

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN



**INFORME FINAL DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN
“CÁLCULO DEL MOMENTO MAGNÉTICO EN LA
APROXIMACIÓN HARTREE-FOCK PARA IMPUREZAS
MAGNÉTICAS EN LOS CORRALES CUÁNTICOS”**

AUTOR: RICHARD SAÚL TORIBIO SAAVEDRA

**(PERIODO DE EJECUCIÓN: Del 01 de mayo de 2019 al 30
de abril de 2020)**

(Resolución de aprobación N⁰ 472-2019-R)

Callao, 2020

PERÚ

DEDICATORIA

A mi familia.

AGRADECIMIENTO

I

Primero agradecer al Dr. José d'Albuquerque e Castro, por la asesoría a este trabajo de investigación.

Y, finalmente, al proyecto de investigación con fondos del FEDU de la Universidad Nacional del Callao, por el apoyo financiero parcialmente.

ÍNDICE

CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	9
1.1. Descripción de la realidad problemática	9
1.2. Formulación del problema	10
1.3. Objetivos	10
1.3.1. Objetivo General	10
1.3.2. Objetivo Específicos	10
1.4. Limitantes de la investigación	10
CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO	12
2.1. Antecedentes	12
2.1.1. Antecedente Internacional	12
2.1.2. Antecedente Nacional	13
2.2. Marco:	14
2.2.1. Teórico	14
2.2.2. Conceptual	20
2.3. Definición de términos básicos	22
CAPÍTULO III: HIPÓTESIS Y VARIABLES	24
3.1. Hipótesis	24
3.2. Definición conceptual de variables	24
3.3. Operacionalización de variables	25
CAPÍTULO IV: DISEÑO METODOLÓGICO	26
4.1. Tipo y diseño de la investigación	26
4.2. Método de investigación	26

4.3. Población y muestra	26
4.4. Lugar de estudio y periodo desarrollado	27
4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información	27
4.6. Análisis y procesamiento de datos	27
CAPÍTULO V: RESULTADOS	29
5.1. Resultados descriptivos	29
5.2. Resultados inferenciales	33
5.3. Otro tipo de resultados de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis	33
CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS	35
6.1. Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	35
6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares	36
6.3. Responsabilidad ética	37
CONCLUSIONES	38
RECOMENDACIONES	39
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	40
ANEXOS	42

Índice de tablas

5.1. <i>LOS PARÁMETROS DE LA ELIPSE DE EXCENTRICIDAD $e = 0.6$, DONDE a ES EL SEMI-EJE MAYOR, b ES EL SEMI-EJE MENOR.</i>	33
5.2. <i>LOS PARÁMETROS DE LA ELIPSE DE EXCENTRICIDAD $e = 0.8$, DONDE a ES EL SEMI-EJE MAYOR, b ES EL SEMI-EJE MENOR.</i>	34

Índice de figuras

2.1. <i>LOS PATRONES DE INTERFERENCIA CUÁNTICA QUE SE FORMA EN EL INTERIOR DE LOS CORRALES CUÁNTICOS DE DIFERENTES FORMATOS</i> [18].	13
2.2. <i>IMAGEN ESPACIAL DE LOS AUTOESTADOS DE UN CORRAL CUÁNTICO.</i>	20
2.3. <i>LAS DOS PRIMERAS FIGURAS ARRIBA MUESTRAN LAS TOPOGRAFÍAS OBSERVADAS CON EL STM Y LAS DOS FIGURAS DE ABAJO MUESTRAN LOS MAPAS ESPECTRALES ASOCIADOS.</i>	21
5.4. <i>SISTEMAS BIDIMENSIONALES (2D).</i>	29
5.5. <i>MOMENTO $m(x, y)$, Y UN CORTE SOBRE EL EJE MAYOR (x).</i>	30
5.6. <i>MOMENTO EN CADA SITIO $m(x, y)$, Y UN CORTE SOBRE EL EJE MAYOR (x).</i>	31
5.7. <i>ELIPSE CON DIMENSIONES $a=35$ y $b=28$. PARA $M=72$.</i>	32

RESUMEN

El presente trabajo estudia a los sistemas denominados corrales cuánticos. Analizamos la formación de la imagen cuántica de impurezas magnéticas en corrales cuánticos. Nuestros resultados indican que las magnetizaciones de la impureza y de la imagen pueden ser alineadas ferromagnéticamente o anti-ferromagnéticamente, dependiendo de la densidad electrónica de la matriz. Dicho estudio se basó en el uso de la aproximación Hartree-Fock. Finalmente, se concluye que en lo que respecta a la formación de una imagen cuántica, los resultados obtenidos no dependen de la existencia o ausencia de la correlación electrónica.

Palabras-claves: Corrales cuánticos, impurezas, Aproximación Hartree-Fock.

ABSTRACT

This paper studies the systems called quantum corrals. We analyze the formation of the image quantum in magnetic impurities in quantum corrals. Our results indicate that the magnetizations of the impurity and image can be ferromagnetically or anti-ferromagnetically aligned, depending on the electronic density of the matrix. This study, based on the use of the Hartree-Fock approach, concluded that with respect to the formation of a quantum image, its results do not depend on the existence or non-existence of the electronic correlation.

Key-words: Quantum corrals, impurities, approximation Hartree-Fock.

INTRODUCCIÓN

La construcción de corrales cuánticos a escala nanométrica continua siendo uno de los temas de investigación más estudiados [1, 2, 3]. Las aproximaciones teóricas de diferentes autores han reproducido exitosamente los nanocorrales de diferentes geometrías[4, 5], por ejemplo, los corrales circulares, triangulares, elípticos, etc.

Los corrales cuánticos están constituidos por átomos colocados sobre la superficie de un metal, formando un arreglo que delimita una porción de esa superficie y confina los estados electrónicos superficiales [6]. Estos sistemas son producidos y estudiados con el auxilio del microscopio de efecto túnel (STM, por sus siglas en inglés)[7, 8]. Los corrales cuánticos y la técnica del STM han permitido la investigación de importantes fenómenos, como el caos cuántico y la formación de imágenes cuánticas en los corrales elípticos [2,3].

En 1990, Don Eigler y E. Schweizer, del centro de investigación de la IBM en Almadem-California, utilizaron la punta de un microscopio de efecto túnel para formar la palabra IBM con átomos individuales sobre una superficie. Pocos años después, dicho grupo de investigación mostró como los electrones pudieron ser atrapados dentro de un círculo de átomos llamado "corral cuántico". En febrero del año 2000, Eigler y los colaboradores Hari Manoharam y Christopher Lutz mostraron que los corrales cuánticos elípticos podrían ser usados para proyectar una imagen de un átomo magnético sobre otro punto, en el interior de un corral cuántico construido sobre una superficie de cobre a baja temperatura.

Nuestro interés en relación a los corrales cuánticos está relacionado al hecho de que en las nanoestructuras, los portadores de carga están sujetos a efectos de confinamiento, parcial o total, en regiones cuyas dimensiones son comparables a su longitud de onda. Las impurezas en los metales, sean magnéticas o no magnéticas han sido objeto de estudio desde los inicios de la teoría cuántica de los sólidos. En el caso de impurezas diluidas, dos trabajos iniciales fueron desarrollados por Anderson [9] y por Wolff [10] y posteriormente mejorados por Clogston [11]. Igualmente importante fue el estudio del efecto Kondo, el cual consiste básicamente en la condensación de los electrones de conducción del material hospedero en torno de la impureza, compensando su momento magnético [12, 13].

Basados en esa idea, analizamos el caso de impurezas magnéticas en los corrales cuánticos. Nuestro estudio se basa en la descripción de la estructura electrónica del sistema, teniendo como lenguaje matemático, la aproximación Hartree-Fock[14].

En esta investigación trataremos algunos aspectos del magnetismo en los metales. Analizamos también el papel de las impurezas magnéticas en una matriz metálica no magnética.

Viendo la importancia del magnetismo en sólidos, abordamos el trabajo empezando con la teoría de magnetismo en sólidos e iniciamos el estudio de los corrales cuánticos sin impurezas y sus aplicaciones.

Abordamos el trabajo empezando con el estudio de las aplicaciones a los corrales cuánticos y el cálculo de impurezas en corrales cuánticos.

CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1. Descripción de la realidad problemática

En los últimos años existe una creciente atención en el estudio de los corrales cuánticos. Los corrales cuánticos están constituidos por átomos colocados sobre la superficie de un metal, formando un arreglo que delimita una porción de esa superficie. Estos sistemas son producidos y estudiados con el auxilio del microscopio de efecto túnel.

Una variedad de procesos de manipulación atómica fue desarrollada con el STM. Podemos dividirlo en dos grupos: procesos paralelos y perpendiculares. En los procesos paralelos un átomo es absorbido e inducido a moverse a lo largo de la superficie. En procesos perpendiculares el átomo es transferido de la superficie a la punta del STM o viceversa. En ambos procesos el objetivo es la manipulación de la materia a escala atómica [15].

La observación del fenómeno conocido como espejismo cuántico ha sido posible gracias a los recientes avances en la fabricación de sistemas nanoscópicos, llamados corrales cuánticos. [4]. Manoharan et al. [5] construyó corrales elípticos con átomos de Co sobre la superficie de Cu con orientación fcc (001).

Asimismo, varios autores han analizado el problema de corrales cuánticos con una o más impurezas considerando diferentes configuraciones [15, 16, 17].

Esto explicaría las razones para analizar y estudiar los nanocorrales en presencia de impurezas magnéticas en materiales no-magnéticos, utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En el presente trabajo se pretende llevar acabo principalmente el cálculo del momento magnético en cada sitio de un corral cuántico. Abordaremos el estudio de los corrales de diferentes formas geométricas, por ejemplo, circular, rectangular y elíptico.

1.2. Formulación del problema

Considerando impurezas magnéticas dentro del corral cuántico, vamos a adoptar un modelo tipo Hubbard, en el cual la interacción entre átomos U es diferente de cero solamente en el sitio de la impureza, el cual tratamos en la aproximación Hartree-Fock.

Entonces se puede plantear la siguiente pregunta. ¿Es posible que la aproximación Hartree-Fock permite entender el momento magnético en los corrales cuánticos?

El alineamiento de dos momentos magnéticos es ferromagnético o antiferromagnético?

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Calcular el momento magnético en cada sitio dentro del corral cuántico.

1.3.2. Objetivo Específicos

- Identificar si el alineamiento de los dos momentos es antiferromagnético o ferromagnético en los corrales cuánticos.

1.4. Limitantes de la investigación

Esta investigación se encuentra inmerso en un nivel de Investigación Científica aplicada, la misma que se desarrolla en la parte teórica y computacional.

La limitante teórica establece que como existe la dificultad de conseguir material bibliográfico que tratan el tema de impurezas magnéticas en los corrales cuánticos abordadas mediante la aproximación Hartree-Fock, la información teórica fue adquirida a través de trabajos de investigación en el extranjero usando las herramientas online.

Con respecto a la limitante temporal, estimamos que el tiempo requerido para poder concluir el presente proyecto de investigación será de aproximadamente doce meses.

La limitante espacial de la investigación se circunscribe en el ámbito de las impurezas magnéticas en los corrales cuánticos. Los corrales cuánticos son simulados considerando un número finito de átomos dentro de un corral apropiado.

CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes

2.1.1. Antecedente Internacional

Gregory A. Fiete, Eric J. Heller., Theory of quantum corrals and quantum mirages. 2003

El propósito de este trabajo es aplicar la teoría de dispersión haciendo uso de la herramienta matemática conocida como la técnica de las funciones de Green, que explica el comportamiento de los electrones dentro del corral de diferentes geometrías. Por último, se explica el espejismo cuántico, que se observa en un corral elíptico, haciendo uso del modelo Anderson y del modelo Kondo.

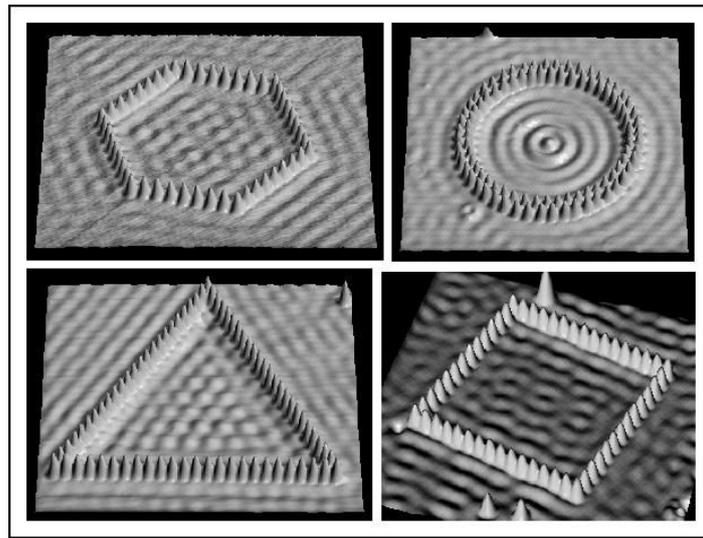
La diferencia del autor con el presente trabajo es que el modelo que vamos a utilizar como lenguaje matemático es la aproximación Hartree-Fock.

M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler y E.J. Heller., Quantum corrals. 1995

El propósito de su estudio fue confinar electrones en la escala del orden de la longitud de onda de Broglie, donde su comportamiento es dominado por los efectos cuánticos. Los electrones que ocupan los estados de superficies en metales nobles forman un gas de electrón libre cuasi bidimensional. El movimiento electrónico paralelo a la superficie puede, por tanto, ser confinado por impurezas convenientemente localizadas sobre la superficie, como los corrales cuánticos. Los efectos de confinamiento pueden entonces ser observados con la técnica STM. La figura (2.1) muestra imágenes de algunos corrales cuánticos producidos por átomos de Fe en la superficie

de Cu a bajas temperaturas.

Figura 2.1: *LOS PATRONES DE INTERFERENCIA CUÁNTICA QUE SE FORMA EN EL INTERIOR DE LOS CORRALES CUÁNTICOS DE DIFERENTES FORMATOS*[18].



Fuente: Crommie M.F., Lutz C.P., Eigler D.M. y Heller E.J., Quantum corrals. 1995.

La diferencia con el presente trabajo, es que podemos tomar un sistema finito constituido por la región interna del corral. Por ejemplo, una elipse es el conjunto de puntos del plano xy , tales que $d(P, F1) + d(P, F2) = 2a$, donde $F1$ y $F2$ son los focos de la elipse, a es el semi-eje mayor y P es cualquier punto del plano.

2.1.2. Antecedente Nacional

Con respecto al estudio del cálculo del momento magnético en la aproximación Hartree-Fock para impurezas magnéticas en los corrales cuánticos, no se ha encontrado trabajos similares en nuestro medio.

2.2. Marco:

2.2.1. Teórico

Las ecuaciones de Hartree-Fock

Debido al éxito de la aplicación de las teorías de Hartree y de Hartree-Fock a los átomos y moléculas, es natural que las consideremos en los problemas en sólidos. Estas aproximaciones nos ofrecerán resultados razonables, ya que son capaces de describir de forma bastante aceptable los constituyentes básicos de los sólidos, los iones. Por consiguiente, como veremos más adelante, las aproximaciones Hartree y Hartree-Fock proporcionan, para el caso de algunos sólidos, resultados claramente no satisfactorios.

Consideramos que un sólido está constituido por iones. La aproximación de Born-Oppenheimer, el Hamiltoniano electrónico para un sistema con N electrones es dado por:

$$H = \sum_{i=1}^N h(\vec{x}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N v(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + V_{ion}. \quad (2.1)$$

donde $\vec{x} = (\vec{r}, \xi)$ es la coordenada de posición y de spin, V_{ion} es el potencial de interacción entre los iones, y

$$h(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 + \sum_n Z_n v(\vec{r}, \vec{R}_n) \quad (2.2)$$

es la parte mono-electrónica, siendo Z_n la carga del n-ésimo ion. Aquí \vec{R}_n representa las posiciones de los iones (suponiendo que los núcleos son fijos), y v es la interacción Coulombiana,

$$v(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.3)$$

El potencial de interacción entre los iones V_{ion} es descrita por el termino de tipo:

$$V_{ion} = \frac{1}{2} \sum_{n,n'} Z_n Z_{n'} v(\vec{R}_n, \vec{R}_{n'}) \quad (2.4)$$

Al considerar los iones fijos llevamos en cuenta solamente la dinámica de los electrones. Aquí las coordenadas \vec{R} son tratados como parámetros.

Dentro de la aproximación de una partícula y según el Principio de Pauli, la función de onda electrónica es escrita en términos de un determinante de Slater.

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det}(\psi_i(\vec{x}_k)) \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.5)$$

Como ya vimos anteriormente, los auto-estados de aquel Hamiltoniano pueden ser escritos en términos del determinante de Slater (2.5). Todavía, la aproximación de Hartree-Fock consiste en escribir el auto-estado $|\psi\rangle$ de H en términos de un único determinante, cuyas funciones monoeléctricas son determinadas por la condición de minimización de la energía del sistema $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ imponiéndose la condición de ortonormalidad

$$\int \psi_i^*(\vec{x}) \psi_j(\vec{x}) dx = \delta_{ij}. \quad (2.6)$$

La ecuación resultante de este procedimiento es llamada de ecuación de Hartree-Fock para ψ_k ,

$$(h + V_{HF})\psi_k = \sum_{l=1}^N \lambda_{kl} \psi_l, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.7)$$

donde

$$V_{HF} = V_H + V_{ex} \quad (2.8)$$

De aquí

$$V_H(x) = \int v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{x}) d^4x', \quad (2.9)$$

es el denominado potencial de Hartree y

$$V_{ex}(\vec{x}, \vec{x}') = -v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{x}, \vec{x}'), \quad (2.10)$$

es un potencial no-local denominado el "potencial de troca", que transcurre de la anti-simetrización de la función de onda. En estas ecuaciones

$$\rho(\vec{x}, \vec{x}') = \sum_{k=1}^N \psi_k(\vec{x}) \psi_k^*(\vec{x}') \quad (2.11)$$

es el operador densidad en la representación \vec{x} y $\rho(\vec{x}) = \rho(\vec{x}, \vec{x})$.

Mediante una transformación unitaria la ecuación (2.7) puede ser escrita en la forma diagonal

$$H_{HF} \psi_k = \varepsilon_k \psi_k \quad (2.12)$$

donde ε_k son las energías del sistema y $H_{HF} = H_H + V_{ex}$.

El término de Hartree-Fock puede ser unido al término de un electrón $h(\vec{x})$, resultando en el Hamiltoniano de Hartree, que suponemos fue descrito por la aproximación de ligaciones fuertes (sección (2.6)). Dirigimos entonces nuestra atención al término de intercambio.

Trabajando en el formalismo de la segunda cuantización (apéndice A) tenemos que:

$$V_{ex} = - \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \alpha''\sigma}} f(E_{\alpha\sigma}) \int d^4x d^4x' \psi_{\alpha'\sigma}^*(\vec{x}) v(\vec{r}, \vec{r}') \psi_{\alpha\sigma}(\vec{x}) \psi_{\alpha\sigma}^*(\vec{x}') \psi_{\alpha''\sigma}(\vec{x}') c_{\alpha'\sigma}^\dagger c_{\alpha''\sigma}. \quad (2.13)$$

donde $c_{\alpha\sigma}^\dagger$ es el operador que crea un electrón en el estado $\psi_{\alpha\sigma}(\vec{x})$. De acuerdo al método de ligaciones fuertes tenemos,

$$\psi_{\alpha\sigma}(\vec{x}) = \sum_j a_{\alpha j}^\sigma \phi_j(\vec{x}), \quad (2.14)$$

Así, substituyendo la ecuación (2.14) en la ecuación (2.13) la expresión para V_{ex} queda como:

$$V_{ex} = - \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \alpha''\sigma}} \sum_{\substack{ii' \\ jj'}} f(E_{\alpha\sigma}) \langle i, i' | v | j, j' \rangle a_{\alpha i}^{\sigma*} a_{\alpha j}^\sigma a_{\alpha i'}^{\sigma*} a_{\alpha j'}^\sigma c_{\alpha'\sigma}^\dagger c_{\alpha''\sigma}. \quad (2.15)$$

donde

$$\langle i, i' | v | j, j' \rangle = \int d^4x d^4x' \phi_i^*(\vec{x}) \phi_{i'}^*(\vec{x}') v \phi_j(\vec{x}) \phi_{j'}(\vec{x}'). \quad (2.16)$$

Teniendo en cuenta la localización de las funciones d , podemos considerar apenas los términos de interacción intra-sitio, y los parametrizamos en la forma:

$$\langle i, i' | v | j, j' \rangle = U_i \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{ij} \quad (2.17)$$

Así, la expresión para V_{ex} resulta:

$$\begin{aligned} V_{ex} &= - \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \alpha''\sigma}} \sum_i U_i f(E_{\alpha\sigma}) a_{\alpha i}^{\sigma*} a_{\alpha i}^\sigma a_{\alpha i}^{\sigma*} a_{\alpha i}^\sigma c_{\alpha'\sigma}^\dagger c_{\alpha''\sigma} \\ &= - \sum_{i,\sigma} U_i \left[\sum_\alpha f(E_{\alpha\sigma}) a_{\alpha i}^\sigma a_{\alpha i}^{\sigma*} \right] \left[\sum_{\alpha'} a_{\alpha' i}^{\sigma*} c_{\alpha'\sigma}^\dagger \right] \left[\sum_{\alpha''} a_{\alpha'' i}^\sigma c_{\alpha''\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

donde $c_{i\sigma}^\dagger = \sum_{\alpha'} a_{\alpha'i}^{\sigma*} c_{\alpha'\sigma}^\dagger$ es el operador que crea un electrón con spin σ en el sitio i , y $n_{i\sigma} = \sum_{\alpha} f(E_{\alpha\sigma}) a_{\alpha i}^{\sigma} a_{\alpha i}^{\sigma*}$, es el número de electrones con spin σ en el sitio i . De esta manera, tenemos la siguiente expresión para V_{ex}

$$V_{ex} = - \sum_{i,\sigma} U_i n_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (2.19)$$

donde $n_{i\sigma} = n_i - n_{i-\sigma}$.

Por lo tanto, la expresión para el término de troca en segunda cuantización es escrita como:

$$\begin{aligned} V_{ex} &= - \sum_i U_i n_i \left[\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right] + \sum_{i,\sigma} U_i n_{i-\sigma} \left[c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right], \\ &= - \sum_i U_i n_i \hat{n}_i + \sum_{i,\sigma} U_i n_{i-\sigma} \hat{n}_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

El primer término corresponde a una constante, que puede ser absorbida por una traslación en el término diagonal del Hamiltoniano de Hartree. Por consiguiente, la expresión para el Hamiltoniano Hartree-Fock asume la forma:

$$H_{HF}^\sigma = \sum_{\sigma} \left[H_H + \sum_i U_i n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right]. \quad (2.21)$$

donde H_H es el Hamiltoniano de Hartree que brinda una estructura de bandas de energía paramagnéticas siendo expresado de la manera siguiente:

$$H_H = \sum_i \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (2.22)$$

Con base en (2.20) y (2.21), podemos afirmar que la solución del problema Hartree-Fock es auto-consistente ya que estas ecuaciones dependen respectivamente de $n_{i\uparrow}$ y $n_{i\downarrow}$.

La teoría de Stoner

La estructura de bandas de un material paramagnético puede ser obtenida a partir del método de ligaciones fuertes, como ya vimos.

En el caso de un sólido cristalino, tenemos que $U_i = U_0$ y $n_{i-\sigma} = n_{-\sigma}$, son

independientes del sitio i . Así, obtenemos:

$$\begin{aligned} H_{HF}^\sigma &= H_H + \sum_i U_0 n_{-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\ &= \sum_i (\varepsilon_0 + U_0 n_{-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Las ecuaciones Hartree-Fock admiten siempre una solución paramagnética, en la cual

$$n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{1}{2}n \quad (2.24)$$

En este caso habrá un desplazamiento de la banda de Hartree igual a $U_0 n/2$.

En algunos casos es posible también encontrar una solución ferromagnética, para la cual $n_\uparrow \neq n_\downarrow$.

En el caso de un sólido cristalino habrá entonces un desplazamiento rígido de las bandas con spin \uparrow y \downarrow , una en relación a otra, igual a $U_0 m$, es decir,

$$E_{n\vec{k}\uparrow} - E_{n\vec{k}\downarrow} = -U_0(n_\uparrow - n_\downarrow) = \frac{U_0 m}{\mu_B} = \Delta \quad (2.25)$$

Esta separación Δ en energía entre las bandas con spin \uparrow y \downarrow de un material ferromagnético es llamada de "división de intercambio"(exchange splitting).

La pregunta que se coloca es en qué condiciones el estado paramagnético corresponde a la de menor energía. En particular estamos interesados en determinar la estabilidad del estado paramagnético con relación al ferromagnético. Esta pregunta es respondida por el criterio de Stoner.

Considerando el término de troca en la expresión del Hamiltoniano, podemos escribir la energía del sistema como:

$$\begin{aligned} E &= E_H + \sum_{i\sigma} U_i n_{i-\sigma} \\ &= E_H + \frac{1}{4} \sum_i U_i [(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})^2 - (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2] \\ &= E_H - \frac{1}{4\mu_B^2} \sum_i U_i n_i^2 m_i^2 + cte. \end{aligned} \quad (2.26)$$

donde $m_i = -\mu_B(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})/n_i$ es la magnetización relativa.

El criterio para el ferromagnetismo a $T = 0K$ es obtenido a partir de la comparación de la energía $E(m)$ de Hartree-Fock, para pequeños valores de m con $E(m = 0)$.

es decir, para $m \simeq 0$, tenemos:

$$E(m) = E(0) + N \int_{E_F}^{\mu^+} \varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon - N \int_{\mu^-}^{E_F} \varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon - \frac{1}{4\mu_B^2} \sum_i U_i n_i^2 m_i^2 \quad (2.27)$$

donde N es el número de átomos del sistema, $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados paramagnética, μ_- es el nivel de Fermi de la banda \downarrow y μ_+ es el nivel de Fermi de la banda \uparrow .

A partir de la ecuación (2.27) obtenemos:

$$E(m) = E(0) + \frac{n m}{2\mu_B^2} \frac{1}{2} \frac{n m}{g(E_F)N} - \frac{1}{4\mu_B^2} \sum_{i,\sigma} U_i n_{i,\sigma}^2 m_i^2 + \mathcal{O}(m^4) \quad (2.28)$$

donde el primer factor del segundo término es el número de spins “volteados” y el segundo es el aumento de la energía promedio debido a cada una de esos spins. En el caso de un sólido cristalino la ecuación (2.28) puede ser escrita como:

$$E(m) = E(0) + \frac{1}{4N\mu_B^2} + \frac{n^2 m^2}{g(E_F)N} [1 - Ug(E_F)] + \mathcal{O}(m^4). \quad (2.29)$$

Observando esta expresión podemos decir que la magnetización disminuirá la energía del sistema cuando,

$$Ug(E_F) > 1. \quad (2.30)$$

La expresión (2.30) es conocida como el *criterio de Stoner* para el ferromagnetismo. Si se cumple este criterio el estado fundamental corresponderá a un estado de máximo alineamiento del spin o a un estado de alineamiento parcial, con m correspondiendo a un valor mínimo de $E(m)$. Los estados ferromagnéticos pueden ser clasificados en fuerte, débil, y muy débil.

Es interesante señalar que a partir de la expansión (2.28) y de la relación termodinámica

$$\frac{\delta^2 E}{\delta m^2} = \frac{1}{\chi} \quad (2.31)$$

la ecuación (2.29) nos ofrece una expresión para la susceptibilidad uniforme:

$$\chi = \frac{\chi_0}{1 - I\chi_0} \quad (2.32)$$

donde $\chi_0 = 2\mu_B^2 g(E_F)$ es la susceptibilidad de Pauli y $I = U/\mu_B$.

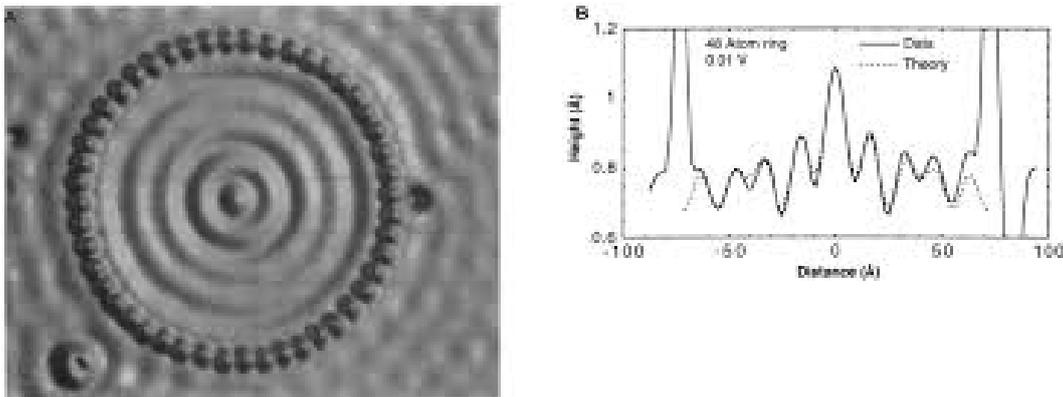
El factor $1/(1 - I\chi_0)$ corresponde al factor de aumento de Stoner. Tenemos, entonces, que el criterio de Stoner para el ferromagnetismo corresponde la condición $\chi < 0$.

Los resultados obtenidos arriba para el estado fundamental de los metales de transición son esencialmente confirmados por cálculos de estructura electrónica efectuados con base en la teoría del funcional de la densidad [19, 20, 21].

2.2.2. Conceptual

Los sistemas bidimensionales son de gran importancia práctica en la física de superficies. Usando las modernas técnicas de crecimiento de cristales, tales como epitaxia por haz molecular (MBE), ahora es posible fabricar nanoestructuras semiconductoras o metálicas en las cuales la composición y las dimensiones son controladas a escala nanométrica [15, 22]. A dicha escala, los efectos cuánticos se tornan muy importantes [15].

Figura 2.2: *IMAGEN ESPACIAL DE LOS AUTOESTADOS DE UN CORRAL CUÁNTICO.*



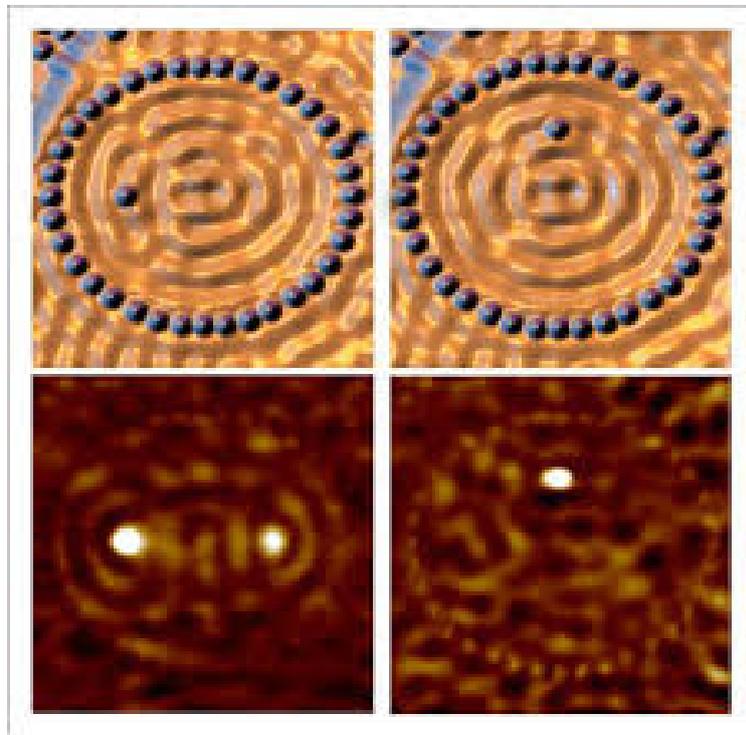
Fuente: M.F. Crommie et.al. Science. Vol. 262. 1993.

Actualmente encontramos en la literatura muchas referencias de los magníficos diseños de los corrales cuánticos. Los corrales cuánticos son estructuras bidimensionales construidas átomo por átomo sobre una superficie aproximadamente plana a

escala atómica usando un microscopio de barrido por efecto túnel (Scanning Tunneling Microscope, (**STM**, por sus siglas en inglés)) [16, 5, 18, 17].

Por otra parte el **STM** puede usarse también para observar los estados de densidad local (**LDOS**, por sus siglas en inglés) dentro del corral cuántico a diferentes energías (Figura 2.2).

Figura 2.3: *LAS DOS PRIMERAS FIGURAS ARRIBA MUESTRAN LAS TOPOGRAFÍAS OBSERVADAS CON EL STM Y LAS DOS FIGURAS DE ABAJO MUESTRAN LOS MAPAS ESPECTRALES ASOCIADOS.*



Fuente: H.C. Manoharan, et.al. Nature 403. 2000.

Una interesante variación de los corrales cuánticos es la imagen cuántica. Manoharan et. al. (2000) construyeron un corral elíptico con átomos magnéticos de Co sobre Cu(111) e introdujeron una impureza (otro átomo de Co) en uno de los focos de la elipse. El resultado observado era que los átomos que formaban el corral hacían de resonador y el Cu, que es el sustrato sobre el que están situados hacía de medio de proyección. Cuando están colocados en la superficie, los átomos de Co

exhiben una firma espectroscópica distintiva, conocida como la resonancia Kondo, que se produce debido al momento magnético de las partículas. Colocando un átomo del Co en un foco de la elipse, detectamos la resonancia Kondo no sólo en el foco donde estaba situado el átomo, sino también en el foco vacío, como se ilustra en la figura (2.3). La relevancia de este experimento es que se obtiene por primera vez el transporte de información a escala atómica.

Motivados por estos resultados experimentales, iniciamos un estudio numérico del proceso de confinamiento de los electrones en los corrales cuánticos. Una aproximación de Hartree-Fock será el punto de partida, para evaluar la magnetización $m(j)$ en cada sitio del corral cuántico.

La ocurrencia de magnetismo en sólidos es un fenómeno bien conocido que, con el desarrollo de la Mecánica Cuántica y la Teoría Electrónica de los Sólidos, comenzó a ser entendido en sus aspectos fundamentales[23, 24]. Las propiedades magnéticas de los materiales están íntimamente relacionadas a la estructura electrónica de los mismos y resultan, en último análisis, de las interacciones de los electrones que los constituyen. Se trata, por lo tanto, de un problema de muchos cuerpos, para lo cual no tenemos soluciones exactas, excepto en algunos casos límites. Sin embargo, muchos aspectos del problema de magnetismo en sólidos pueden ser tratados en base a la aproximación de campo medio, como la aproximación Hartree-Fock[14].

En este proyecto de investigación tratamos de algunos aspectos del magnetismo en los metales. Discutimos la condición para la ocurrencia del estado ferromagnético y la formación de momentos locales. Analizamos también el papel de las impurezas magnéticas en una matriz metálica no-magnética.

2.3. Definición de términos básicos

- **Corrales cuánticos:** son estructuras bidimensionales construidas átomo por átomo sobre una superficie a escala atómica.
- **Impureza magnética:** es una impureza que contiene momento magnético hospedado en un metal. La impureza magnética puede interactuar con la conducción de electrones del metal, produciendo efectos físicos interesantes como

el efecto Kondo y el comportamiento de fermiones pesados.

- **Método de Hartree-Fock (HF):** es una forma aproximada de las ecuaciones de mecánica cuántica para fermiones, utilizada en física y química (donde también es conocido como método de campo auto consistente). Esto se debe a que sus ecuaciones, basadas en orbitales de una partícula, son más accesibles computacionalmente que los métodos basados en funciones de onda de muchas partículas.

CAPÍTULO III: HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1. Hipótesis

HIPÓTESIS GENERAL

- Impurezas magnéticas en los corrales cuánticos mediante la aproximación Hartree-Fock nos permite calcular el momento magnético.

HIPÓTESIS ESPECÍFICAS

- El alineamiento entre las magnetizaciones de la impureza y de su imagen dependen de la densidad electrónica del hospedero.

3.2. Definición conceptual de variables

Variable independiente

- Momento magnético para impurezas en los corrales cuánticos.

Variable dependiente

- Variación de la densidad de estados con spin hacia arriba y spin hacia abajo.

3.3. Operacionalización de variables

A continuación presentamos el cuadro de acuerdo a la variable involucrada en el cálculo del momento magnético en la aproximación hartree-Fock para impurezas magnéticas en los corrales cuánticos.

VARIABLE	DIMENSIÓN	INDICADORES
<p>Independiente</p> <p>Variación de la densidad de estados del sistema con spin.</p>	Sistema finito	<p>Cálculos analíticos y numéricos para determinar densidad de estados.</p> <p>La presencia de impureza magnética en un corral cuántico modifica su densidad de estado.</p>
<p>Dependiente</p> <p>Momento magnético en la aproximación Hartree-Fock para impurezas magnéticas en los corrales cuánticos.</p>	Sistema finito	<p>Cálculos analíticos y numéricos para determinar el momento magnético.</p> <p>Comportamiento oscilatorio del momento magnético para impurezas magnéticas en los corrales cuánticos.</p>

CAPÍTULO IV: DISEÑO METODOLÓGICO

4.1. Tipo y diseño de la investigación

La presente proyecto está enmarcado en el tipo de investigación aplicada, cuantitativa y transversal.

El diseño de la investigación a desarrollar es teórico y consiste en calcular el momento magnético en la aproximación Hartree-Fock para impurezas magnéticas en los corrales cuánticos.

4.2. Método de investigación

Primeramente, consideramos la aproximación Hartree-Fock para cada dirección de spin σ . En segundo lugar, la presencia de impurezas magnéticas en corrales cuánticos corresponde a introducir en cada sitio del corral un potencial atractivo para los electrones con spin hacia arriba y repulsivo con spin hacia abajo. Por último, calculamos la magnetización en cada sitio del corral cuántico.

4.3. Población y muestra

- En este trabajo no incluye conjunto de individuos o elementos sobre los cuales se realizan las observaciones.

- En esta pesquisa no incluye un segmento o subconjunto finito e importante tomado de una población.

4.4. Lugar de estudio y periodo desarrollado

El lugar de estudio se realizó en la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao. Y el periodo del trabajo de investigación fue desde el 01 de mayo del 2019 al 30 de abril de 2020.

4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

Se recaudará información para establecer los fundamentos teóricos de nuestra investigación, como son: la aproximación de Hartree-Fock, densidad de estados dependiente del spin y la magnetización.

4.6. Análisis y procesamiento de datos

La aproximación de Hartree-Fock, permite reducir el problema de N cuerpos a N problemas (acoplados) de un cuerpo. Para ello, realizaremos cálculos del momento magnético, que permitirá encontrar la densidad de estados con spin hacia arriba y spin hacia abajo.

A partir de los resultados obtenidos al calcular el momento en cada sitio de la elipse se han considerado los siguientes pasos:

- Considerar un sistema finito constituido apenas por la región interna al corral. Confinar electrones.
- El hamiltoniano del sistema finito sin impurezas es diagonalizado en el espacio real, dando como resultado los autovalores y autofunciones del sistema.
- Considerar impurezas magnéticas en sistemas finitos.

- El hamiltoniano para cada dirección de spin es diagonalizado numericamente.
- Calcular la variación de la densidad de estado para cada dirección de spin.
- Calcular el momento $m(j)$ en cada sitio de la elipse.

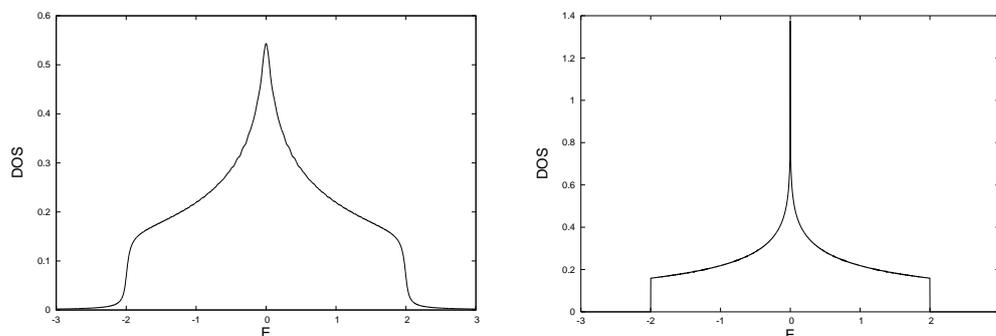
CAPÍTULO V: RESULTADOS

Con el fin de estudiar las propiedades magnéticas debido a la presencia de una impureza magnética en un material no magnético, se realizaron diferentes cálculos computacionales tales como: Dependiendo si el corral es circular, rectangular y elíptico; considerando diferentes dimensiones, mostrándose los resultados más relevantes que expresen nuestros objetivos. Para la obtención del momento magnético, se usó la aproximación Hartree-Fock.

5.1. Resultados descriptivos

En este trabajo se ha investigado el cálculo del momento magnético en la aproximación Hartree-Fock para impurezas magnéticas en los corrales cuánticos. Por cuestiones didácticas se ha considerado una red cúbica simple semi-infinita, con parámetro de red a , y la superficie está en la dirección (001).

Figura 5.4: *SISTEMAS BIDIMENSIONALES (2D)*.

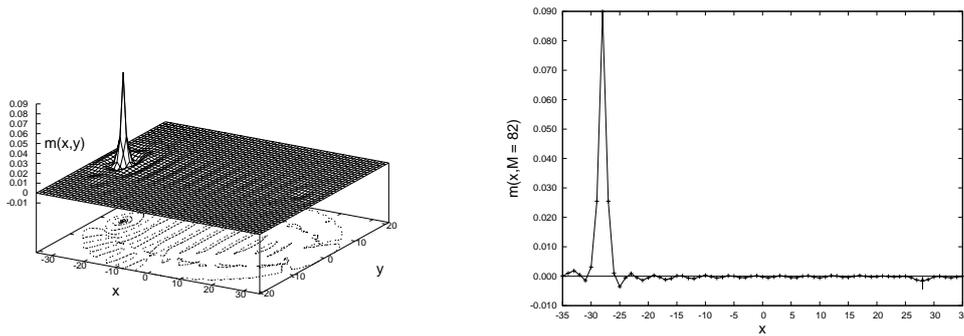


Fuente: elaboración propia.

Consideremos entonces un sistema bidimensional (2D) finito, representado en la figura (5.4). El hamiltoniano que hemos utilizado es para el caso en que el corral se encuentra sin impurezas. La matriz H es diagonalizada en el espacio real, lo que nos permite obtener los autovalores y las autofunciones del sistema 2D. Para calcular la densidad de estados en función de la energía de dicho sistema finito observamos que conforme vamos incrementando el tamaño del mencionado corral, dicha densidad se aproxima al de la densidad de un sistema infinito bidimensional.

El lado izquierdo de la figura (5.4) representa la densidad de estados del corral de dimensión finita, y el lado derecho, representa la densidad de estado de la red infinita bidimensional.

Figura 5.5: *MOMENTO $m(x, y)$, Y UN CORTE SOBRE EL EJE MAYOR (x).*



Fuente: elaboración propia.

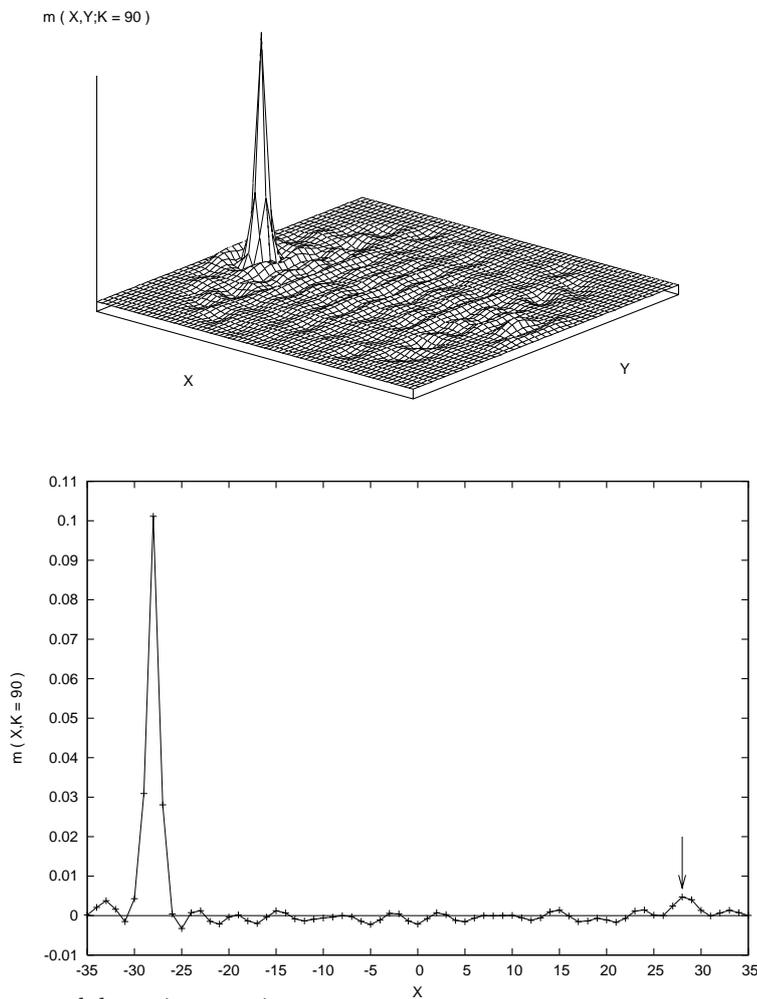
En la figura (5.5) se muestra el resultado del momento para una elipse de excentricidad 0.8.

Observamos de dicha figura, un punto importante a ser destacado es que para $m(x, M = 82)$ los efectos de interferencias cuánticas debido al confinamiento de los estados electrónicos en sistemas nanoestructurados.

En esta investigación analizamos el papel de las impurezas magnéticas en una matriz metálica no magnética en base a la aproximación de campo medio, como la aproximación Hartree-Fock (H-F). El hamiltoniano H-F puede ser diagonalizado numericamente, lo que nos permite calcular las grandezas de interés, como por ejemplo, el momento $m(x, y)$ en cada sitio de la elipse.

Se puede observar que al comparar la figura (5.5) con la figura (5.6) notamos que la distribución magnética espacial depende de M . Los valores que se ha tomado para ambas figuras es $V_{ex} = 0.5$.

Figura 5.6: *MOMENTO EN CADA SITIO $m(x, y)$, Y UN CORTE SOBRE EL EJE MAYOR (x) .*

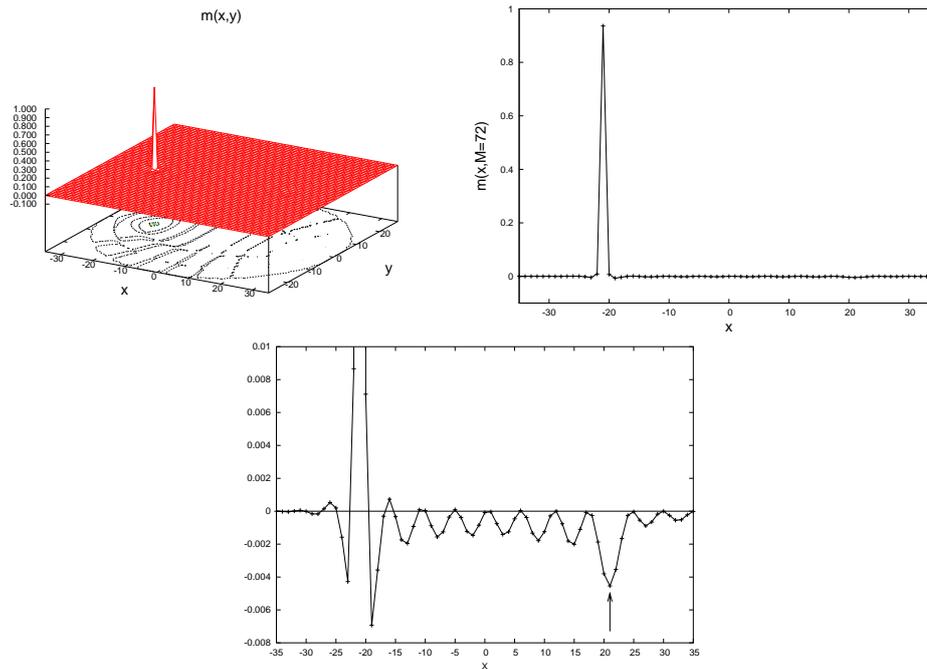


Fuente: elaboración propia.

En la figura (5.6) muestra los cálculos para el valor de $M = K = 90$. Los valores que se ha tomado para $V_{ex} = 0.5$.

En la figura (5.7) se muestra el resultado del momento en cada sitio $m(x, y)$ versus posición (x, y) , y un corte sobre el eje mayor del corral elíptico de excentricidad 0.6.

Figura 5.7: *ELIPSE CON DIMENSIONES $a=35$ y $b=28$. PARA $M=72$.*



Fuente: elaboración propia.

Podemos observar de la primera figura del lado izquierdo el momento en tres dimensiones, se observa en la base, la proyección del corral elíptico en dos dimensiones; efectos de interferencias constructivas y destructivas cuanticamente son evidentes. De la segunda figura del lado derecho, se observa que al colocar la impureza en el foco izquierdo del corral, observamos en el otro foco la presencia de otra impureza llamada imagen cuántica de configuración opuesta y de menor amplitud. La figura central es una ampliación de la segunda figura. Se observa la presencia de una imagen en el segundo foco.

5.2. Resultados inferenciales

Por ser la pesquisa de carácter teórico, no se aplicarán técnicas estadísticas a los datos, por lo que no se realizará el análisis estadístico de los datos.

5.3. Otro tipo de resultados de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis

Un resultado importante del estudio de impurezas en un corral cuántico, es que dicho sistema responde de forma diferente cuando una impureza es colocada en posiciones distintos dentro del nanocorral. Este hecho nos llevó a investigar el momento magnético en la aproximación Hartree-Fock para impurezas magnéticas. A continuación mostramos resultados en las siguientes tablas: Por ejemplo, en las tabla 5.1 y tabla 5.2 se muestran los parámetros de las elipses de excentricidades diferentes, donde $\overline{F_1F_2}$ representa la distancia entre los focos de la elipse.

Estudios referentes a impurezas no-magnéticas en corrales cuánticos han sido discutidos[25].

Tabla 5.1: *LOS PARÁMETROS DE LA ELIPSE DE EXCENTRICIDAD $e = 0.6$, DONDE a ES EL SEMI-EJE MAYOR, b ES EL SEMI-EJE MENOR.*

a	b	FOCOS	$\overline{F_1F_2}$
30	24	$(\pm 18, 0)$	36
35	28	$(\pm 21, 0)$	42
40	32	$(\pm 24, 0)$	48
45	36	$(\pm 27, 0)$	54
50	40	$(\pm 30, 0)$	60

Fuente: elaboración propia.

Utilizando los valores de la tabla 5.2, se ha analizado también para dicha elipse de excentricidad 0.8. En ambas tablas, la elipse tiene dos puntos focales con coordenadas $(\pm c, 0)$, donde $c = \sqrt{a^2 - b^2}$, y su excentricidad es definida por $e = c/a$.

Tabla 5.2: *LOS PARÁMETROS DE LA ELIPSE DE EXCENTRICIDAD $e = 0.8$, DONDE a ES EL SEMI-EJE MAYOR, b ES EL SEMI-EJE MENOR.*

a	b	FOCOS	$\overline{F_1F_2}$
30	18	$(\pm 24, 0)$	48
35	21	$(\pm 28, 0)$	56
40	24	$(\pm 32, 0)$	64
45	27	$(\pm 36, 0)$	72
50	30	$(\pm 40, 0)$	80

Fuente: elaboración propia.

Por último, la tabla 1 ha sido utilizada para obtener los resultados de las figuras (4) y (5), y la tabla 2 se ha considerado para obtener el resultado de la figura (7).

CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1. Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

Para el caso de impurezas magnéticas, cálculos han sido llevados dentro de la aproximación Hartree-Fock, discutida en el marco teórico. Conservamos justamente la interacción electrón-electrón intra-atómica efectiva U . En este caso, el hamiltoniano para los electrones con spin σ es:

$$H^\sigma = \sum_i (\varepsilon_i - \sigma V_{ex}) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (6.33)$$

donde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) son los operadores de creación (destrucción) de un electrón con spin σ en el sitio i , ε_i son las energías sobre cada sitio, t_{ij} es la energía de transferencia, y $V_{ex} = Um/2$.

Consideraremos que el potencial V_σ es atractiva ($V_\uparrow = -V_0$) para portadores de spin up y repulsiva ($V_\downarrow = V_0$) para portadores de spin down.

Mas interesante, son las curvas de variación en la densidad espacial de carga de spin σ en el estado k , para diferentes potenciales, definida como:

$$\begin{aligned} \delta\rho_k^\sigma(j) &= \rho_k^\sigma(j) - \rho_k^0(j) \\ &= |\langle j | \psi_k^\sigma \rangle|^2 - |\langle j | \psi_k^0 \rangle|^2 \end{aligned} \quad (6.34)$$

Definimos el momento para cada estado k como:

$$\begin{aligned} m_k(j) &= \delta\rho_k^\uparrow(j) - \delta\rho_k^\downarrow(j) \\ &= \rho_k^\uparrow(j) - \rho_k^\downarrow(j). \end{aligned} \tag{6.35}$$

Primeramente, dependiendo del valor de K , la posición de la imagen no coincide exactamente con la posición del segundo foco. En segundo lugar, la magnitud del efecto claramente depende del valor de K , es decir, de la concentración electrónica n . Este fenómeno puede estar relacionado, con el hecho de que, dependiendo del valor del vector de onda del estado ocupado de mas alta energía (llamaremos el *vector de onda de Fermi* k_F), la densidad electrónica en el sitio de la impureza podrá pasar por un máximo o por un mínimo. Esto afecta seguramente el proceso de blindage del potencial perturbador y, posiblemente, la formación de la imagen cuántica. Otro factor que podría ser importante en el proceso de formación de la imagen es la existencia de una red cristalina subyacente. A medida que consideramos valores de K mas próximos a lo correspondiente a la media ocupación de la banda, los efectos debidos a la interacción del electrón con la red se torna mas importante. Por lo tanto, es posible que la interacción de los electrones con la red desempeñe tambien un papel muy importante en la formación de la imagen cuántica.

6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares

Actualmente existen millares de trabajos relacionados con los corrales cuánticos de diferentes geometrías, usando diferentes métodos o técnicas matemáticas que permitan entender la física del problema. Todos estos trabajos, estudian los efectos de interferencias cuánticas confinadas dentro del corral, como ha sido verificado en trabajos anteriores por el autor.

En nuestro caso, hemos considerado corrales de dimensión finita y hemos necesitado utilizar la aproximación Hartree-Fock, para calular el momento magnético para observar el fenómeno ferromagnético y anti-ferromagnético, tal como lo demuestran nuestros resultados.

6.3. Responsabilidad ética

La responsabilidad ética no es posible, por tratarse de un resultado analítico en un contexto matemático.

CONCLUSIONES

- Presentamos el problema de los corrales cuánticos de diferentes geometrías para tratar el problema del momento magnético en la aproximación Hartree-Fock. Calculamos la densidad de estados total de dicho sistema como se muestra en la (figura(5.4)), observándose similitud con la densidad de estados total de un sistema infinito bidimensional conforme se incrementan más sitios dentro del corral (figura(5.4)).
- En las figuras (5.5,5.6 y 5.7) presentamos nuestros resultados para dos corrales elípticos con dos excentricidades diferentes. Se observó que cuando una impureza está localizada en el foco de la elipse F_1 , surge en el segundo foco un momento magnético relativamente pequeño, cuya intensidad depende de M .
- Resultados para el caso de impurezas magnéticas en los corrales elípticos, obtuvimos que la formación de la imagen cuántica y su naturaleza, es decir su momento magnético se alinea paralelamente o anti-paralelamente a la de la impureza, depende de la posición de la impureza y de la densidad electrónica de la matriz.

RECOMENDACIONES

- Como trabajo futuro pretendemos realizar cálculos en modelos más realistas, de modo que nos permitan realizar predicciones cuantitativas para dichos corrales cuánticos.
- Investigar los efectos cuánticos en otras nanoestructuras además de la consideradas en este trabajo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Agcall, R.Y., Atik, B., et.al. **Leading to a Better Understanding of the Particle-in-a-Quantum-Corral Model.** *Journal of Chemical Education* Vol.96, pág. 82. 2019.
2. Li Q.L., Wang R., et.al. **Green's function approach to the Kondo effect in nanosized quantum corrals.** *Physical Review B* Vol.97, pág. 155401-1. 2018.
3. Ngo A.T., Kim E.H. y Ulloa S.E. **Single-atom gating and magnetic interacciones in quantum corrals.** *Physical Review B* Vol.95, pág. 161407. 2017.
4. Nizama M., Hallberg K., y d'Albuquerque e Castro J. **Static and dynamical properties of elliptical quantum corrals.** *Physical Review B* Vol.75, pág. 235445-1. 2007.
5. Manoharan, C.P. Lutz e D.M. Eigler. **Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure,** *Nature* **403**, pag. 512. 2000.
6. Eigler D.M. e Schweizer E.K. **Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope** *Nature*, **344**, pag. 524. 1990.
7. Hansma Paul K. y Tersoff Jerry. **Scanning tunneling microscopy,** *J. Appl. Phys.* **61**, No. 2. pag. R1; 1987.
8. Flemming Besenbacher. **Scanning tunnelling microscopy studies of metal surfaces,** *Rep. Prog. Phys.* **59**, pag. 1737; 1996.
9. Anderson P.W., 1961 *Phys. Rev.* **124**, pág. 41.
10. Wolff P.A., 1961 *Phys. Rev.* **124**, pág. 1030.
11. Clogston A.M., 1962 *Phys. Rev.*, **125**, pág. 439.
12. Kondo J., 1964 *Prog. Theor. Phys.* **32**, pág. 37.

13. Heeger A. J., **Localized moments and nonmoments in metals: The Kondo effects, in Solid State Physics**, editada por H. Ehrenreich and D. Trunbull (Academic Press, 1969) **Vol. 23**, pág. 283.
14. Madelung O., **Introduction to Solid-State Theory**. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1978.
15. Wolf E.L., **Nanophysics and Nanotechnology** Second, Update and Enlarged Edition, WILEY-VCH. 2006.
16. Crommie M.F., Lutz C.P., e Eigler D.M. **Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface**, *Science* Vol. **262**, pag. 218. 1993.
17. Hallberg K., Nizama M. y D'Albuquerque e Castro J. **Impurities in elliptical quantum corrals**. *Microelectronics Journal* Vol.39, pág. 1289. 2008.
18. Crommie M.F., Lutz C.P., e Eigler D.M. **Imaging standing waves in a two-dimensional electron gas**, *Nature* Vol. **363**, pag. 524. 1993.
19. Fritsche L., Noffke J., y Eckardt H., 1987 *J. Phys. F* **17**, pág. 943.
20. Marder Michael P. **Condensed Matter Physics**. John Wiley and Sons, Inc., 2000.
21. Gautier F., **Magnetism of Metals and Alloys**, ed. M. Cyrot, North-Holland, 1982.
22. Datta, S. **Electronic Transport in Mesoscopic Systems**. Cambridge University Press, New York, 1997.
23. Ziman J.M. **Principles of the Theory of Solids**. 2.ed. University Press, Cambridge, 1972.
24. Harrison W. A. **Solid State Theory**. Dover Publications, Inc. New York, 1979.
25. Toribio Saavedra R. **Interferencias Cuánticas en Corrales Cuánticos**. *Tesis de Licenciatura en Física* 2010.

ANEXOS

A - Matriz de consistencia

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPOTESIS	VARIABLES
<p>Problema general: ¿Es posible calcular la variación de la energía electrónica total en sistemas metálicos en presencia de impurezas substitutionales?</p> <p>Problemas específicos: Variación de la densidad de estados debido a la presencia de impurezas en el volumen del material, se observa la existencia de una resonancia en la densidad de estados local?.</p> <p>¿Es oscilatorio el comportamiento en la variación de la energía electrónica debido a la presencia de dos impurezas substitutionales en el plano infinito?</p>	<p>Objetivo general: Calcular la variación de la energía electrónica total en sistemas metálicos en presencia de impurezas substitutionales.</p> <p>Objetivo específicos: Verificar que en la variación de la densidad de estados debido a la presencia de impurezas en el sistema metálico del material, se observa la existencia de una resonancia en la densidad de estados local.</p> <p>Verificar el comportamiento oscilatorio en la variación de la energía electrónica debido a la presencia de dos impurezas substitutionales en el plano infinito.</p>	<p>Hipótesis general: La variación de la energía electrónica total en sistemas metálicos en presencia de impurezas substitutionales depende de la variación de la densidad de estados del sistema.</p> <p>Hipótesis específicas: La variación de la densidad de estados en presencia de impurezas en el sistema metálico del material, se observa la existencia de una resonancia en la densidad de estados local, que varía de acuerdo al potencial atómico.</p> <p>El comportamiento oscilatorio en la variación de la energía electrónica debido a la presencia de dos impurezas substitutionales en el plano infinito varía con la distancia entre las impurezas.</p>	<p>Variable independiente: Variación de la energía electrónica total del sistema.</p> <p>Variable dependiente: Densidad de estados del sistema.</p> <p>Variable dependiente: Variación de la energía electrónica total del sistema.</p>