{V_0^2 V_{AB}^2}{\varepsilon^4 - \varepsilon^2 \left[\frac{V_{AB}^2 \left[2V^2 - V_0^2 \right] - V_0^4}{\left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right]^2 V^2 - \frac{V_0^4}{4V^2}} \right] + \frac{V_{AB}^4}{\left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2} \right]^2 - \frac{V_0^4}{4V^4}}}, \quad (52)$$

$$= \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{V_0^2 V_{AB}^2}{\varepsilon^4 - \varepsilon^2 \left[\frac{V_{AB}^2 \left[2V^2 - V_0^2 \right] - V_0^4}{\left[V^2 - V_0^2 \right]} \right] + \frac{4V^2 V_{AB}^4}{V^2 - V_0^2}}. \quad (53)$$

Por otro lado supongamos que tenemos dos funciones Lorentzianas y deseamos calcular su producto

$$L_1(\varepsilon) L_2(\varepsilon) = \frac{2c\Gamma}{\left[\varepsilon - \varepsilon_r \right]^2 + \Gamma^2} \frac{2c\Gamma}{\left[\varepsilon + \varepsilon_r \right]^2 + \Gamma^2}, \quad (54)$$

donde c , ε_r y Γ son constantes.

$$L_1(\varepsilon) L_2(\varepsilon) = \frac{4c^2 \Gamma^2}{\left[\left[\varepsilon - \varepsilon_r \right]^2 + \Gamma^2 \right] \left[\left[\varepsilon + \varepsilon_r \right]^2 + \Gamma^2 \right]}, \quad (55)$$

$$= \frac{4c^2\Gamma^2}{\left[\varepsilon - \varepsilon_r\right]^2 \left[\varepsilon + \varepsilon_r\right]^2 + \Gamma^2 \left[\varepsilon - \varepsilon_r\right]^2 + \left[\varepsilon - \varepsilon_r\right]^2 \Gamma^2 + \Gamma^4}, \quad (56)$$

$$= \frac{4c^2\Gamma^2}{\left[\varepsilon^2 + \varepsilon_r^2 - 2\varepsilon\varepsilon_r\right] \left[\varepsilon^2 + \varepsilon_r^2 + 2\varepsilon\varepsilon_r\right] + \Gamma^2 \left[\varepsilon^2 + \varepsilon_r^2 + 2\varepsilon\varepsilon_r\right] + \left[\varepsilon^2 + \varepsilon_r^2 - 2\varepsilon\varepsilon_r\right] \Gamma^2 + \Gamma^4}, \quad (57)$$

$$= \frac{4c^2\Gamma^2}{\varepsilon^4 + 2\varepsilon^2\varepsilon_r^2 + \varepsilon_r^4 - 4\varepsilon^2\varepsilon_r^2 + 2\Gamma^2\varepsilon^2 + 2\Gamma^2\varepsilon_r^2 + \Gamma^4}, \quad (58)$$

$$= \frac{4c^2\Gamma^2}{\varepsilon^4 - \varepsilon^2 \left[2\varepsilon_r^2 - 2\Gamma^2\right] + \left[\varepsilon_r^4 + 2\Gamma^2\varepsilon_r^2 + \Gamma^4\right]}, \quad (59)$$

Ahora propongamos las siguientes ecuaciones

$$4c^2\Gamma^2 = V_0^2 V_{AB}^2, \quad (60)$$

$$2\varepsilon_r^2 - 2\Gamma^2 = \frac{V_{AB}^2 \left[2V^2 - V_0^2\right] - V_0^4}{\left[1 - \frac{V_0^2}{2V^2}\right]^2 V^2 - \frac{V_0^4}{4V^2}}, \quad (61)$$

$$\left(\varepsilon_r^2 + \Gamma^2\right)^2 = \frac{4V^2 V_{AB}^4}{V^2 - V_0^2}. \quad (62)$$

Usando (61) y (62) obtenemos

$$\varepsilon_r^2 = \frac{V_{AB}^2 \left[2V^2 - V_0^2\right] - V_0^4}{2 \left[V^2 - V_0^2\right]} + \Gamma^2, \quad (63)$$

y

$$\frac{V_{AB}^2 \left[2V^2 - V_0^2\right] - V_0^4}{2 \left[V^2 - V_0^2\right]} + 2\Gamma^2 = \left[\frac{4V^2 V_{AB}^4}{V^2 - V_0^2} \right]^{1/2}, \quad (64)$$

$$\Gamma^2 = \left[\frac{V^2 V_{AB}^4}{V^2 - V_0^2} \right]^{1/2} - \frac{V_{AB}^2 [2V^2 - V_0^2] - V_0^4}{4[V^2 - V_0^2]}. \quad (65)$$

Las ecuaciones 60-65 nos permiten expresar la densidad local de estados, de la forma

$$N(\varepsilon) = \tilde{N}_2(\varepsilon) L_1(\varepsilon) L_2(\varepsilon), \quad (66)$$

$$= \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{2c\Gamma}{[\varepsilon - \varepsilon_r]^2 + \Gamma^2} \frac{2c\Gamma}{[\varepsilon + \varepsilon_r]^2 + \Gamma^2}, \quad (67)$$

B-III Densidad de Estados en la región II

En esta sección expresaremos la densidad en la región I. Para ello desarrollemos el siguiente producto de Lorentzianas

$$\tilde{L}_1(\varepsilon) \tilde{L}_2(\varepsilon) = \frac{2c\Gamma_1}{\varepsilon^2 + \Gamma_1^2} \frac{2c\Gamma_2}{\varepsilon^2 + \Gamma_2^2}, \quad (68)$$

$$= \frac{4c^2\Gamma_1\Gamma_2}{\varepsilon^4 + \varepsilon^2(\Gamma_1^2 + \Gamma_2^2) + \Gamma_1^2\Gamma_2^2}. \quad (69)$$

Comparando las ecuaciones (69) y (53), vemos que

$$4c^2\Gamma_1\Gamma_2 = V_0^2 V_{AB}^2, \quad (70)$$

$$\Gamma_1^2 + \Gamma_2^2 = \frac{V_{AB}^2 [2V^2 - V_0^2] - V_0^4}{[V^2 - V_0^2]}, \quad (71)$$

$$\Gamma_1^2 \Gamma_2^2 = \frac{4V^2 V_{AB}^4}{V^2 - V_0^2}. \quad (72)$$

Al resolver las ecuaciones obtenemos

$$\Gamma_1^2 = \frac{V_0^4 - V_{AB}^2 [2V^2 - V_0^2]}{2[V^2 - V_0^2]} - \frac{\sqrt{(V_0^4 - V_{AB}^2 [2V^2 - V_0^2])^2 - 16V^2 V_{AB}^2 (V^2 - V_0^2)}}{2[V^2 - V_0^2]}, \quad (73)$$

$$\Gamma_2^2 = \frac{V_0^4 - V_{AB}^2 [2V^2 - V_0^2]}{2[V^2 - V_0^2]} + \frac{\sqrt{(V_0^4 - V_{AB}^2 [2V^2 - V_0^2])^2 - 16V^2 V_{AB}^2 (V^2 - V_0^2)}}{2[V^2 - V_0^2]}. \quad (74)$$

Combinando los resultados, la densidad local de estados se puede expresar como

$$N(\varepsilon) = \tilde{N}_2(\varepsilon) \tilde{L}_1(\varepsilon) \tilde{L}_2(\varepsilon), \quad (75)$$

$$= \tilde{N}_2(\varepsilon) \frac{2c\Gamma_1}{\varepsilon^2 + \Gamma_1^2} \frac{2c\Gamma_2}{\varepsilon^2 + \Gamma_2^2}. \quad (76)$$

Apéndice C Átomo embebido

En esta sección obtendremos el hamiltoniano para el sistema de átomo embebido en la base $\{|n_+\rangle, |n_-\rangle\}$. Para ello, veamos que

$$|n\rangle\langle n+1| + |-n\rangle\langle -n-1| = \frac{1}{2} [(|n_+\rangle + |-n_-\rangle) (\langle n_+ + 1| + \langle n_- - 1|) + (|n_+\rangle - |-n_-\rangle) (\langle n_+ + 1| - \langle n_- - 1|)], \quad (77)$$

$$= |n_+\rangle\langle n_+ + 1| + |n_-\rangle\langle n_- - 1|, \quad (78)$$

$$|n+1\rangle\langle n| + |-n-1\rangle\langle -n| = \frac{1}{2} [(|n_+ + 1\rangle + |-n_- - 1\rangle) (\langle n_+| + \langle n_-|) + (|n_+ + 1\rangle - |-n_- - 1\rangle) (\langle n_+| - \langle n_-|)], \quad (79)$$

$$= |n_+ + 1\rangle\langle n_+| + |n_- - 1\rangle\langle n_-|, \quad (80)$$

$$|n\rangle\langle n| + |-n\rangle\langle -n| = \frac{1}{2} [(|n_+\rangle + |-n_-\rangle) (\langle n_+| + \langle n_-|) + (|n_+\rangle - |-n_-\rangle) (\langle n_+| - \langle n_-|)], \quad (81)$$

$$= |n_+\rangle\langle n_+| + |n_-\rangle\langle n_-|, \quad (82)$$

$$|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle -1| + |-1\rangle\langle 0| = |0\rangle (\langle 1| + \langle -1|) + (|1\rangle + |-1\rangle) \langle 0|, \quad (83)$$

$$= \frac{|0\rangle\langle 1_+| + |1_+\rangle\langle 0|}{\sqrt{2}}, \quad (84)$$

Si reemplazamos las ecuaciones (77)-(84) en el hamiltoniano 3.43 obtenemos

$$\begin{aligned}
H = \sum_{n \neq 0} & \left[V(|n_+\rangle\langle n_+ + 1| + |n_+ + 1\rangle\langle n_+| + |n_-\rangle\langle n_- - 1| + |n_- - 1\rangle\langle n_-|) + E(|n_+\rangle\langle n_+| + |n_-\rangle\langle n_-|) \right] \\
& + \frac{V_0}{\sqrt{2}} (|0\rangle\langle 1_+| + |1_+\rangle\langle 0|) + E_0 (|0\rangle\langle 0|)
\end{aligned} \tag{85}$$

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & E & V & & & \\ & & V & E & & & \\ & & & & E_0 & V_0/\sqrt{2} & \\ & & & & V_0/\sqrt{2} & E & V \\ & & & & & V & E & \ddots \\ & & & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{86}$$

donde la matriz está expresada en la base $\{\dots, 2_-, 1_-, 0, 1_+, 2_+, \dots\}$.

Apéndice D Dímero embebido

En esta sección expresaremos el hamiltoniano del sistema de dímero embebido en la base simétrica y antisimétrica.

Usando el cambio de base mencionado en las ecuaciones (3.54)-(3.57) vemos que

$$|n\rangle\langle n+1| + |-n\rangle\langle -n-1| = \frac{1}{2} \left[(|n_+\rangle + |-n_-\rangle)(\langle n_+ + 1| + \langle n_- - 1|) + (|n_+\rangle - |-n_-\rangle)(\langle n_+ + 1| - \langle n_- - 1|) \right], \tag{87}$$

$$= |n_+\rangle\langle n_+ + 1| + |n_-\rangle\langle n_- - 1|, \tag{88}$$

$$|n+1\rangle\langle n|+|-n-1\rangle\langle -n| = \frac{1}{2}[(|n_+ + 1\rangle + |-n_- - 1\rangle)(\langle n_+ | + \langle n_- |) + (|n_+ + 1\rangle - |-n_- - 1\rangle)(\langle n_+ | - \langle n_- |)], \quad (89)$$

$$= |n_+ + 1\rangle\langle n_+ | + |n_- - 1\rangle\langle n_- |, \quad (90)$$

$$|n\rangle\langle n| + |-n\rangle\langle -n| = \frac{1}{2}[(|n_+\rangle + |-n_-\rangle)(\langle n_+ | + \langle n_- |) + (|n_+\rangle - |-n_-\rangle)(\langle n_+ | - \langle n_- |)], \quad (91)$$

$$= |n_+\rangle\langle n_+ | + |n_-\rangle\langle n_- |, \quad (92)$$

$$|-1\rangle\langle a| + |1\rangle\langle b| = \frac{1}{2}[(|1_+\rangle - |1_-\rangle)(\langle 0_+ | - \langle 0_- |) + (|1_+\rangle + |1_-\rangle)(\langle 0_+ | + \langle 0_- |)], \quad (93)$$

$$= |1_+\rangle\langle 0_+ | + |1_-\rangle\langle 0_- |, \quad (94)$$

$$|a\rangle\langle -1| + |b\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}[(|0_+\rangle - |0_-\rangle)(\langle 1_+ | - \langle 1_- |) + (|0_+\rangle + |0_-\rangle)(\langle 1_+ | + \langle 1_- |)], \quad (95)$$

$$= |0_+\rangle\langle 1_+ | + |0_-\rangle\langle 1_- |, \quad (96)$$

$$|a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a| = \frac{1}{2}[(|0_+\rangle - |0_-\rangle)(\langle 0_+ | + \langle 0_- |) + (|0_+\rangle + |0_-\rangle)(\langle 0_+ | - \langle 0_- |)], \quad (97)$$

$$= |0_+\rangle\langle 0_+ | - |0_-\rangle\langle 0_- |, \quad (98)$$

$$|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b| = \frac{1}{2}[(|0_+\rangle - |0_-\rangle)(\langle 0_+ | - \langle 0_- |) + (|0_+\rangle + |0_-\rangle)(\langle 0_+ | + \langle 0_- |)], \quad (99)$$

$$= |0_+\rangle\langle 0_+ | + |0_-\rangle\langle 0_- |. \quad (100)$$

Si reemplazamos las ecuaciones (87)-(100) en el hamiltoniano (3.52) obtenemos

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{n \geq 1} \left[V(|n_+\rangle\langle n_+ + 1| + |n_+ + 1\rangle\langle n_+| + |n_-\rangle\langle n_- - 1| + |n_- - 1\rangle\langle n_-|) + E(|n_+\rangle\langle n_+| + |n_-\rangle\langle n_-|) \right] \\
& + V_0(|0_+\rangle\langle 1_+| + |1_+\rangle\langle 0_+| + |0_-\rangle\langle 1_-| + |1_-\rangle\langle 0_-|) \\
& + (E_0 + V_{AB})|0_+\rangle\langle 0_+| + (E_0 - V_{AB})|0_-\rangle\langle 0_-|
\end{aligned} \tag{101}$$

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & & & \\ \ddots & E & V & & & & & & \\ & V & E & V_0 & & & & & \\ & & V_0 & E_0 - V_{AB} & & & & & \\ & & & & E_0 + V_{AB} & V_0 & & & \\ & & & & V_0 & E & V & & \\ & & & & & V & E & \ddots & \\ & & & & & & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}. \tag{102}$$

Apéndice E Programa Probabilidad de Supervivencia

! Sistema: Dímero adsorbido por cadena lineal finita de N sitios

! Desarrollado para Fortran 90

```
program Cadena
```

```
use MSIMSLMD
```

```
use MSIMSLMS
```

```
use PORTLIB
```

```
implicit none
```

```
character (32) filenamei
```

```
real(8) tmax, Vab, V0, E0
```

```
integer n, rest
```

```
print*, 'Ingrese el Numero de N de sitios:'
```

```
read *, n
```

```
print*, 'Ingrese tiempo máximo que desea observar (ingresar en el formato tt.t):'
```

```
read *, tmax
```

```
print*, 'Ingrese E0 (Teniendo en cuenta que E=2.0):'
```

```
read *, E0
```

```
print*, 'Ingrese V0:'
```

```
read *, V0
```

```
rest=1
```

```
do while (rest .eq. 1) !Esto nos permite ejecutar varias veces el programa  
dejando fijo E0, V0 y tmax
```

```
print*, 'Ingrese el Nombre del Archivo:'
```

```
!Nombre con el cual deseamos exportar los datos
```

```
read *, filenamei
```

```
open(2,file=filenamei)
```

```

    print*,'Ingreso Vab:'
    read *, Vab
    CALL Calculo(n,V0,Vab,E0,filename_i,tmax)
    print*,'Ingreso 1 si desea continuar o 0 si desea terminar:'
    read *, rest
end do
end program Cadena

```

```

subroutine Calculo(n,V0,Vab,E0,filename_i,tmax)

```

!Esta subrutina permita calcular la evolución de la probabilidad de supervivencia

```

use MSIMSLMD

```

```

use MSIMSLMS

```

```

use PORTLIB

```

```

character (32) filename_i

```

```

real(8) tmax,tmin,dt,s,t,mags,Vab,V0,E0

```

```

integer i,k,n,m,t1,t2

```

```

complex(8):: cIM

```

```

complex(8) pfi

```

```

real(8),dimension(:,:),allocatable:: H1,EVEC1

```

```

real(8),dimension(:),allocatable:: W,J,AVEC1

```

```

real(8),dimension(:),allocatable:: m1aux

```

```

open(2,file=filename_i) !Abrimos el archivo

```

```

tmin=0.d0 !Con este valor podríamos variar el instante a partir del cual
           empezamos a tomar los datos

```

```

s=15000 !El valor de s nos indica en cuanto intervalos se dividirá el tiempo total
         de evolución

```

```

dt=(tmax-tmin)/s

```

```

allocate (W(1:n),J(1:n-1))

```

!Definimos la dimensión de W y J, donde W contiene los valores de los saltos, es decir $V=1$, V_0 y V_{ab} , mientras que J contiene los valores de las energías de sitio $E=1$ y E_0 .

```
W=W*0.d0
```

```
J=J*0.d0
```

```
do i=1,n-1
```

```
    J(i)=1.d0
```

```
end do
```

```
do i=1,n-1
```

```
    W(i)=2.d0
```

```
end do
```

```
W(1)=E0
```

```
W(2)=E0
```

```
J(1)=Vab
```

```
J(2)=V0
```

```
cIM=(0.0d0,1.0d0)
```

```
t1=t1*0.
```

```
t2=t2*0.
```

```
t1=time() !t1 mide el tiempo que demora todo el calculo.
```

```
allocate (H1(n,n) , EVEC1(n,n) ) !H es el hamiltoniano del Sistema y EVEC1 va a contener los autoestados del sistema.
```

```
allocate(AVEC1(1:n)) !AVEC1 contendrá las autoenergías del sistema
```

```
H1=H1*0.0d0
```

```
do i=1,n
```

```
    H1(i,i)= W(i)
```

```
end do
```

```
do i=1,n-1
```

```
    H1(i,(i+1))=J(i)
```

```
    H1((i+1),i)=J(i)
```

```

end do
CALL DEVCSF(n,H1,n,AVEC1,EVEC1,n)
allocate(m1aux(1:n))
!*****
!*****EVOLUCION*****
!*****
do m=0,s
    t=m*dt
    mags=mags*0.0d0
    m1aux(1)=m1aux(1)*0.0d0
    pfi=pfi*0.0d0
    do k=1,n
        pfi=pfi+EVEC1(1,k)*EVEC1(1,k)*cdexp(-cIM*AVEC1(k)*t)
        ! Calcula la probabilidad de supervivencia del sitio 0 al tiempo t
    end do
    m1aux(1)=pfi*dconjg(pfi)
    write(2,*)t,m1aux(1) !Graba el resultado en el archivo
end do
close (2)
t2=time()
print*,'tiempo total:',(t2-t1) !muestra el tiempo de calculo
deallocate(AVEC1)
deallocate(EVEC1)
deallocate(H1)
deallocate(W)
deallocate(J)
deallocate(m1aux)

end subroutine

```

Bibliografía

- [ADLP06] G. Alvares, E. Danieli, P. Levstein, and H. Pastawski, *Environmentally induced quantum dynamical phase transition in the spin swapping operation*, J. Chem. Phys. **124**, 194507 (2006)
- [ALP07] G. Alvares, P. Levstein and H. Pastawski, *Signatures of a quantum dynamical phase transition in a three-spin system in presence of a spin environment*, resultados en proceso de publicación.
- [And61] P. W. Anderson, *Localized Magnetic States in Metals*, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [And78] P. W. Anderson, *Local moments a localized states*, Rev. of M. Phys. **50**, 191 (1978).
- [DP90] D'Amato and Pastawski, *Conductance of disordered linear chain including inelastic scattering events*, Phys. Rev. B **41**, 7411 (1990).
- [DPL04] E. Danieli, H. Pastawski and P. Levstein, *Spin projection chromatography*, Chem. Phys. Lett. **348**, 306 (2004).
- [Fey65] R. P. Feynman, *The Feynman lectures on physics, Quantum Mechanics Volume III* (Addison-Wesley, England, 1965).

- [FL81] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Relation between conductivity and transmission matrix*, Phys. Rev B **23**, 6851 (1981).
- [FP06] R. Fiori and H. Pastawski, *Non-Markovian decay beyond the Fermi Golden Rule: Survival collapse of the polarization in spin chains*, Chem. Phys. Lett. **420**, 35 (2006).
- [FTPM06] L. E. F. Foa Torres, H. M. Pastawski and E. Medina, *Antiresonances as precursors of decoherence*, Europhys. Lett. **73**, 164-170 (2006).
- [Hog95] H. Hogreve, *On the (de) stabilization of quantum mechanical binding by potential barriers*, Phys. Lett. A **201**, 111 (1995).
- [HMT89] P. J. Hofstee, H. G. Muller and A. Tip, *Resonances and virtual states for a quantum tunnelling model*, J. Phys. A **22**, 2667 (1989).
- [LL77] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*, p.550 (Cambridge University Press, Oxford, 1977).
- [MS77] B. Misra and E. C. G. Sudarshan, *The Zeno's paradox in quantum theory*, J. Math. Phys. **18**, 756 (1977).
- [Newns68] D. M. Newns, *Self-Consistent Model of Hydrogen Chemisorption*, Phys. Rev **178**, 1123 (1968).
- [PM01] H. M. Pastawski, and E. Medina, *Tight binding methods in quantum transport through molecules and small devices: From*

a coherent to a decoherent description, Revista Mexicana de Física **46**, 1-23 (2001).

[PU98] H. M. Pastawski and G. Usaj, *Dimensional crossover in spin diffusion: A manifestation of the quantum Zeno effect*, Phys. Rev. B **57**, 5017 (1998).

[WF45] J. Wheeler and R. P. Feynman, *Interaction with the Absorber as the Mechanism of Radiation*, Rev. Mod. Phys. **17**, 157 (1945).