

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO



PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

“Efecto Kondo y Acoplamiento Rashba en puntos cuánticos.”

Presenta:

Dr. Francisco Mireles Higuera

Departamento de Física Teórica

CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA, UNAM.

Ensenada B.C. a 2 de Febrero de 2016.

I. Resumen.

El presente proyecto se enfoca al estudio numérico de un sistema nanoscópico compuesto por dos puntos cuánticos en configuración tipo “punto colgante”, en presencia de acoplamiento espín-órbita de Rashba. Para ello se empleará el Hamiltoniano de Anderson, y se considerará que ambos puntos cuánticos se encuentra dentro del régimen de bloque de Coulomb, de forma tal que pueden ser considerados como impurezas de Kondo. El acoplamiento Rashba será incluido a través de una constante de tunelaje, entre los dos puntos cuánticos, dependiente del espín. Empleando la técnica de Renormalización Numérica de Grupo (NRG, por sus siglas en inglés), se realizarán cálculos del transporte a través de la nanoestructura, así como de la termodinámica asociada, variando los diferentes parámetros del sistema, principalmente la intensidad del acoplamiento espín-órbita.

II. Antecedentes.

El efecto Kondo es uno de los paradigmas más importantes en teoría cuántica de muchos cuerpos. Éste hace referencia a la formación de un estado singlete colectivo entre una impureza magnética y un continuo de estados electrónicos [1]. Con el advenimiento de los puntos cuánticos, sistemas artificiales altamente sintonizables cuyas propiedades emulan las de un átomo, el estudio del efecto Kondo a resurgido con una mayor fuerza [2]. Esto ha sido propiciado por la gran cantidad de configuraciones a las que se puede acceder en este tipo de nanoestructuras. Por ejemplo mediante experimentos en dobles puntos cuánticos se ha logrado analizar la competencia entre las correlaciones de Kondo, las interacciones de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida [3] y la formación de un singlete local [4, 5].

Cuando dos puntos cuánticos se encuentran en configuración tipo “punto colgante”, uno de ellos está conectado a terminales metálicas, mientras que el segundo solo se conecta al primer punto cuántico. Este tipo de arreglos en particular presenta una supresión del efecto Kondo, debido a una competencia con el efecto Fano [6, 7]. Dentro de otro régimen de parámetros, el mismo sistema puede presentar un efecto Kondo de dos etapas, en el que uno de los puntos cuánticos es apantallado por el baño electrónico a una temperatura menor que el segundo [7, 8], con importantes repercusiones en las propiedades de transporte del sistema [9].

Por otra parte, la asimetría de inversión estructural que presentan las heteroestructuras semiconductoras, da lugar a un fenómeno conocido como acoplamiento espín-órbita de Rashba.

Después de 30 años de haber sido introducido, este efecto ha inspirado una gran cantidad de predicciones, descubrimientos y conceptos innovadores [10], entre los que podemos destacar el efecto Hall de espín, estados topológicos y fermiones de Majorana, torcas de espín en ferromagnetos, transistores de efecto de campo de espín, etc.

La interacción entre el efecto Kondo y el acoplamiento Rashba ha sido ampliamente estudiado en sistemas donde éste último se encuentra presente solo en el baño electrónico al cual se acopla la impureza magnética [11]. Dichos estudios han concluido que el efecto Kondo permanece esencialmente sin alteraciones [11-13], aunque la temperatura de Kondo puede ser exponencialmente afectada como función del nivel de Fermi [13]. Por su parte, sistemas donde el acoplamiento Rashba está contenido dentro de la impureza magnética (e.g. puntos cuánticos), no ha sido abordado hasta el momento.

III. Objetivo del presente plan de trabajo.

Como objetivo del presente proyecto se plantea estudiar un sistema de dos puntos cuánticos acoplados en una configuración tipo “punto colgante”, con presencia de interacción espín-órbita de Rashba. Ésta última será modelado a través de un tunelaje dependiente del espín entre puntos cuánticos [14, 15]. Se contemplará la posible competencia que exista entre la formación de un estado singulete local, el efecto Fano y las correlaciones de Kondo de los puntos cuánticos con el baño electrónico, como función del parámetro de Rashba (constante de tunelaje). También se investigará el efecto Kondo de dos fases y cómo éste se ve influenciado por acoplamiento espín-órbita. Además de cálculos termodinámicos, se realizarán estimaciones numéricas de la conductancia de espín. Otras propiedades a calcular son el entrelazamiento entre las dos impurezas, el número de ocupación y la función espectral total. El sistema puede ser enriquecido mediante la incorporación de campos magnéticos, terminales ferromagnéticas, entre otros.

IV. Justificación de los recursos de súper cómputo: la técnica de NRG.

El método por excelencia para el estudio de impurezas de Kondo es la técnica de Renormalización Numérica de Grupo (NRG). Dicha metodología fue utilizada por K.G. Wilson [16] para resolver el problema de Kondo en los años setenta, y por lo cual fue galardonado con el premio Nobel. Ésta consiste en transformar el Hamiltoniano a estudiar, a partir de la discretización logarítmica del continuo de estados al cual se acopla la impureza de Kondo. Posteriormente, el Hamiltoniano es

mapeado a una cadena semi-infinita y resuelto numéricamente de forma iterativa, agregando en cada secuencia más grados de libertad. Dado que el espacio de Hilbert crece de forma exponencial, resulta imprescindible desechar una cierta cantidad de estados, conservando solo aquellos de menor energía. Debido a la discretización logarítmica, el valor del parámetro de acoplamiento entre los eslabones de la cadena decae exponencialmente, lo cual equivale a acceder estados de menor energía del sistema [17].

La metodología de NRG ofrece una gran versatilidad en el estudio de sistemas altamente correlacionados, pues no solo permite el cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte, sino que además es posible calcular cantidades dinámicas como la función espectral. Resulta importante enfatizar que, para la correcta aplicación del método de NRG, es indispensable contar con la infraestructura de cómputo adecuada, ya que la diagonalización de matrices Hamiltonianas y el cálculo de elementos de matriz para la obtención de funciones espectrales, es simplemente inviable en computadoras de escritorio. En este sentido, los recursos de super cómputo solicitados en el presente documento son un componente indispensable para la culminación exitosa del plan de trabajo.

V. Recursos solicitados.

La siguiente tabla resume los recursos de súper cómputo solicitados para el desarrollo del presente proyecto:

Tipo de proyecto	Semilla
Horas CPU	35, 000
Disco Duro	75 GB
Memoria RAM	20 GB
Aplicaciones a utilizar	Compiladores y lenguajes de programación
Modelo Computacional	Renormalización Numérica de Grupo
Programación paralela	No
Número estimado de procesadores por trabajo	1
Duración promedio estimada por trabajo	24–72 horas

Durante el primer trimestre, los recursos de súper cómputo serán utilizados esencialmente para el desarrollo del código computacional que implemente el método NRG, adaptado al problema a estudiar. Se verificará la correcta estimación numérica de las propiedades termodinámicas y de transporte de la nanoestructura modelada, haciendo comparaciones con casos conocidos. Durante el

segundo trimestre se realizarán los cálculos de la Termodinámica del sistema. En particular se obtendrá la susceptibilidad, la temperatura de Kondo y la entropía de las impurezas de Kondo, variando la intensidad del acoplamiento Rashba. En el tercer trimestre, el estudio se enfocará a las propiedades de transporte. A diferencia de los cálculos de Termodinámica, los cálculos de conductancia y función espectral son más demandantes. Esto es debido a que en los primeros, las cantidades termodinámicas como función de la temperatura pueden ser obtenidas con una sola corrida, mientras que un solo punto en la curvas de conductancia requiere de toda una corrida. Finalmente durante el último trimestre se realizarán de nuevo algunos cálculos seleccionados, con el objetivo de confirmar los resultados obtenidos. Todo esto se resume en la siguiente tabla:

Cronograma para el uso de la computadora Miztli.	
Marzo-Abril	Desarrollo y sintonización del código computacional (4,000 horas CPU).
Mayo-Julio	Cálculos de propiedades termodinámicas. (10,000 horas CPU).
Agosto-October	Cálculo de propiedades de transporte. (16,000 horas CPU).
Noviembre-Enero	Verificación de resultados seleccionados. (5,000 horas CPU).

V. Resultados e impacto esperado.

Como resultado del presente proyecto, se espera lograr los siguientes resultados:

a) Publicación de al menos un artículo en una revista con arbitraje internacional que posea un parámetro de impacto por encima de 3.0. Esto dará continuidad a la labor de difusión del Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM, como un espacio en el que se realiza investigación científica con alta calidad.

b) Participación en al menos un Congreso donde se presenten los resultados del trabajo de investigación.

c) Programación de códigos computacionales robustos que permitan el estudio de sistemas altamente correlacionados, como el aquí descrito. Tal herramienta será continuamente optimizada, y estará a disposición de quien desee utilizarla en trabajos de investigación científica.

VI. Referencias.

- [1] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [2] L. Kouwenhoven and L. Glazman, *Physics World* January, pp 33-38 (2001).
- [3] A. Wong et al., *Phys. Rev. B* **85**, 115316 (2012).
- [4] N. J. Craig, et al., *Science* **304**, 565 (2004).
- [5] J. C. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 176801 (2004).
- [6] S. Sasaki et al., *Phys Rev. Lett.* **103**, 266806.
- [7] R. Zitko, *Phys. Rev. B* **81**, 115316 (2010)
- [8] C.-H. Chung et al. *Phys. Rev. B* **77**, 035120 (2008)
- [9] P. S. Cornaglia and D. R. Grempel, *Phys. Rev. B* **71**, 075305 (2005).
- [10] A Manchon, *et al.* *Nature Materials* **14**, 871 (2015).
- [11] J. Malecki, *J. Stat. Phys.* **129**, 741 (2007).
- [12] R. Zitko and J. Bonca, *Phys. Rev. B* **84**, 193411 (2011).
- [13] A. Wong, et al., arXiv:1509.08433v2.
- [14] F. Mireles and G. Kirczenow, *Phys Rev. B* **64**, 024426 (2001).
- [15] Q.- F. Sun, et al., *Phys Rev. B* **71**, 165310 (2005).
- [16] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* 47, 773 (1975).
- [17] R. Bulla et al., *Rev. Mod. Phys.* 80, 395 (2008).