

Trabajo de Fin de Máster  
Física en Sistemas Complejos

# **Correlación a larga distancia entre fermiones en estructuras planas hexagonales**

Universidad Nacional de Educación a Distancia



2021/2022

Alumno: Juan Manuel Pavón Rodríguez

## Índice

<b>1. Introducción</b> .....	4
<b>2. Modelo</b> .....	6
2.1 Segunda cuantización.....	7
2.1.1 Operadores creación y destrucción .....	7
2.1.2 Cambio de base .....	8
2.2 Modelo “Tight Binding” .....	8
2.2.1 Aproximación SDRG .....	10
2.3 Simetría quiral .....	10
2.4 Entropía y entrelazamiento.....	11
2.5 Estado del arte de la experimentación con sistemas de muchas partículas.....	13
<b>3. Presentación de resultados</b> .....	14
3.1 Análisis del problema .....	14
3.2 Resultados numéricos .....	16
3.2.1 Características de una malla hexagonal con todos los enlaces $t$ homogéneos .....	16
3.2.1.1 Simetría quiral en el sistema .....	17
3.2.1.2 Propiedades de la malla en función de los parámetros .....	20
3.2.2 Características de una malla hexagonal con enlaces $t$ no homogéneos .....	25
3.2.2.1 Sistema con cadenas aisladas dentro de la malla hexagonal.....	26
3.2.2.1.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna) .....	29
3.2.2.2 Análisis del diseño 1 .....	34
3.2.2.2.1 Análisis del subdiseño 1-A.....	35
3.2.2.2.2 Análisis del subdiseño 1-B.....	39
3.2.2.3 Análisis del diseño 2 .....	43
3.2.2.3.1 Análisis del subdiseño 2-A.....	45
3.2.2.3.2 Análisis del subdiseño 2-B .....	48
3.2.2.4 Análisis del diseño 3 .....	51
3.2.2.4.1 Análisis del subdiseño 3-A.....	54
3.2.2.4.2 Análisis del subdiseño 3-B.....	57
3.2.2.5 Comparación entre diseños .....	60
3.2.3 Características de una malla hexagonal quiral con nodos centrados en las caras ....	67
3.2.3.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna) .....	69
<b>4. Conclusiones</b> .....	73
<b>Anexo I - Correlación de extremo a extremo de una cadena unidimensional</b> .....	75
Referencias.....	78



## 1. Introducción

La mecánica cuántica se ha convertido en una rama de la física que crea gran interés y fascinación. Además, sus futuras y prometedoras aplicaciones en la tecnología, como por ejemplo en computación o información cuántica, ha originado una carrera en su investigación que promete revolucionar casi todo lo que se conoce.

En particular, la física cuántica de muchos cuerpos es una rama de esta área de estudio que intenta predecir diferentes propiedades de objetos a partir de las partículas de las que está formado, utilizando los principios de la mecánica cuántica. Por ejemplo, la física de materiales, la química cuántica o la física de la materia condensada nacen del estudio de los cuerpos desde este punto de vista.

Existen diferentes maneras de abordar el problema de muchos cuerpos. En primer lugar, la mecánica cuántica trata de construir una función de onda de  $N$  partículas, a partir de los estados conocidos para un sistema de una partícula. La función de onda puede ser simétrica o antisimétrica dependiendo de si se está trabajando con bosones o fermiones. Como es lógico, los resultados que se obtienen son aproximados debido a las simplificaciones que se realizan para tratar con el problema. Adicionalmente, se podrían incluir términos perturbativos para tener en cuenta las interacciones entre dichas partículas.

Por otra parte, la mecánica cuántica estadística hace uso de la distribución de Fermi-Dirac para fermiones, o la distribución de Bose-Einstein en el caso de los bosones, para obtener las diferentes magnitudes macroscópicas. Es una herramienta útil para sistemas formados por una gran cantidad de partículas, ya que se hace uso de la probabilidad clásica anulando gran parte de los detalles de dicho sistema. El lado negativo es que este formalismo sólo permite obtener ciertas propiedades del sistema.

Finalmente, se puede hacer uso de la teoría cuántica de campos, en donde se utilizan una serie de operadores que representan campos para modelizar los diferentes tipos de partículas renunciando de esta forma a la idea de partícula. Este formalismo es el más complejo de los que se han definido.

Es de destacar que en estos sistemas se producen una serie de efectos entre las partículas, como por ejemplo, entrelazamiento cuántico o correlaciones, dos fenómenos muy importantes que constituyen la base de esta ciencia y que pueden dar lugar a sistemas con distintas propiedades. Pero ¿es posible diseñar sistemas de muchas partículas que cumplan determinadas propiedades?

La ingeniería cuántica ha surgido dando respuesta a esta pregunta y como consecuencia de los diferentes avances que han permitido controlar las propiedades de dichos sistemas, como por ejemplo, la correlación entre dos partículas.

En concreto, en este trabajo se va a realizar un estudio a nivel computacional (usando Matlab como herramienta de cálculo) de un sistema de fermiones en donde se han establecido distintos acoplamientos entre ellos, dando lugar a una estructura hexagonal similar a la estructura del grafeno.

En la sección 2 del trabajo se incluye la base teórica del problema introduciendo conceptos como la segunda cuantización, el modelo de "Tight Binding", simetrías y los conceptos de entropía y entrelazamiento.

En la sección 3 se presenta el problema a analizar, en particular, una malla hexagonal con la misma estructura que la del grafeno. En los diferentes subapartados se han estudiado las correlaciones que existen entre dos elementos aislados de la malla, y se han introducido algunas modificaciones entre los enlaces de dicho sistema para ver como varían dichas correlaciones. También se ha aislado una cadena dentro de la malla para luego comparar sus propiedades con una cadena unidimensional. Adicionalmente, se ha hecho un análisis de una malla hexagonal con nodos en el centro de los hexágonos, y se ha visto cómo varían las características con respecto al sistema original.

Las conclusiones a los resultados obtenidos se presentan en la sección 4 del trabajo.

## 2. Modelo

En este trabajo se va a estudiar un sistema compuesto por un conjunto de partículas que interactúan entre sí, dando lugar a una determinada topología. Se sabe que si una partícula se define en un espacio de Hilbert  $H_1$  con una base  $|\alpha\rangle$ , luego para un conjunto de  $N$  partículas el espacio de Hilbert se define como [1]:

$$H_N = \bigotimes_{i=1}^N H_i \quad (1)$$

Con una base:

$$|\alpha, \beta, \dots, \omega\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes \dots \otimes |\omega\rangle \quad (2)$$

Por lo tanto, se tiene que resolver la ecuación de Schrödinger para una función de onda que depende de  $N$  variables relacionadas con las  $N$  partículas. Este problema se podría solucionar con ayuda computacional, pero por diferentes razones el planteamiento no es el más adecuado para tratar con problemas donde el número de partículas es muy grande.

La primera dificultad es que no todos los estados de la función de onda son válidos. Sólo los estados simétricos (para los bosones) y los antisimétricos (para los fermiones) estarán permitidos. Esto introduce un grado de dificultad adicional, ya que la función de onda deberá ser simetrizada o antisimetrizada y, además, deberá estar normalizada.

Para un sistema reducido de partículas este ejercicio se puede realizar fácilmente, pero al crecer el sistema, el número de términos de la función de onda crece como  $N!$ , donde  $N$  es el número de partículas. La función de onda quedaría de la siguiente manera:

$$\psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = C \sum_P (\pm 1)^{s(P)} \psi_1(r_{P(1)}) \psi_2(r_{P(2)}) \dots \psi_N(r_{P(N)}) \quad (3)$$

Donde  $P$  identifica las permutaciones del conjunto de números entre 1 y  $N$ ,  $s(P)$  es el signo de la permutación (+ para bosones y – para fermiones) y  $C$  es la constante de normalización.

La ecuación (3) se puede describir como un determinante para los fermiones, lo que se conoce como determinante de Slater:

$$\psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_1(r_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(r_1) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (4)$$

La segunda dificultad que se encuentra en sistemas de partículas grandes está relacionada con la manera en la que se representan los operadores. Por ejemplo, el operador que identifica el momento total de las partículas es la suma de los operadores que actúan en cada una de las partículas individualmente:

$$P_{total} = \sum_{i=1}^N P_i \quad (5)$$

Donde  $P_i$  es el operador que actúa en la  $i$ -ésima partícula:

$$P_i = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes P \otimes \dots \otimes 1 \quad (6)$$

Se ve que el operador depende del número de partículas y, por lo tanto, los cálculos variarán en función del número de partículas que existan en el sistema.

Estas son las razones por las que dicha aproximación parece poco conveniente para abordar el problema que se tiene entre manos, por lo que se quiere buscar una solución más sencilla, donde la antisemitización y los operadores no dependan del número de partículas.

Esto se puede conseguir con la conocida como segunda cuantización, que se explica en la siguiente sección.

## 2.1 Segunda cuantización

Como se acaba de explicar, lo que se intenta buscar es una solución en la que no sea necesario conocer el estado de cada una de las partículas, sino cuantas partículas se encuentran en un estado específico  $|\alpha_i\rangle$  de una base  $|\alpha\rangle$ . En principio, se puede describir el sistema y su función de onda si se conocen el número de partículas en un determinado estado de la base completa de estados.

Se va a utilizar una base en la que puede existir un número arbitrario de partículas. Ahora se considera que  $H_N$  corresponde al espacio de Hilbert que tiene N partículas, de esta forma se puede definir el siguiente espacio [1]:

$$\mathfrak{H} = \bigoplus_{j=0}^{\infty} H_j \quad (7)$$

La ecuación (7) representa la suma de los espacios de Hilbert compuestos por 0,1,2... número de partículas, se le conoce como espacio de Fock, y en él se puede definir la siguiente base:

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \quad (8)$$

Donde  $n_i$  representa el número de partículas en el estado  $|\alpha_i\rangle$ . Por ejemplo, el estado  $|0\rangle$  es el estado vacío o también conocido como vacío de Fock.

### 2.1.1 Operadores creación y destrucción

Ahora se van a introducir un conjunto de operadores que van a ser utilizados para modelar un sistema de n-partículas en una base de Fock. Para cada estado  $|\alpha_i\rangle$  se va a definir lo que se conoce como operador creación y destrucción, que va a incrementar o reducir en una unidad el número de partículas de un estado.

Es importante señalar que la definición de estos operadores varía ligeramente con el tipo de partículas, es decir, si se trata con bosones o con fermiones.

Para los bosones, el operador creación destrucción se definen de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} \hat{c}_i^+ |n_1, \dots, n_N\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_N\rangle \\ \hat{c}_i |n_1, \dots, n_N\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle \end{aligned} \quad (9)$$

Estos operadores cumplen las siguientes propiedades de conmutación:

$$\begin{aligned} [\hat{c}_i, \hat{c}_j^+] &= \delta_{ij} \\ [\hat{c}_i, \hat{c}_j] &= 0 \\ [\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+] &= 0 \end{aligned} \quad (10)$$

Estos operadores se pueden utilizar también para los fermiones, pero teniendo en cuenta que estas partículas deben cumplir el principio de exclusión de Pauli y, por lo tanto, no puede existir más de una partícula en el mismo estado del sistema. Las expresiones anteriores quedan de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{c}_i^+ |n_1, \dots, n_N\rangle &= (1 - n_i)(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_N\rangle \\ \hat{c}_i |n_1, \dots, n_N\rangle &= n_i(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle \end{aligned} \quad (11)$$

Donde  $\epsilon_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$  con  $\epsilon_1 = 0$ . Como se ha dicho anteriormente, el principio de exclusión de Pauli implica que  $n_i = 0$  ó  $n_i = 1$

También se sabe que los fermiones satisfacen la relación de anticonmutación:

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^+\} &= \delta_{ij} \\ \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} &= 0 \\ \{\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+\} &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

### 2.1.2 Cambio de base

Anteriormente se definía el espacio de Fock con la siguiente base  $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$ , donde  $n_i$  representa el número de partículas en un determinado estado. De manera similar, se puede definir un espacio de momentos  $|k_1, k_2, \dots, k_n\rangle$  como el conjunto de estados que agrupa un número de partículas que tienen un determinado momento  $k_i$ . En este espacio se pueden definir los operadores creación y destrucción de la siguiente manera [2, 3].

$$\begin{aligned} \hat{c}_k^+ |0\rangle &= |k\rangle \\ \hat{c}_k |k\rangle &= |0\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Se puede pasar de una base a otra mediante la siguiente relación:

$$|\beta\rangle = \sum_{\alpha} \langle\alpha|\beta\rangle |\alpha\rangle \quad (14)$$

Donde  $\beta$  y  $\alpha$  representan un estado en una base dada. De la misma manera también se pueden transformar los operadores creación y destrucción.

$$\hat{c}_{\beta}^+ = \sum_{\alpha} \langle\alpha|\beta\rangle \hat{c}_{\alpha}^+ \quad (15)$$

Además, se puede utilizar la expresión de debajo, que identifica la función de onda:

$$\langle k|j\rangle = \psi_k^*(r_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik \cdot r_j} \quad (16)$$

Donde  $|j\rangle = \hat{c}_j^+ |0\rangle$  es el estado en el que hay una partícula en la posición  $j$ -ésima

Con todo esto, se puede representar los operadores creación y destrucción en el estado de posición en función del estado de momentos y viceversa:

$$\hat{c}_j^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-ik \cdot r_j} \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \quad \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik \cdot r_j} \hat{c}_j^+ \quad (17)$$

$$\hat{c}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-ik \cdot r_j} \hat{c}_{\mathbf{k}} \quad \hat{c}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik \cdot r_j} \hat{c}_j \quad (18)$$

## 2.2 Modelo "Tight Binding"

El Hamiltoniano de un sistema de fermiones libres con espín (excluyendo cualquier otro tipo de interacción) viene definido por la siguiente expresión:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (19)$$

donde  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  representa la energía:

$$\epsilon_k = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \quad (20)$$

Aplicando las relaciones anteriores (17, 18), se puede expresar este mismo Hamiltoniano en el espacio de posiciones:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{N} \sum_{i,j,\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \widehat{c}_{i,\sigma}^+ \widehat{c}_{j,\sigma} = T_{i,j} \sum_{i,j,\sigma} \widehat{c}_{i,\sigma}^+ \widehat{c}_{j,\sigma} \quad (21)$$

Donde  $T_{i,j}$  es el parámetro conocido como “hopping amplitude”. En este trabajo se le llamará parámetro de salto.

Adicionalmente, se van a aplicar una serie de simplificaciones para realizar un análisis más sencillo del problema:

1. Sólo existirán interacciones entre los vecinos más cercanos. Esto quiere decir que el parámetro de salto tiende a 0 cuando  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  es grande ( $|i - j| \neq 1$  en un sistema discreto), o lo que es lo mismo, cuando se trata de fermiones que no son vecinos. A efectos prácticos esto se expresa de la siguiente manera:

$$T_{i,j} = \begin{cases} -t & \text{si } |i - j| = 1 \\ 0 & \text{si } |i - j| \neq 1 \end{cases} \quad (22)$$

2. Se va a trabajar con fermiones sin espín sin interacciones entre ellos
3. No se van a tener en cuenta inhomogeneidades ni desordenes en la malla

Finalmente, teniendo en cuenta las simplificaciones anteriores, el Hamiltoniano viene dado por la siguiente expresión:

$$\mathcal{H} = -t \sum_i^N \widehat{c}_i^+ \widehat{c}_{i+1} + \widehat{c}_{i+1}^+ \widehat{c}_i \quad (23)$$

El estado fundamental del Hamiltoniano anterior (23) se puede escribir con un determinante de Slater [1]:

$$|\psi_{GS}\rangle = \prod_k^{N_e} \widehat{b}_k^+ |0\rangle \quad (24)$$

donde  $|0\rangle$  es el estado vacío,  $\widehat{b}_k^+$  es otro operador creación y  $N_e$  es el número de electrones que hay en el sistema. Particularmente en este trabajo se va a estudiar un sistema a medio llenar, es decir, el número de electrones viene definida por la siguiente expresión.

$$N_e = \frac{n^{\circ} \text{ nodos}}{2} \quad (25)$$

A partir de una operación canónica como las explicadas en la sección 2.1.2 se tiene que:

$$\widehat{b}_k^+ = \sum_i U_{k,i} \widehat{c}_i^+ \quad (26)$$

Donde  $U$  es la matriz que diagonaliza la matriz de salto  $T_{i,j}$ , es decir la matriz formada con los autovectores  $u_k$  de  $T_{i,j}$ . Por otra parte, los autovalores de  $T_{i,j}$  se van a representar por el siguiente parámetro  $\epsilon_k$ .

$$T u_k = \epsilon_k u_k \quad (27)$$

La brecha de energía del sistema viene dada por la excitación mínima de energía. En un sistema de fermiones sin espín (donde solo puede haber un fermión en cada nivel de energía por el principio de exclusión de Pauli) y a medio llenar, la brecha de energía viene dada por la siguiente expresión:

$$\Delta E = \varepsilon_{\frac{L}{2}+1} - \varepsilon_{\frac{L}{2}} \quad (28)$$

El salto de energía va a servir para medir como de robusto es el estado fundamental del sistema.

### 2.2.1 Aproximación SDRG

Cuando los parámetros de salto  $t$  entre los diferentes elementos de un sistema son muy diferentes entre sí (i.e. cuando existen fuertes inhomogeneidades en el sistema), se puede aplicar la aproximación “Strong Disorder Renormalization Group” SDRG [4] (también conocida como la renormalización de Dasgupta-Ma) para calcular el estado fundamental de un sistema. Por ejemplo, con esta aproximación y en un sistema unidimensional, si se unen los dos puntos de un sistema que presentan el enlace más fuerte  $t_i$ , los elementos vecinos a dichos puntos ( $t_{i+1}, t_{i-1}$ ) se pueden relacionar por medio de un parámetro de salto efectivo que se puede calcular por medio de una teoría de perturbaciones de segundo orden [4].

$$t^{eff} = \frac{t_{i-1}t_{i+1}}{t_i} \quad (29)$$

Para un sistema libre de fermiones, si se forma un enlace entre un elemento  $i$  y otro  $j$ , el parámetro de salto efectivo entre ambos sitios viene dado por la siguiente expresión [5].

$$t_{i,j}^{eff} = \frac{t_i t_{i+2} t_{i+4} \dots t_{j-1}}{t_{i+1} \dots t_{j-2}} \quad (30)$$

La aproximación SDRG también se puede utilizar para aproximar la brecha de energía del sistema que se está analizando. Esta está relacionada con el parámetro de salto efectivo del enlace a distancia que se forme [6]. Por ejemplo, si se forma un enlace entre los extremos de una cadena unidimensional, este será el que presente la mínima energía y la ecuación (30) se puede utilizar para estimar dicha energía. De la misma manera, y en dirección contraria, la brecha de energía da una idea del enlace efectivo que se forma entre los elementos que se están correlacionando a larga distancia dentro del sistema.

### 2.3 Simetría quiral

En mecánica cuántica se dice que un operador unitario  $U$  es simétrico con respecto a un Hamiltoniano si cumple la siguiente propiedad:

$$U\mathcal{H}U^+ = \mathcal{H} \quad (31)$$

En caso de que exista dicha simetría,  $U$  y  $\mathcal{H}$  se pueden diagonalizar conjuntamente de tal manera que los autoestados de  $U$  y de  $\mathcal{H}$  coinciden.

Un tipo diferente de simetría es la que se conoce como simetría Quiral. Aquí el Hamiltoniano cumple la siguiente propiedad [7]:

$$\Gamma\mathcal{H}\Gamma^+ = -\mathcal{H} \quad (32)$$

$\Gamma$  es el operador quiral, que además de ser un operador unitario tiene que ser Hermítico ( $\Gamma^+ = \Gamma$ ).

La simetría quiral tiene dos consecuencias importantes:

1. Por un lado, implica que existe simetría en diferentes subredes. Se pueden definir dos proyectores ortogonales, uno para cada subred:

$$P_A = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \Gamma) \quad P_B = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \Gamma) \quad (33)$$

De tal manera que el operador quiral se puede construir de la siguiente manera por medio de estos dos operadores:

$$\Gamma = P_A - P_B \quad (34)$$

Los proyectores ortogonales cumplen las siguientes propiedades:

$$P_A + P_B = \mathbb{1} \quad P_A \cdot P_B = 0 \quad (35)$$

La expresión (32) se puede describir de la siguiente manera:

$$P_A \mathcal{H} P_A = P_B \mathcal{H} P_B = 0 \quad \mathcal{H} = P_A \mathcal{H} P_B + P_B \mathcal{H} P_A \quad (36)$$

En forma matricial quedaría de la siguiente forma

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & H_{AB} \\ H_{AB}^+ & 0 \end{pmatrix} \quad (37)$$

En conclusión, la simetría quiral permite dividir los grados de libertad de un sistema en dos subgrupos o dos subredes formados por dos elementos que se pueden indicar con los índices A y B de tal manera que el hamiltoniano no induce transiciones entre nodos que presenten el mismo índice. Es decir, para el problema que estamos tratando, el parámetro de salto  $t_{i,j}$  podrá ser distinto de 0 solamente entre aquellos elementos que tengan índices (A, B) diferentes.

2. Por otro lado, el espectro de un Hamiltoniano que tenga quiralidad es simétrico. Para cualquier estado con una determinada energía  $E$ , existe otro estado simétrico con energía  $-E$ .

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle; \quad H\Gamma|\Psi_n\rangle = -\Gamma H|\Psi_n\rangle = -\Gamma E_n|\Psi_n\rangle = -E_n\Gamma|\Psi_n\rangle \quad (38)$$

Este resultado tiene ciertas implicaciones. Si  $E_n \neq 0$  los estados  $|\Psi_n\rangle$  y  $\Gamma|\Psi_n\rangle$  son estados con diferentes energías y, por lo tanto, tienen que ser ortogonales, lo que conlleva a que ambas subredes tengan el mismo peso en el estado de energía. Utilizando (34) se obtiene:

$$\langle \Psi_n | \Gamma | \Psi_n \rangle = 0 \rightarrow \langle \Psi_n | P_A | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | P_B | \Psi_n \rangle \quad (39)$$

Esto tiene como consecuencia que un sistema con simetría quiral y a medio llenar, donde sólo los estados de energía negativos están ocupados, presenta una densidad homogénea  $n_i = \frac{1}{2}$ .

Un ejemplo de simetría quiral se ve en [8, 9] donde se analiza un sistema que tiene un Hamiltoniano utilizando un modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH). Esta simetría quiral también surge de manera natural en la red del grafeno.

## 2.4 Entropía y entrelazamiento

El concepto de entropía introducido por Von Neumann permite de una manera directa diferenciar un estado puro de un estado mixto. De la misma forma, es una herramienta útil para estudiar de manera cuantitativa la correlación existente entre dos sistemas. La entropía de Von Neumann viene definida por la siguiente expresión [10]:

$$S = -Tr(\rho \cdot \ln \rho) \quad (40)$$

Donde  $\rho$  es la matriz de densidad del sistema.

Algunas de sus propiedades se enumeran debajo:

1.  $S(\rho) = 0$  si y sólo si  $\rho$  representa un estado puro
2.  $S(\rho)$  es máximo e igual a  $\ln N$  para un estado máximamente mezclado, siendo  $N$  la dimensión del espacio de Hilbert.
3.  $S(\rho)$  es invariante ante cambios de base de  $\rho$
4.  $S(\rho)$  cumple la propiedad de concavidad. Dado un conjunto de números  $n$  que cumplan con  $\sum_i n_i = 1$ , se verifica que:  $S(\sum_{i=1}^k n_i \rho_i) \geq \sum_{i=1}^k n_i S(\rho_i)$
5.  $S(\rho_A) + S(\rho_B) \geq S(\rho_{A+B})$
6.  $S(\rho_A) + S(\rho_B) = S(\rho_A \otimes \rho_B)$

A la entropía de Von Neumann también se la suele llamar entropía de entrelazamiento y, como su nombre indica, a menudo se utiliza como medida del entrelazamiento entre dos sistemas.

Otro elemento importante para obtener las propiedades de entrelazamiento es la matriz de correlación  $C_{i,j}$ . Esta se puede calcular de la siguiente manera:

$$C_{i,j} = \langle \psi_{GS} | c_i^\dagger c_j | \psi_{GS} \rangle = \sum_{k=1}^N \bar{U}_{k,i} U_{k,j} \quad (41)$$

Donde se recuerda que  $U$  es la matriz que diagonaliza la matriz de salto  $T_{i,j}$  que contiene los parámetros de salto entre los elementos del sistema.

Con los conceptos principales ya presentados, es interesante saber cómo obtener las propiedades de entrelazamiento de un conjunto de elementos reducido de nuestro sistema, o lo que es lo mismo, un bloque  $B$  del sistema que se va a estudiar ( $B = \{i_1, \dots, i_l\}$ , donde los elementos  $i$  pueden estar separados distancias grandes) [8, 9]. Estas propiedades de entrelazamiento se pueden obtener a partir de la matriz de densidad reducida:

$$\rho^B = Tr_B |\psi\rangle\langle\psi| \quad (42)$$

De la expresión (42)  $Tr_B$  es la traza parcial. Si es el caso de un determinante de Slater,  $\rho^B$  se puede expresar como producto tensorial de matrices de densidad  $2 \times 2$  [11]:

$$\rho^B = \otimes_{k=1}^l \begin{pmatrix} v_k^B & 0 \\ 0 & 1 - v_k^B \end{pmatrix} \quad (43)$$

Donde los valores  $v_k^B \in [0, 1]$  corresponden a los autovalores de la matriz de correlación reducida al bloque  $B$  que se está analizando  $C^B$  ( $C_{i,j}$  con  $i, j \in B$ ).

La matriz de densidad reducida también se puede obtener para el sistema de estudio con la siguiente expresión [12]:

$$\rho^B = K \exp(-H^B) \quad (44)$$

Donde  $K$  es una constante de normalización y, lo que es más importante,  $H^B$  es el hamiltoniano con estado térmico  $\beta = 1$  que corresponde a la matriz de densidad reducida  $\rho^B$ , se le conoce como Hamiltoniano de entrelazamiento y está compuesto por los parámetros de salto efectivos.

La energía de entrelazamiento  $\epsilon_k$ , también llamada espectro de entrelazamiento, se obtiene con los autovalores  $v_k^B$  de la matriz de densidad reducida  $\rho^B$ . Esta energía constituye el espectro de energías del Hamiltoniano de entrelazamiento  $H^B$ . La siguiente expresión relaciona  $\epsilon_k$  con  $v_k^B$  [11]:

$$v_k^B = \frac{1}{1 + \exp(\epsilon_k)} \quad (45)$$

Aplicando el concepto de entropía de Von Neumann explicado al principio de esta sección, se puede calcular la entropía del bloque B:

$$S^B = -Tr(\rho^B \cdot \ln \rho^B) \quad (46)$$

O también:

$$S^B = - \sum_{k=1}^l (v_k^B \cdot \ln(v_k^B) + (1 - v_k^B) \cdot \ln(1 - v_k^B)) \quad (47)$$

Se puede demostrar, que para los sistemas que se van a estudiar en este trabajo existe una entropía del bloque máxima, que se puede calcular multiplicando  $\log(2)$  por el número de enlaces rotos  $n_B$  cuando un bloque es separado del resto del sistema [13].

$$S_{max}^B = n_B \log(2) \quad (48)$$

## 2.5 Estado del arte de la experimentación con sistemas de muchas partículas

Hoy en día, sistemas de muchas partículas como el que se quiere analizar de manera computacional en este trabajo y cuya base matemática ha sido presentada en las secciones anteriores, se pueden también diseñar de manera experimental.

Existen técnicas mediante las cuales los átomos pueden ser atrapados y pueden ser desplazados usando diferentes herramientas ópticas y magnéticas. Además de esto, se pueden manipular los estados internos de los átomos por medio de láseres. Específicamente, sistemas de muchas partículas con interacciones entre ellas pueden construirse con gases atómicos fríos en redes ópticas a partir de campos de luz laser de onda estacionarias [14]. En concreto, este procedimiento se conoce como “Cold-Atom toolbox”.

Esta técnica hace posible el intercambio de momento entre los átomos y un campo óptico. La energía de la luz  $\hbar\omega$  y su momento puede cambiar la energía interna, el momento angular y el momento lineal del átomo, lo cual permite controlar dichos átomos. Adicionalmente, esta técnica puede enfriar los átomos de tal manera que un haz laser permite reducir la entropía de los átomos produciéndose en consecuencia un aumento de la entropía del campo de luz [15].

Para confinar un objeto y así poder construir una red, es necesario intercambiar energía cinética por energía potencial. En el caso de los átomos, la energía potencial tiene que ser almacenada en energía interna del átomo. Por lo tanto, el confinamiento de átomos depende de su enfriamiento efectivo [15].

No es el objetivo de este trabajo entrar en detalle o analizar las diferentes herramientas que existen para enfriar y confinar sistemas cuánticos. Simplemente se quiere señalar que dichas técnicas existen y que permitirían realizar medidas experimentales de un sistema como el que se va a analizar numéricamente en las secciones sucesivas.

### 3. Presentación de resultados

#### 3.1 Análisis del problema

El sistema que se va a analizar en este trabajo pretende ser un complemento a lo ya estudiado en [8] y [9], donde se analizan las propiedades de correlación y entrelazamiento en una cadena de fermiones dimerizada con el modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) y en cadenas de fermiones dimerizadas en los extremos con distintas geometrías.

Se propone continuar en la línea de los trabajos anteriores y analizar el comportamiento de una malla de estructura hexagonal similar a la estructura del Grafeno.

El grafeno es un material bidimensional que está compuesto por átomos de carbono organizados en una estructura hexagonal de panal de abeja. Esta estructura se puede ver como una red triangular formada por 2 átomos (A y B) por celda unidad (Figura 1). Todos los átomos se pueden alcanzar con los siguientes vectores de la red.

$$\mathbf{a}_1 = (3, \sqrt{3})a/2; \quad \mathbf{a}_2 = (3, -\sqrt{3})a/2 \quad (49)$$

Los vectores de los vecinos más próximos vienen dados por las siguientes expresiones

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{(-1, \sqrt{3})a}{2}; \quad \boldsymbol{\delta}_2 = (1, 0)a; \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{-(1, \sqrt{3})a}{2}; \quad (50)$$

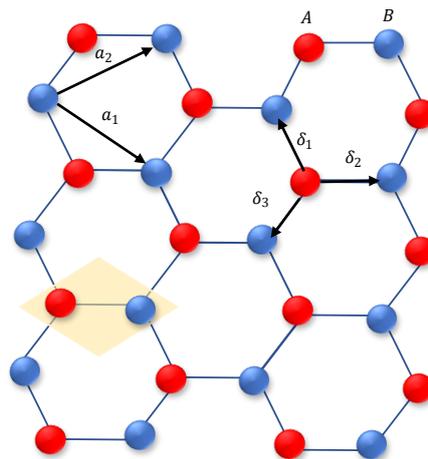


Figura 1: Representación de una red de grafeno [16] con su base de vectores  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ , los vectores que conectan las subredes o vecinos más cercanos  $\boldsymbol{\delta}_1$ ,  $\boldsymbol{\delta}_2$  y  $\boldsymbol{\delta}_3$ . El rombo amarillo identifica la celda unidad formada por un átomo A y un átomo B

Para construir esta malla se han utilizado distintas cadenas de diferentes longitudes  $l$ . Estas cadenas se van a conectar entre sí mediante el parámetro de salto de tal manera que se obtendría una estructura similar a la de una malla hexagonal. Dependiendo de la longitud de las cadenas y del número de cadenas, la malla resultante tendrá una estructura diferente pudiendo existir algún fermión aislado. Algunos ejemplos particulares se representan en la Figura 2 y en la Figura 3.

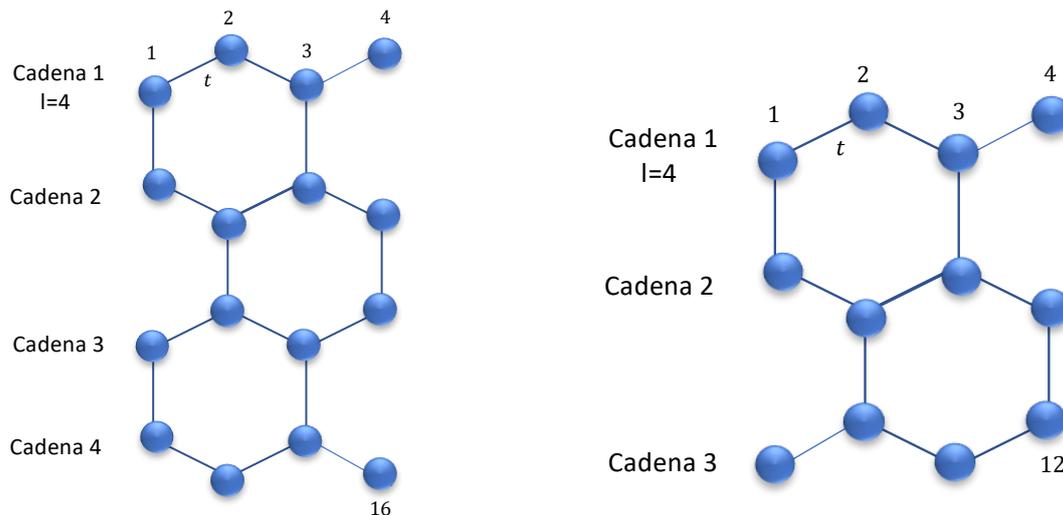


Figura 2: Ilustración de la malla con estructura hexagonal para una longitud de cadena par ( $l=4$ ) y para un número de cadenas par (izquierda) e impar (derecha) y con un parámetro de salto  $t$ .

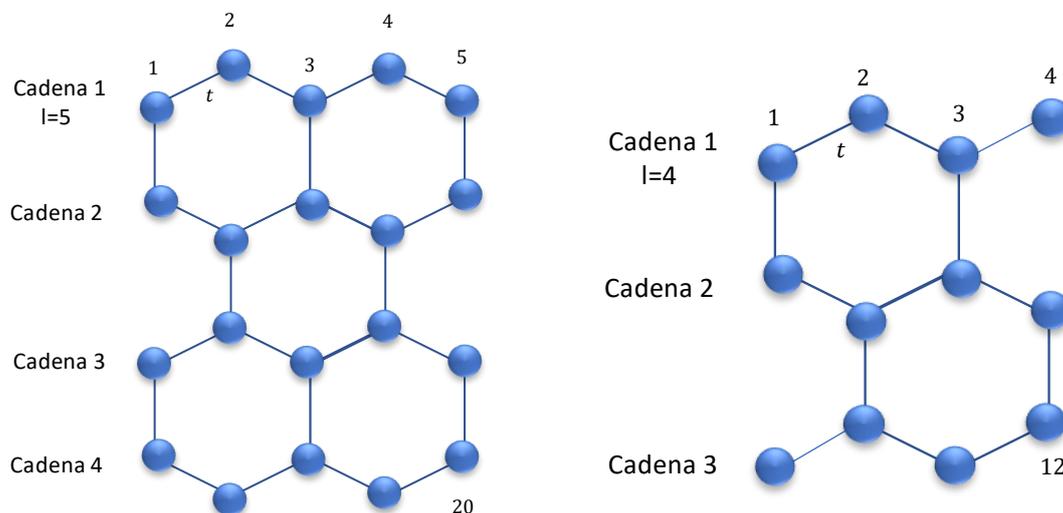


Figura 3: Ilustración de la malla con estructura hexagonal para una longitud de cadena impar ( $l=5$ ) y para un número de cadenas par (izquierda) e impar (derecha) y con un parámetro de salto  $t$ .

En las secciones sucesivas se va a realizar un análisis de un sistema como el que se representa en la imagen izquierda de la Figura 2, donde se va a intentar aislar los dos elementos que se encuentran apartados en los extremos de la red.

Los parámetros que se van a variar son los siguientes:

- La longitud de la cadena  $l$  (que sería equivalente a alargar la malla a lo ancho),
- El número de cadenas  $N_c$  (que sería equivalente a alargar la malla a lo alto),
- El parámetro de salto  $t$  entre algunos elementos de la malla.

La malla que se va a estudiar en este trabajo va a estar compuesta de fermiones de manera similar a la red de electrones libres de una malla de grafeno. Además, se va a considerar una malla a medio llenar, tal y como ocurre con la banda  $\pi$  del grafeno. El número de fermiones viene dado por la siguiente expresión.

$$N_e = \frac{l \cdot N_c}{2} \quad (51)$$

### 3.2 Resultados numéricos

#### 3.2.1 Características de una malla hexagonal con todos los enlaces $t$ homogéneos

Como se decía en la sección anterior, en este trabajo se va a utilizar una malla con una estructura donde la longitud de las cadenas  $l$  y el número de cadenas  $N_c$  son pares. Van a existir dos elementos de la malla que se van a quedar fuera de las estructuras hexagonales (se les va a llamar elementos huérfanos de ahora en adelante). En secciones posteriores estos elementos (que están uno encima del otro, separados por un número de cadenas  $N_c$  determinado) van a ser aislados, modificando diferentes parámetros de salto a los que se les va a dar un valor  $t_0$ . Para los análisis que se presentan en esta sección todos los parámetros de salto  $t$  que conectan los diferentes nodos de la malla van a tomar el mismo valor  $t = 1$ .

En la Figura 4 aparece un ejemplo con un tamaño específico de este tipo de sistema. La malla de dicha imagen está formada por 4 cadenas de longitud 6 ( $l = 6, N_c = 4$ ). Se pueden construir mallas equivalente más grandes añadiendo más cadenas a la malla o utilizando longitudes de cadena más larga.

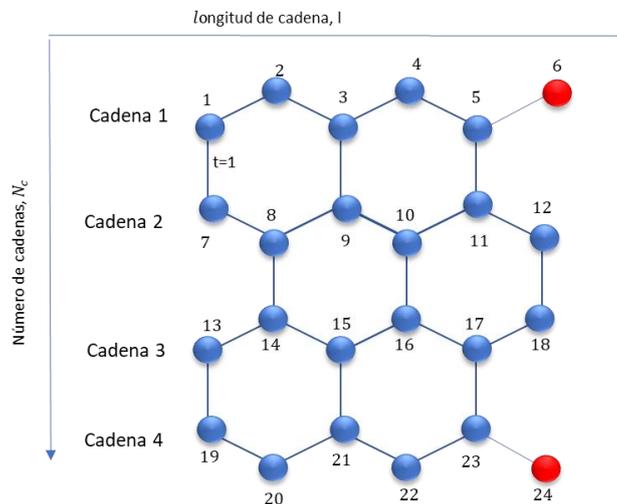


Figura 4: Malla del sistema 1,  $l = 6, N_c = 4$ , con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

En primer lugar, se va a analizar la matriz de correlación del sistema para así demostrar que existe una correlación inicial entre los elementos huérfanos de la malla, es decir, los que forman el bloque  $B = \{l, N_c \cdot l\} = \{6, 24\}$ . El mismo efecto se observa en [8] o en el análisis realizado en el Anexo I, donde existe una correlación entre extremos dentro de una cadena unidimensional de fermiones a medio llenar.

En la Figura 5 se muestra la matriz de correlación de la malla representada en la Figura 4, donde se puede comprobar esa correlación inicial entre dichos elementos  $B = \{6, 24\}$ , aun sin aislar, del resto de la malla. En particular, esta correlación inicial toma el valor  $|C^B| = 0.234$

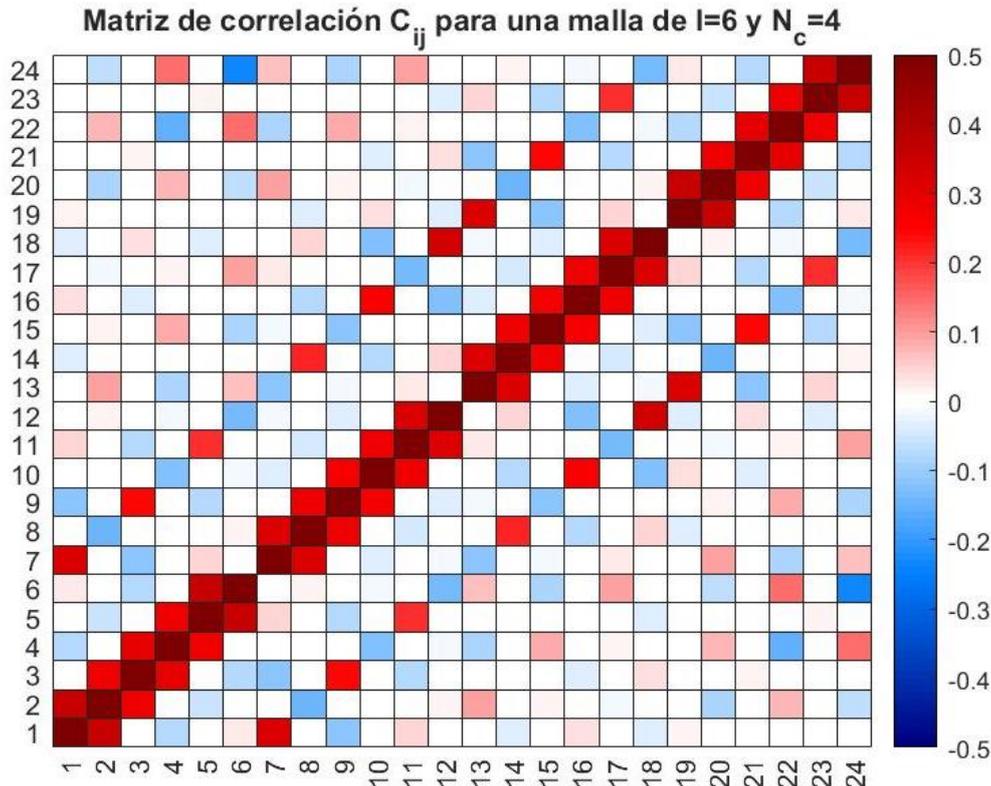


Figura 5: Matriz de correlación para la malla de la Figura 4 ( $l = 6$ ,  $N_c = 4$  y  $t = 1$ )

### 3.2.1.1 Simetría quiral en el sistema

Como se explicaba en la sección 2.3, se puede adelantar que la malla de estructura hexagonal como la de la Figura 4 va a presentar simetría quiral pues el Hamiltoniano se ha construido de tal manera que se ha establecido un parámetro de salto  $t$  distinto de 0 entre nodos con índices diferentes (ver Figura 6).

Una de las primeras características que llama la atención de la Figura 5 es que los elementos de la diagonal toman un valor de  $C_{i,i} = 0.5$ . Es importante señalar que la densidad local viene dada por los elementos de la diagonal de la matriz de correlación. Si existe simetría quiral, tal y como ocurre en la red que se está analizando, se puede demostrar que para una red a medio llenar la densidad es homogénea en todo el sistema [7].

$$\langle n_i \rangle = \langle c_i^+ c_i \rangle = \frac{1}{2} \quad \text{para todo } i \in l \cdot N_c \quad (52)$$

Además de esta densidad homogénea, otra de las características llamativas de un sistema que presenta simetría quiral, es que no existe correlación entre elementos de una misma subred. Como se muestra en la Figura 1 y Figura 6, una malla hexagonal está formada por celdas unidades en la que existen dos elementos que se pueden indicar con los índices A y B. La matriz de correlación de la Figura 5 muestra que no existe correlación entre los nodos que presentan el mismo índice, siendo esta otra de las propiedades características de un sistema con simetría quiral.

En la Figura 6 se han indexado los elementos de la malla para mostrar el sistema bipartito del que está compuesto. Igualmente importante es destacar cómo los elementos huérfanos del sistema pertenecen a elementos de dos subredes diferentes (A y B) lo que favorece que exista una correlación entre ellos.

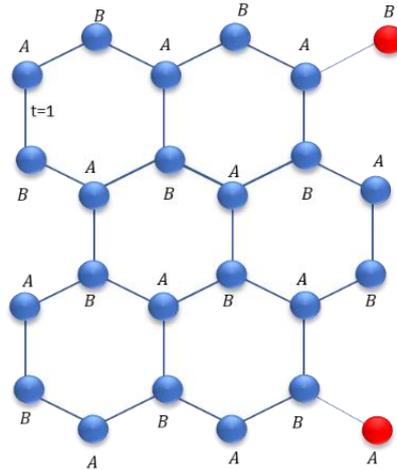


Figura 6: Sistema bipartito del que está compuesta una malla hexagonal, con todos los parámetros de salto  $t = 1$

La última de las propiedades importantes de un sistema con simetría quiral es la simetría de su espectro de energía o autovalores. Para un sistema homogéneo con todos los parámetros de salto  $t$  iguales a la unidad como el de la Figura 4 o la Figura 6 se obtiene el siguiente espectro de energía.

Tabla 1: Espectro de energía parcial o primeros autovalores para un sistema como el de la Figura 4

$\epsilon_{+1}$	$\epsilon_{-1}$	$\epsilon_{+2}$	$\epsilon_{-2}$	$\epsilon_{+3}$	$\epsilon_{-3}$	$\epsilon_{+4}$	$\epsilon_{-4}$
0.032	-0.032	0.56	-0.56	0.80	-0.80	1.1	-1.1

La Tabla 1 muestra alguno de los autovalores de un Hamiltoniano que modela el sistema de la Figura 4, siendo la característica principal la simetría de este espectro con la presencia del mismo autovalor con signo positivo y negativo, tal y como ocurre en sistemas que presentan simetría quiral.

Para profundizar un poco más en las características de un sistema con simetría quiral, se ha diseñado una malla similar a la que se está analizando, pero situando un nodo adicional en el centro de los hexágonos, que va a interactuar con el resto de los vértices del hexágono por medio de un parámetro de salto  $t_c$ . La Figura 7 esquematiza dicha malla.

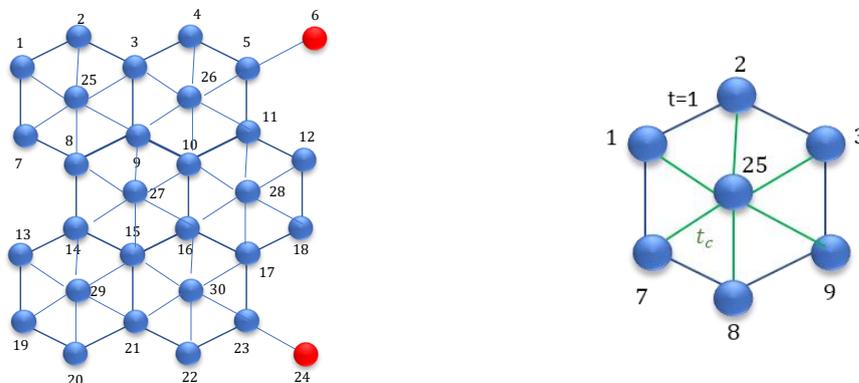


Figura 7: Malla hexagonal con nodos centrados en las caras (izquierda). Detalle de un bloque hexagonal en donde se representa el parámetro de salto  $t_c$  que une los vértices con el nodo central, todos los parámetros de salto de la malla toman un valor  $t = t_c = 1$

A la vista de la Figura 7, se podría pensar que las propiedades de este sistema con respecto al sistema original serían muy parecidos.

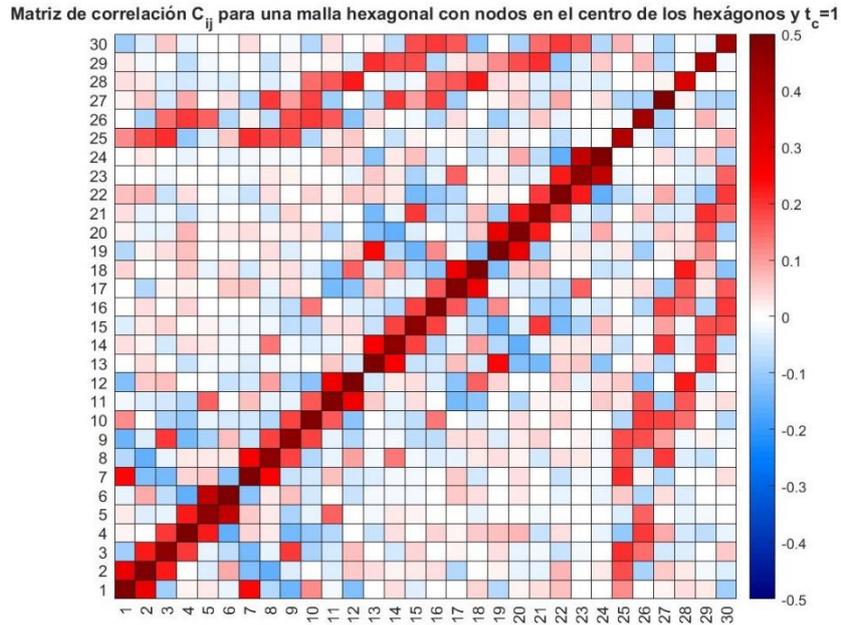


Figura 8: Matriz de correlación para la malla de la Figura 7 de ( $l = 6$  y  $N_c = 4$ ) con nodos centrados en las caras con parámetro de salto entre vértices y nodos centrales  $t_c$ . Todos los parámetros de salto de la malla toman un valor  $t = t_c = 1$

Lo primero que llama la atención de la Figura 8 es que la diagonal de la matriz ya no está equilibrada ( $\langle n_i \rangle = \langle c_i^+ c_i \rangle \neq \frac{1}{2}$ ). Lo que se deduce de esta matriz de correlación es que, al introducir nodos adicionales en el centro de las caras de los hexágonos que interactúan con los nodos de los vértices, desaparece la quiralidad del sistema original y, como consecuencia, la densidad del sistema deja de ser homogénea.

Esto también se puede observar en los autovalores del nuevo sistema. En la Tabla 2 se ve cómo el espectro de energía deja de ser simétrico.

Tabla 2: Espectro de energía parcial o primeros autovalores para un sistema como el de la Figura 7 con  $t = t_c = 1$

$\epsilon_{+1}$	$\epsilon_{-1}$	$\epsilon_{+2}$	$\epsilon_{-2}$	$\epsilon_{+3}$	$\epsilon_{-3}$	$\epsilon_{+4}$	$\epsilon_{-4}$
0.45	-0.11	0.49	-0.20	0.56	-0.57	0.68	-0.80

Aprovechando que un sistema con simetría quiral tiene todos los valores de la diagonal de la matriz de correlación idénticos a 0.5 (lo que implica que una media  $\bar{m} = 0.5$ ) y por lo tanto una desviación típica nula ( $\sigma = 0$ ), se va a calcular la desviación típica de los elementos de dicha diagonal, variando la intensidad del parámetro de salto  $t_c$  para así ver cómo afectan los enlaces centrales a la quiralidad. La Figura 9 muestra dicha relación.

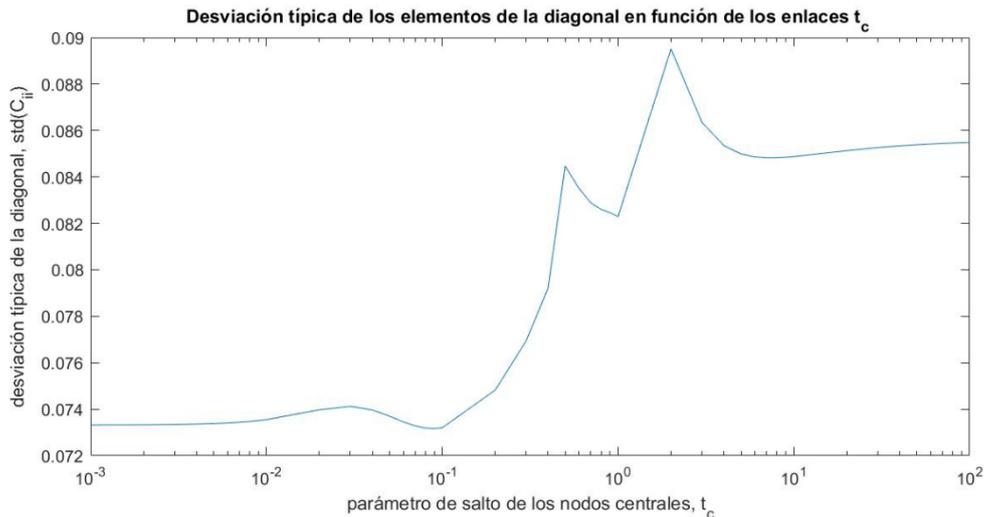


Figura 9: Representación de la quiralidad – intensidad del parámetro de salto  $t_c$  con los nodos centrales. El resto de los parámetros de salto toman un valor  $t = 1$

En la Figura 9 se aprecia cómo la desviación típica de los elementos de la diagonal de la matriz de correlación no se anula, ni aun cuando se utiliza un parámetro de salto  $t_c$  muy pequeño.

También cabe destacar las pequeñas variaciones de la desviación típica, siendo este valor aproximadamente un 14% más reducido para los valores pequeños del enlace  $t_c$  ( $t_c \sim 10^{-2}$ ) en comparación a cuando  $t_c$  toma valores más grandes ( $t_c \sim 10^2$ ).

Con este resultado se puede concluir que unir los vértices del hexágono con el nodo central, aunque sea con un enlace  $t_c$  muy débil, implica romper la simetría quiral y perder todas aquellas propiedades que se han explicado con anterioridad.

### 3.2.1.2 Propiedades de la malla en función de los parámetros

En este apartado se van a calcular las propiedades del bloque  $B = \{l, N_c \cdot l\}$ , compuesto por los dos elementos huérfanos del sistema (nodos de color rojo de la Figura 4 y la Figura 6), con todos los parámetros de salto en la malla homogéneos e iguales a la unidad ( $t = 1$ ). Para ello se va a ver como varían la correlación y entropía del bloque y la energía del sistema con respecto a la longitud de las cadenas  $l$  y el número de cadenas  $N_c$ .

En las figuras inferiores se muestra cómo varían la correlación y la entropía del bloque junto con la energía en función del número de cadenas  $N_c$  para distintas longitudes de cadena fijas.

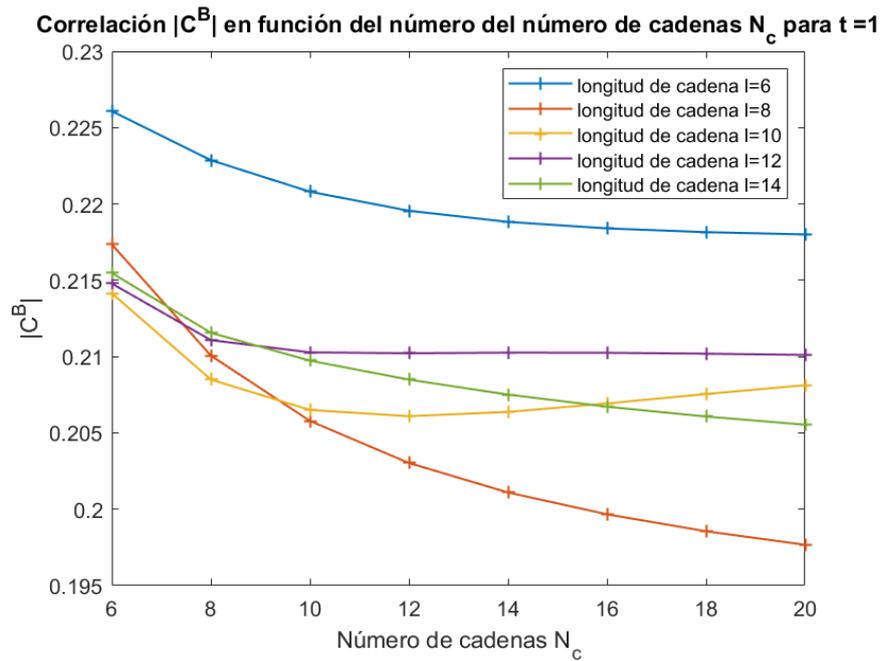


Figura 10: Correlación del bloque  $B = \{l, N_c \cdot l\}$  (elementos huérfanos de la malla) en función del número de cadenas  $N_c$  para para distintas longitudes de cadena  $l$ , con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

Llama la atención que la forma de la curva de la correlación varía en función de la longitud de la cadena escogida y que las curvas son distintas entre sí. Solo hay que señalar que efectivamente para todos los casos existe una correlación inicial en el bloque, que de manera general, parece que se reduce ligeramente según va aumentando el número de cadenas  $N_c$  hasta saturar en un cierto valor. Llama también la atención la malla formada por una longitud de cadena  $l = 10$  en donde se ve un descenso inicial de la correlación para luego volver a crecer.

El mismo patrón que se acaba de explicar se observa en la figura inferior, donde se han pintado las curvas de la entropía. Se ve como un aumento de la correlación supone una disminución de la entropía y viceversa.

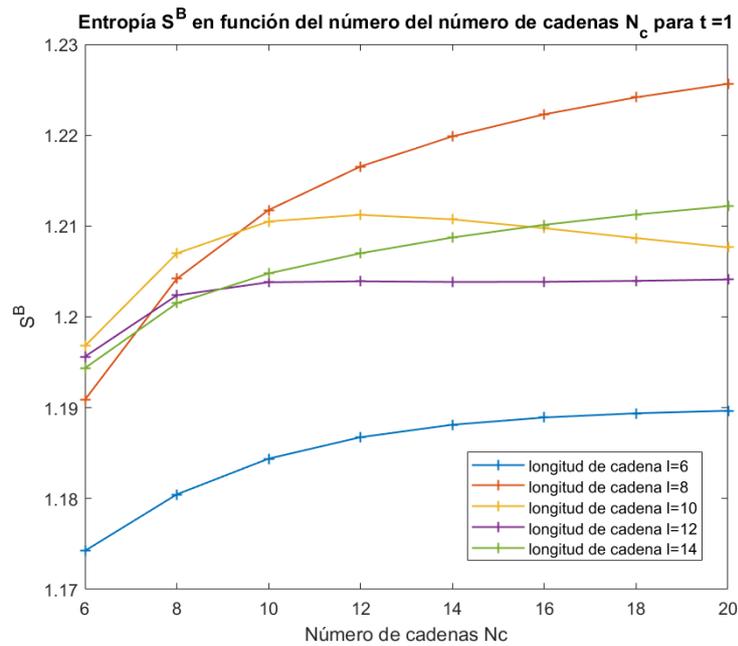


Figura 11: Entropía del bloque  $B = \{l, N_c \cdot l\}$  (elementos huérfanos de la malla) en función del número de cadenas  $N_c$  para para distintas longitudes de cadena  $l$ , con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

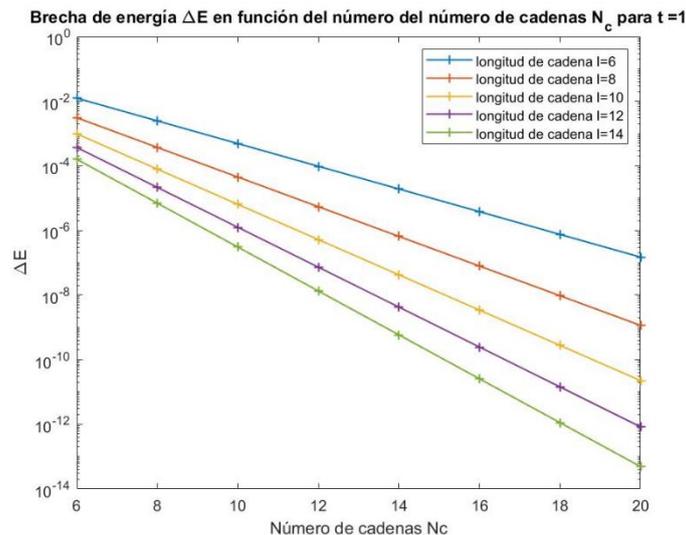


Figura 12: Brecha de energía en función del número de cadenas  $N_c$  para para distintas longitudes de cadena  $l$  y con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

Finalmente, con respecto a la brecha energía se aprecia que mallas más grandes presentan una brecha de energía más pequeña. Es importante señalar que el ritmo al que decrece la brecha energía varía también en función de la longitud de las cadenas, teniendo por ejemplo una pendiente más inclinada la malla de longitud 14 que la malla de longitud 6. Dicho esto, se deduce de manera directa que cuanto más alargada (longitud de cadena  $l$  mayor) sea la malla a la que se está añadiendo las cadenas  $N_c$ , más rápido decrece su brecha energía.

Ahora se va a repetir el mismo ejercicio, pero fijando un número de cadenas  $N_c$  y variando la longitud de las cadenas  $l$ .

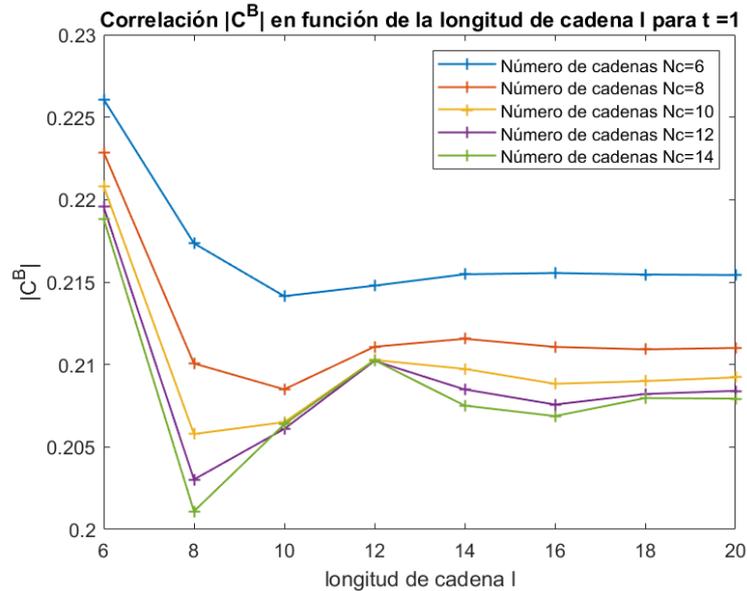


Figura 13: Correlación del bloque  $B = \{l, N_c \cdot l\}$  (elementos huérfanos de la malla) en función de la longitud de cadena  $l$  para para distinto número de cadenas  $N_c$  y con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

Lo que se ve ahora es una ligera oscilación amortiguada de la correlación hasta saturar en un cierto valor según la cadena se va haciendo más larga. Estas oscilaciones son más pronunciadas inicialmente si el número de cadenas  $N_c$  utilizado es mayor, pero se van atenuando conforme las longitudes de cadena  $l$  van creciendo, hasta llegar a un valor límite que depende del número de cadenas  $N_c$  de la malla. Es también un patrón común que la correlación satura para valores cada vez menores conforme el número de cadenas  $N_c$  se hace más grande.

De este resultado se puede extraer que el efecto que tiene la topología de la malla sobre la correlación va a tener una relevancia importante cuando la malla está formada por cadenas de corta longitud ( $l \in [6,12]$ ). A medida que la malla va creciendo la correlación satura a un cierto valor que depende del número de cadenas

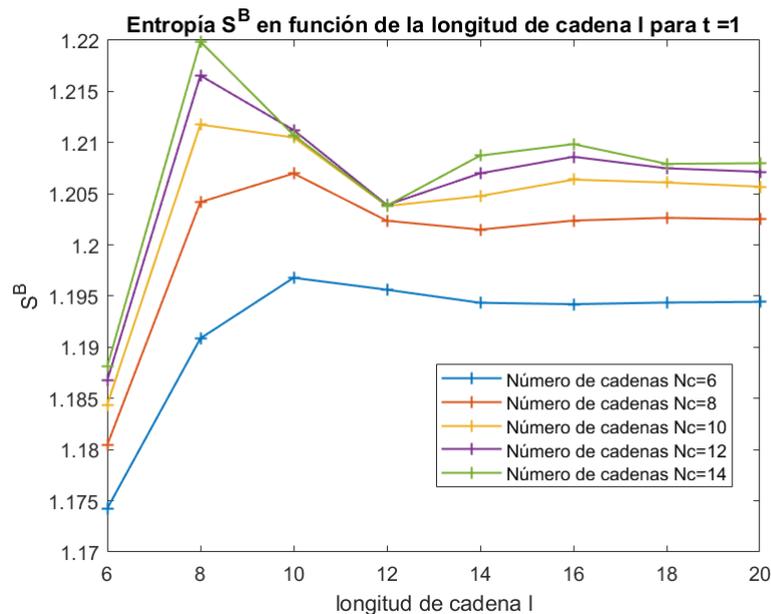


Figura 14: Entropía del bloque  $B = \{l, N_c \cdot l\}$  (elementos huérfanos de la malla) en función de la longitud de cadena  $l$  para para distinto número de cadenas  $N_c$  y con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

Como se decía anteriormente, el comportamiento de la entropía es un reflejo de lo que se ha visto en la correlación. Mayor correlación del bloque implica una menor entropía.

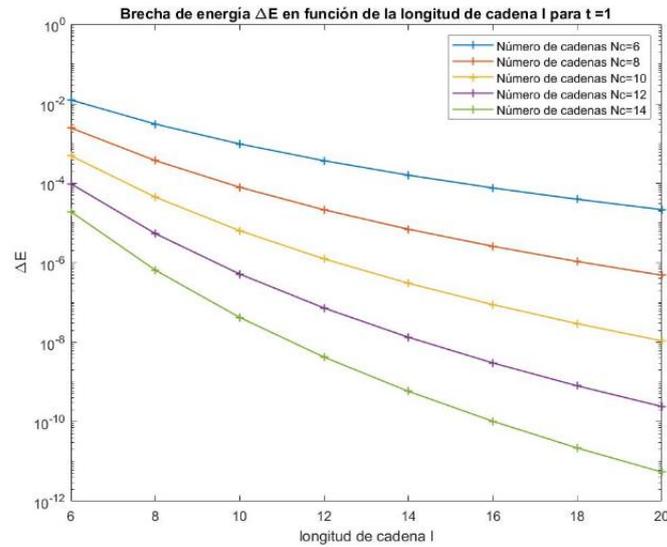


Figura 15: Brecha de energía del sistema en función de la longitud de cadena  $l$  para para distinto número de cadenas  $N_c$  y con todos los parámetros de salto de la malla  $t = 1$

Finalmente, también se observa que la brecha energía se reduce a medida que la longitud de la cadena se hace más grande, aunque es cierto que el ritmo al que decrece es menor que si se mete un mayor número de cadenas, como se representó en la Figura 12.

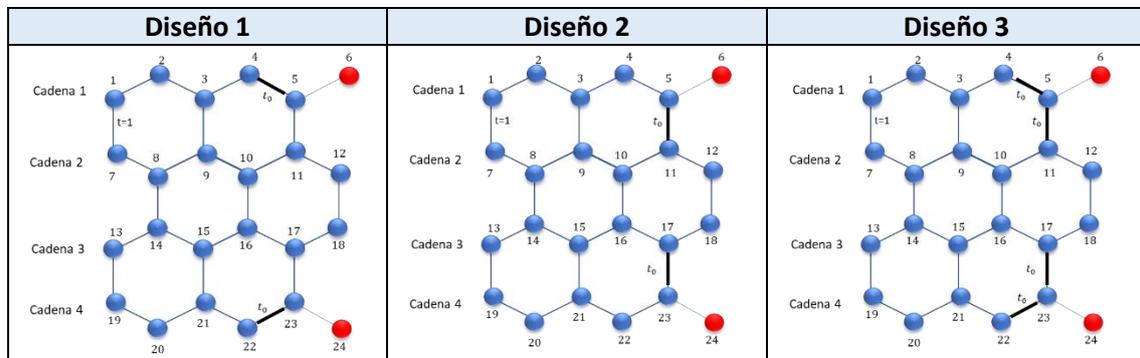
Adicionalmente, se ve que las propiedades de correlación entropía y energía no dependen del número de nodos ( $l \cdot N_c$ ), sino en la manera en la que se hace crecer la malla, ya sea añadiendo más cadenas (aumentando  $N_c$ ) o utilizando cadenas de mayor longitud (aumentado  $l$ ). Es decir, para el mismo número de nodos las propiedades de la malla dependen únicamente de la longitud de cadena  $l$  y del número de cadenas  $N_c$ .

### 3.2.2 Características de una malla hexagonal con enlaces $t$ no homogéneos

Para seguir profundizado en el análisis que se acaba de hacer, y para ver cómo se va creando la correlación entre los elementos del bloque, se ha decidido utilizar una serie de diseños, donde determinados parámetros de salto con valor  $t_0$  van a aislar a los elementos del bloque (se recuerda  $B = \{l, N_c \cdot l\}$ ).

Se va a partir de una malla compuesta por 4 cadenas ( $N_c = 4$ ) de longitud 6 ( $l = 6$ ) como el de la Figura 4 y la Figura 6. Para esta malla, se ve claramente cómo para aislar los elementos  $\{6,24\}$  del resto del sistema, hay que modificar el parámetro de salto de los elementos  $\{4,5\}$ ,  $\{5,11\}$ ,  $\{22,23\}$  y  $\{17,23\}$ . Dicho esto, en los análisis de las secciones sucesivas de este trabajo, se va a ver cómo varían las principales características de la malla variando dichos parámetros de salto  $t_0$  por medio de diferentes diseños que se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3: Ilustración de una malla con una longitud de cadenas  $l=6$  y un número de cadenas  $N_c=4$ . Los diferentes diseños corresponden a configuraciones de enlaces diferentes, donde los nodos de color rojo están aislados debido a los enlaces  $t_0$  (enlaces negros). El resto de los parámetros de salto toman el valor  $t = 1$



De manera adicional y para profundizar en este análisis, se va a intentar aislar una cadena en el sistema para luego comparar las propiedades que tiene dicha cadena con el resto del sistema. Para ello se van a utilizar una serie de enlaces con valor  $t_1$  colocados de tal manera que se consiga dicho objetivo. La Figura 16 muestra con líneas rojas dos tipos de cadena que se podrían aislar, representándose los enlaces  $t_1$  en color verde.

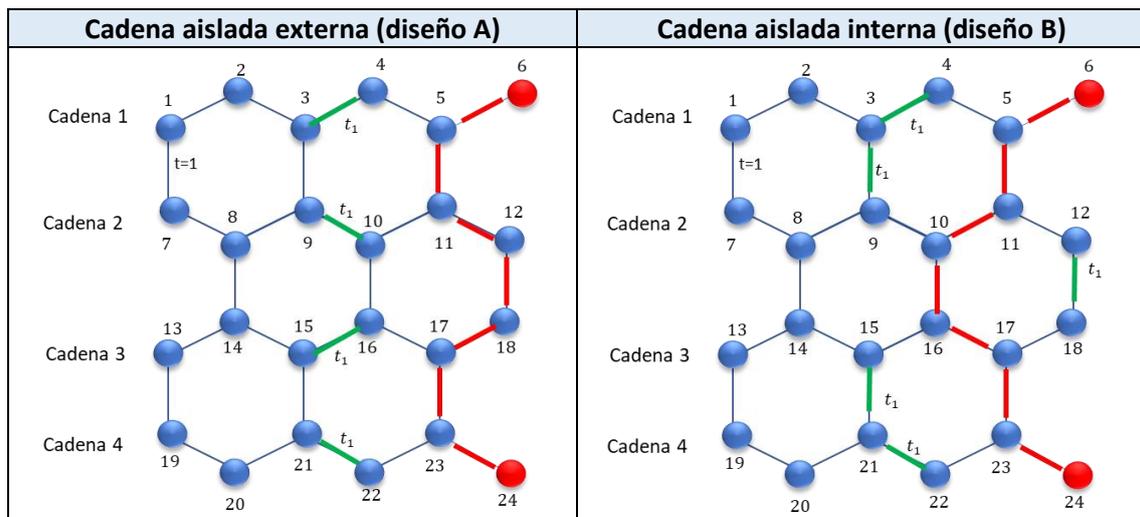


Figura 16: Cadenas aisladas de la malla (líneas rojas) usando unos enlaces  $t_1$  (enlaces verdes). Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$

A la vista de la Figura 16, se entiende que la correlación del bloque rojo  $B = \{6,24\}$  para un valor de  $t_1$  un orden de magnitud superior al del resto de los enlaces  $t$  ( $t = 1$ ), podría asemejarse a la correlación de los extremos de una cadena de longitud 8 con todos los parámetros de salto  $t$  iguales, como se explica en el Anexo I de este trabajo. Se entiende que esto es así ya que la cadena se ha desacoplado de la malla y por tanto tiene un comportamiento independiente al del resto de la malla.

Recopilando lo dicho anteriormente y como resumen para el lector, se señala que van a existir dos conjuntos de enlaces que se van a modificar y con los que se va a intentar aislar diferentes elementos dentro de la malla. Por un lado, con los enlaces  $t_0$  se pretende aislar al bloque formado por los elementos huérfanos de la malla  $B = \{l, l \cdot N_c\}$ . Por otro lado, con los enlaces  $t_1$  se pretende aislar dos cadenas diferentes dentro de la malla (la cadena externa (diseño A) y la interna (diseño B)). Cabe mencionar que los elementos del bloque  $B = \{l, l \cdot N_c\}$  también forman parte de estas cadenas como se puede ver en la Figura 16. El resto de los enlaces de la malla van a ser idénticos entre sí e iguales a la unidad ( $t = 1$ ).

### 3.2.2.1 Sistema con cadenas aisladas dentro de la malla hexagonal

Para profundizar más en las características de estas cadenas, supuestamente aisladas del resto del sistema, ahora se va a comparar la correlación del bloque  $B = \{l, l \cdot N_c\}$  con respecto a la de un bloque equivalente, pero esta vez de una cadena unidimensional  $B = \{1, L\}$  como las que se estudian en [8, 9] o como la que se analiza en el Anexo I de este trabajo.

Tabla 4: Correlación de bloque  $B = \{6,24\}$  de una malla hexagonal como la del diseño A y B de la Figura 16

	$t_1$	$ C^B $
Cadena aislada externa (diseño A, $l = 6, N_c = 4$ )	10	0.117
Cadena aislada externa (diseño A, $l = 6, N_c = 4$ )	100	0.115
Cadena aislada interna (diseño B, $l = 6, N_c = 4$ )	10	0.258
Cadena aislada interna (diseño B, $l = 6, N_c = 4$ )	100	0.259

Tabla 5: correlación entre extremos de una cadena unidimensional de diferentes longitudes  $B = \{1, L\}$ , con todos los parámetros de salto  $t$  iguales (Anexo I)

	$t$	$ C^B $
Cadena unidimensional $L = 10$	1	$9.28 \cdot 10^{-2}$
Cadena unidimensional $L = 8$	1	0.115
Cadena unidimensional $L = 6$	1	0.151

Tras estos primeros resultados preliminares llama la atención que el sistema con la cadena aislada externa (diseño A) es el que presenta un valor de la correlación de bloque similar a la que se ve entre los extremos de una cadena unidimensional de la misma longitud que la cadena que se ha aislado ( $L = 8$ ).

Se observa también que, para un mismo tipo de cadena aislada, basta con escoger una intensidad de los enlaces  $t_1$  un orden de magnitud superior al del resto de enlaces de la malla  $t$  para obtener el efecto deseado. Seguir aumentado la intensidad de los enlaces  $t_1$  apenas tiene efecto en la correlación.

Es muy llamativo ver que el valor obtenido para el sistema con la cadena aislada interna (diseño B) es aproximadamente el doble que el de la cadena aislada externa (diseño A) cuando aparentemente en ambos sistemas parece que se podría desacoplar una cadena

unidimensional. Este resultado ya indica que las propiedades de la cadena del diseño B no van a ser las de una cadena unidimensional.

Para comparar ambos sistemas con un poco más en profundidad, se va a utilizar ahora la matriz de correlación de la malla.

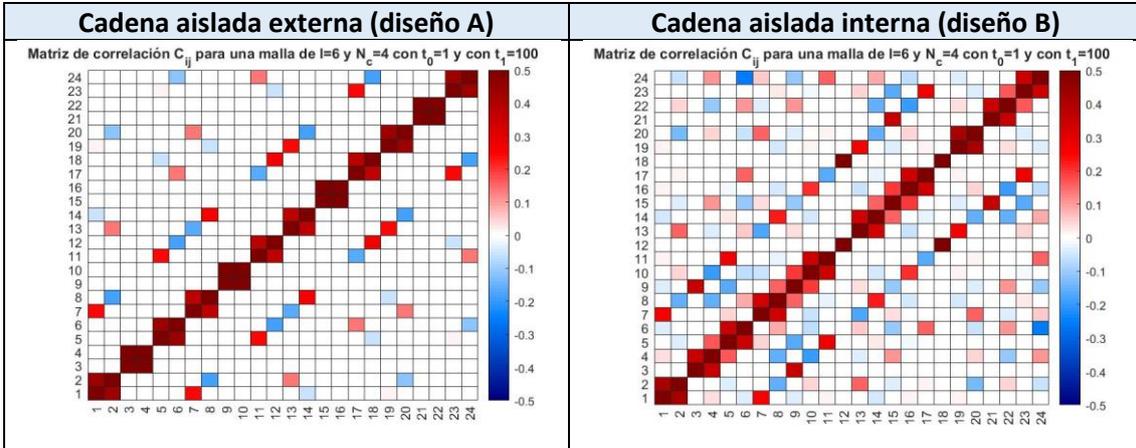


Figura 17: Matriz de correlación para el diseño A (izquierda) y para el diseño B (derecha) como los de la Figura 16

A la vista de la matriz de correlación de la Figura 17, el sistema con la cadena aislada externa (diseño A) parece que efectivamente consigue desacoplar una cadena (de longitud  $L = 8$ ) del resto de la malla. Esto es fácilmente observable al comprobar que los elementos que forman la cadena dentro de la malla no interactúan con el resto de los elementos de la malla (por ejemplo, mirando la línea 6). Además, la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  es la misma que la correlación entre extremos de una cadena unidimensional de longitud 8, como se veía en la Tabla 4 y la Tabla 5. Cabe apuntar que no solo la correlación entre los extremos es igual, sino que la correlación entre el resto de los elementos de la cadena que se ha aislado de la malla hexagonal coincide con las correlaciones de una cadena unidimensional, tal y como se puede comprobar en la Tabla 6.

Como se adelantaba anteriormente, parece que la cadena del diseño B no se llega a desacoplar del resto de la malla. Nuevamente si se observa la línea 6 de la Figura 16 se aprecia que existen correlaciones entre dicho nodo con el resto de los nodos de la malla.

Tabla 6: Correlación de bloques formados por distintos elementos para los sistemas con una cadena aislada externa, una cadena aislada interna y para una cadena unidimensional

	$ C_{diseño A}^B $		$ C_{diseño B}^B $		$ C_{cadena 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	0.117	$B = \{6,24\}$	0.258	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	0.132	$B = \{6,17\}$	0.154	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,12\}$	0.183	$B = \{6,10\}$	$6.08 \cdot 10^{-2}$	$B = \{1,4\}$	0.184

La Tabla 6 vuelve a mostrar cómo el sistema con la cadena aislada interna (diseño B) no tiene ninguna similitud con la cadena unidimensional.

Adicionalmente se puede ver, al analizar en detalle la matriz de correlación del sistema con la cadena aislada externa (diseño A) de la Figura 17, que no sólo existe 1, sino 2 cadenas que se han separado del resto del sistema. La Figura 18 muestra lo que se acaba de decir, viéndose 2 cadenas aisladas del resto del sistema para ambos casos (en color rojo).

Cadena aislada externa (diseño A)	Cadena aislada interna (diseño B)
-----------------------------------	-----------------------------------

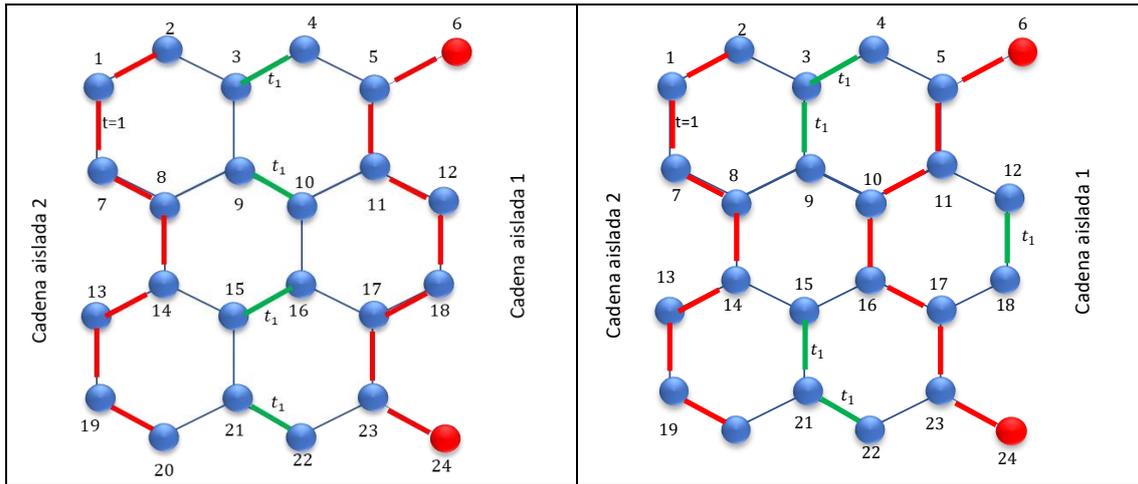


Figura 18: Cadenas separadas del resto del sistema (rojo) por medio de los enlaces  $t_1$  (verde). Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$

La cadena aislada 2 (2-1-7-8-14-13-19-20) de la Figura 18 es idéntica en ambos sistemas, con la única diferencia de que dichas cadenas se aíslan de manera diferente en cada sistema, es decir, la posición de los enlaces  $t_1$  utilizados para aislar las cadenas son colocados de maneras diferentes en el diseño A y el diseño B.

En la Tabla 7 se muestran los valores numéricos de la correlación para varios bloques formados por distintos elementos de la denominada cadena aislada 2 en la Figura 18. Al contrario de lo que ocurría anteriormente, parece que las correlaciones de los elementos de estas cadenas se asemejan bastante a los de una cadena unidimensional. Cabe mencionar nuevamente que existen mayores diferencias entre esta segunda cadena aislada del diseño B con la cadena unidimensional, lo que lleva a indicar que puede existir algún efecto topológico del resto de la malla que impide el completo desacople de esta cadena.

Tabla 7: Correlación de bloques formados por distintos elementos para las segundas cadenas aisladas (Figura 18) de los sistemas con una cadena aislada externa, una cadena aislada interna y para una cadena unidimensional

	$ C_{\text{diseño A}}^B $		$ C_{\text{diseño B}}^B $		$ C_{\text{cadena 1D}}^B $
$B = \{2,20\}$	0.115	$B = \{2,20\}$	0.135	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{2,13\}$	0.132	$B = \{2,13\}$	0.148	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{2,8\}$	0.182	$B = \{2,8\}$	0.162	$B = \{1,4\}$	0.184

Hasta ahora se ha visto que para el mismo sistema se pueden colocar una serie de enlaces con valor  $t_1$  mayores que el resto de los enlaces  $t$ , que consigan aislar una serie de cadenas dentro de la malla. Según la configuración de enlaces  $t_1$  que se establezca, se puede obtener un sistema en la que existen dos cadenas desacopladas en el borde de la malla (lo que se ha llamado en este trabajo cadena aislada externa o diseño A), o también se puede obtener otro sistema en la que existe una cadena aislada en uno de los bordes de la malla, y una cadena aislada que “visualmente” se introduce en el interior de la malla (lo que se ha llamado en el trabajo cadena aislada interna o diseño B).

Adicionalmente se ha comprobado como para el diseño A dichas cadenas aisladas se encuentran desacopladas del resto del sistema ya que presentan las mismas propiedades que una cadena unidimensional de la misma longitud. Por otra parte, eso no ocurre en el diseño B en donde se entiende que tiene que existir algún efecto de la malla que impide que las cadenas se lleguen a desacoplar completamente.

En la siguiente sección se va a analizar con un poco más de detalle dicho diseño B

3.2.2.1.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna)

A continuación, se quiere profundizar en este diseño B o sistema con una cadena aislada interna. Lo que se persigue es buscar las condiciones del sistema que hacen que la cadena se consiga desacoplar finalmente del resto de la malla. Para ello se va a ir un paso más allá y se van a establecer unos enlaces  $t_2$  con una intensidad menor que el resto de los enlaces ( $t_2 < t = 1$ ) en determinadas posiciones para así conseguir aislar de manera más efectiva la cadena que se persigue desacoplar. La Figura 19 esquematiza el sistema junto con los enlaces que se acaban de describir.

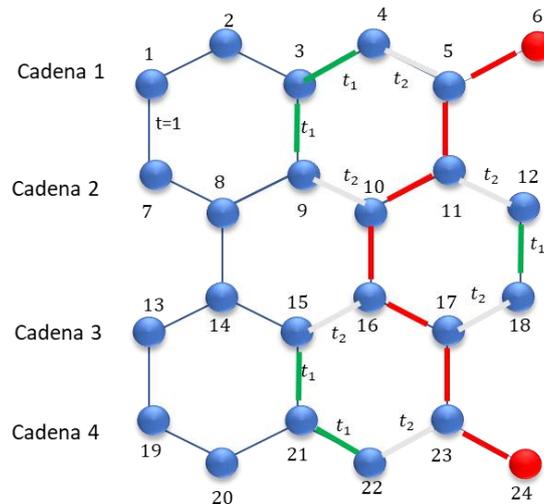


Figura 19: Diseño con la cadena aislada interna o diseño B ligeramente modificado con los enlaces  $t_2$  (blanco). Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  (verde) y  $t_2$  (blanco)

En la Tabla 8 se ha calculado los valores numéricos de la correlación de un bloque compuesto por distintos elementos de la cadena que se está intentando aislar.

Tabla 8: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{diseño B}^B $		$ C_{cadena 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.118	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.132	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.181	$B = \{1,4\}$	0.184

A la vista de estos resultados se observa que, efectivamente, se ha conseguido desacoplar la cadena por medio de estos enlaces  $t_2$ .

Ahora cabría preguntarse, bajo qué intensidades de los enlaces  $t_1$  y  $t_2$  se produce el desacople de la cadena. Para realizar esta tarea se han calculado las correlaciones para 4 opciones diferentes, pero que a primera vista se podrían considerar equivalentes. Los resultados se muestran en la Tabla 9, Tabla 10, Tabla 11 y Tabla 12.

Tabla 9: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{diseño B}^B $		$ C_{cadena 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	10	1	0.258	$B = \{1,8\}$	0.115

$B = \{6,17\}$	10	1	0.154	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	1	$6.08 \cdot 10^{-2}$	$B = \{1,4\}$	0.184

Tabla 10: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 1$  y  $t_1 = 100$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	100	1	0.259	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	100	1	0.156	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	100	1	$6.71 \cdot 10^{-2}$	$B = \{1,4\}$	0.184

Tabla 11: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 1$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	1	0.1	0.118	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	1	0.1	0.131	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	1	0.1	0.181	$B = \{1,4\}$	0.184

Tabla 12: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.01$  y  $t_1 = 1$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	1	0.01	0.115	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	1	0.01	0.132	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	1	0.01	0.184	$B = \{1,4\}$	0.184

Tras estos resultados, se comprueba que en general, los enlaces  $t_2$  tienen un peso mucho mayor que los enlaces  $t_1$  a la hora de desacoplar la cadena.

Tras ver este comportamiento, se podría pensar que del conjunto de 6 enlaces  $t_2$ , pueden existir algunos con mayor peso a la hora de desacoplar la cadena. Para comprobarlo se van a analizar 3 variaciones distintas de dicho sistema. Para mayor comprensión del lector se va a incluir una imagen de la configuración junto con la tabla de resultados.

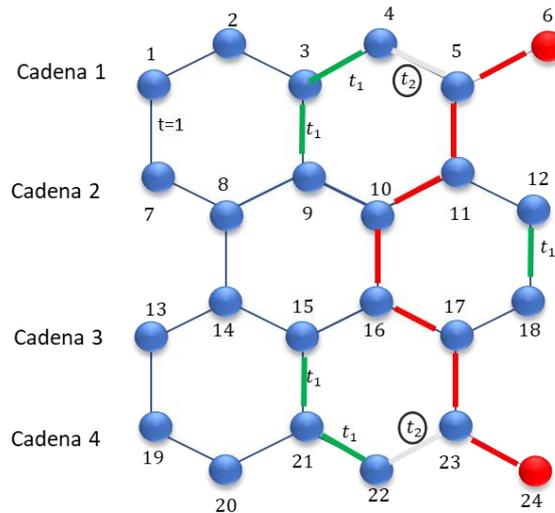


Figura 20: Opción 1 con enlaces  $t_2 = 0.1$  entre los elementos {4,5} y {22, 23}. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  (verde) y  $t_2$  (blaco)

Tabla 13: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.154	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.162	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.123	$B = \{1,4\}$	0.184

Parece que para el caso de la Figura 20, se obtienen unos valores de correlación próximos a los que podría presentar en una cadena unidimensional como se ve en la Tabla 13.

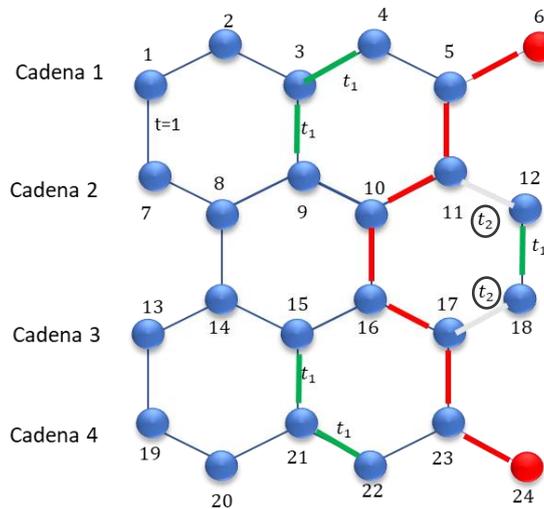


Figura 21: Opción 2 con enlaces  $t_2 = 0.1$  entre los elementos {11, 12} y {17, 18}. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  (verde) y  $t_2$  (blaco)

Tabla 14: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.262	$B = \{1,8\}$	0.115

$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.154	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	$6.73 \cdot 10^{-2}$	$B = \{1,4\}$	0.184

En el segundo ejemplo de la Figura 21, los valores que se ven en la Tabla 14 presentan una gran diferencia con los de una cadena unidimensional, de hecho lo que se observa es que esta diferencia es ligeramente mayor que la del sistema de partida original de la Tabla 6.

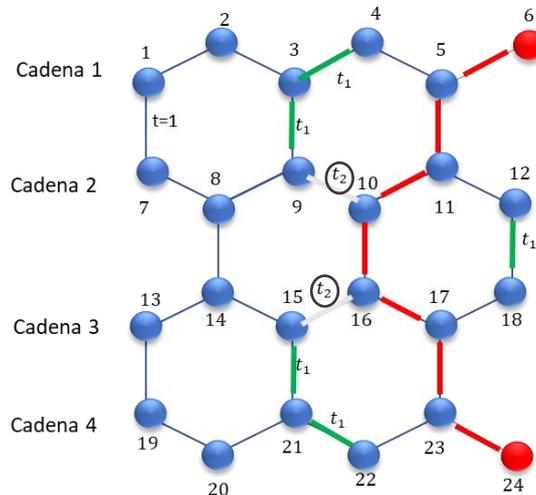


Figura 22: Opción 3 con enlaces  $t_2 = 0.1$  entre los elementos  $\{9, 10\}$  y  $\{15, 16\}$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  (verde) y  $t_2$  (blanco)

Tabla 15: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $	$ C_{\text{cadena 1D}}^B $	
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.206	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.110	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.136	$B = \{1,4\}$	0.184

Finalmente, en este último ejemplo de la Figura 22, las diferencias entre las correlaciones de la Tabla 15 se encuentra a mitad de camino que los casos analizados anteriormente.

Se puede concluir que son los enlaces  $t_2$  colocados en las posiciones  $\{4, 5\}$  y  $\{22, 23\}$  seguidos de los enlaces  $\{9, 10\}$  y  $\{15, 16\}$  como los de la Figura 20 y Figura 22 respectivamente, los que presentan mayor peso a la hora de aislar efectivamente la cadena, o por el contrario, si no están presentes, contribuyen a acoplar la cadena al resto de la malla.

Se entiende que la topología, o la manera en la que se ha decidido aislar la cadena es fundamental a la hora de determinar las características finales del sistema. Es muy importante destacar que mientras que en diseño A los enlaces fuertes  $t_1$  (en color verde) unían pares (dos nodos) del sistema, en el diseño B los enlaces fuertes se han colocado de tal manera que unen 3 nodos del sistema con un enlace de la misma intensidad  $t_1$  (nodos 4-3-9 ó 15-21-22). Explicado desde otra perspectiva se tiene que, en el diseño A los pares unidos con un enlace fuerte  $t_1$  comparten un electrón que queda efectivamente aislado del sistema, mientras que en el diseño B los tríos unidos con el enlace fuerte  $t_1$  van a compartir 1.5 electrones debido a la quiralidad del sistema. El hecho de que dichos tríos no compartan un número entero de electrones implica que no se lleguen a aislar los elementos por completo y, por lo tanto, exista una mayor movilidad de electrones entre los nodos.

Si se observa de nuevo las matrices de correlación de la Figura 23 se puede ver en los recuadros resaltados en color morado lo dicho en el párrafo anterior. En el diseño A los nodos unidos con un enlace  $t_1$  están efectivamente aislados, cosa que no ocurre en el diseño B en donde se observa correlación de dichos nodos con sus vecinos.

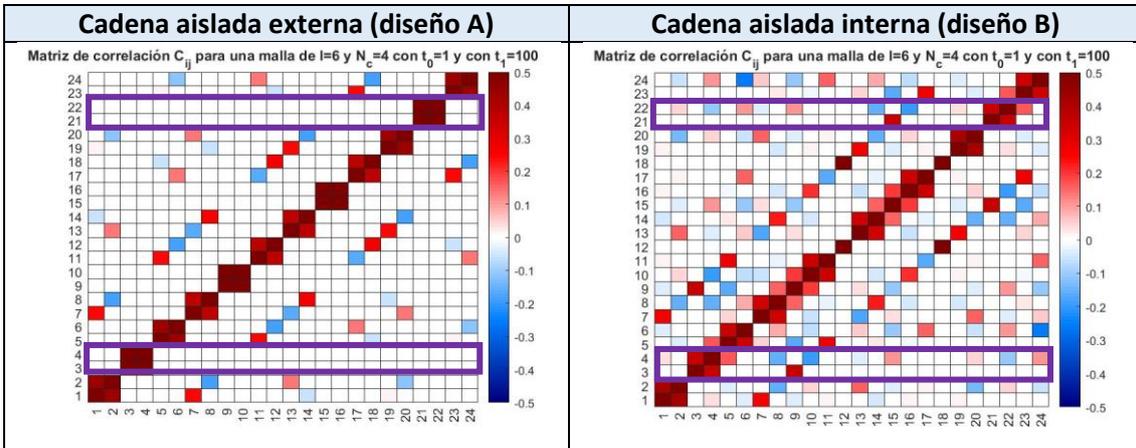


Figura 23: Detalles de la matriz de correlación para el diseño A (izquierda) y para el diseño B (derecha) como los de la Figura 16

Para finalizar este análisis se va a aislar de nuevo la cadena con el conjunto de enlaces que se presenta gráficamente en la Figura 24 para confirmar lo dicho anteriormente.

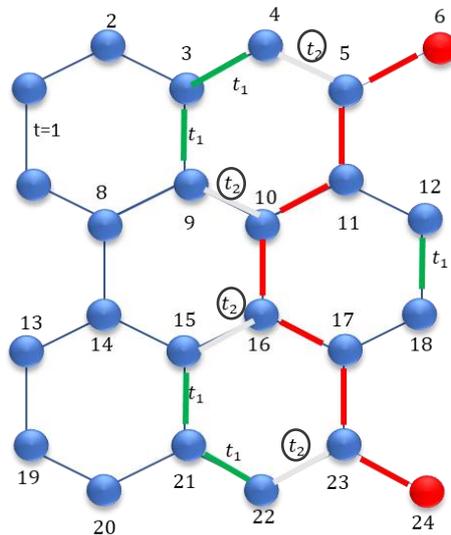


Figura 24: Opción 4 con enlaces  $t_2 = 0.1$  entre los elementos  $\{4, 5\}$ ,  $\{9, 10\}$ ,  $\{15, 16\}$  y  $\{22, 23\}$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  (verde) y  $t_2$  (blanco)

Tabla 16: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño B}}^B $	$ C_{\text{cadena 1D}}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.115	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.132	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.175	0.184

Efectivamente, a la vista de los resultados de la Tabla 16 este conjunto de enlaces  $t_2$  aíslan completamente a la cadena del diseño B.

### 3.2.2.2 Análisis del diseño 1

Como se muestra en la imagen de la izquierda de la Tabla 3, para esta primera opción se va a analizar la malla y las características del bloque formado entre los elementos de color rojo  $B = \{6,24\}$  modificando para ello, los dos enlaces  $t_0$  entre los elementos  $\{4,5\}$  y  $\{22,23\}$ .

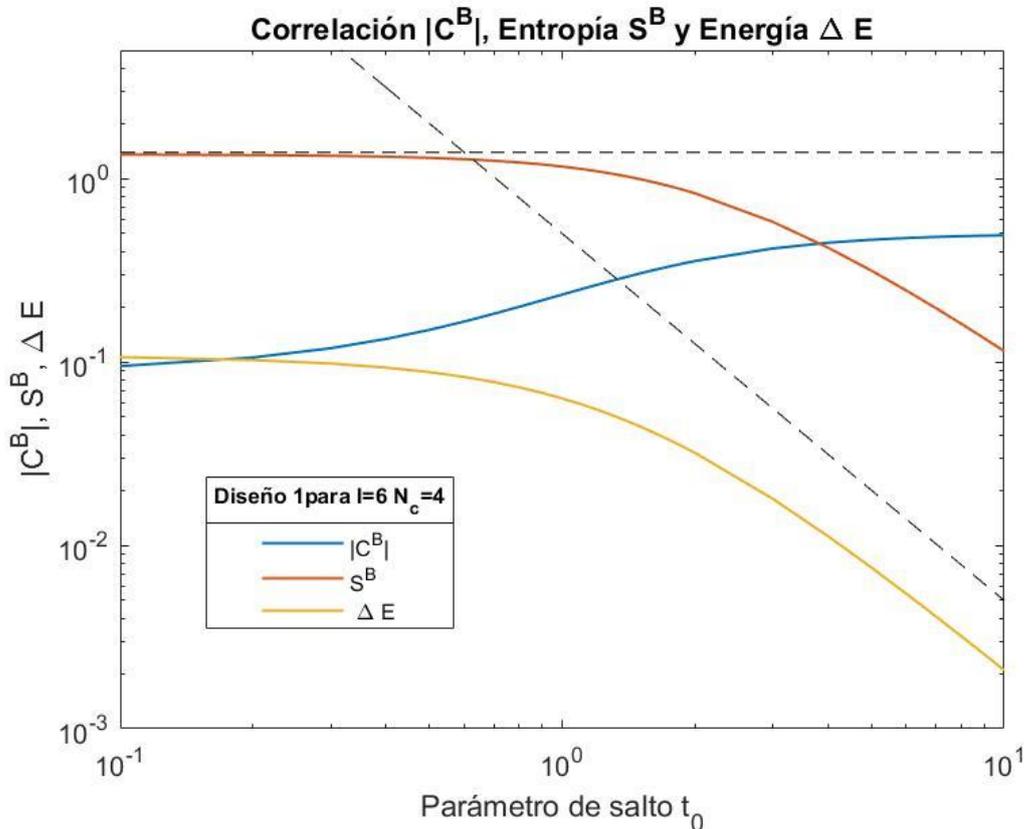


Figura 25: Correlación, entropía y salto de energía para la malla del diseño 1 ( $l = 6, N_c = 4$ ). Todos los parámetros de salto toman el valor  $t = 1$  excepto  $t_0$  que es variable

En la Figura 25 se observa cómo inicialmente existe una pequeña correlación entre los elementos del bloque ( $B = \{6,24\}$ ) del orden de  $10^{-1}$ , lo que de alguna manera indica que en este diseño el bloque no se encuentra completamente aislado. Por otra parte, es cierto que al aumentar el valor del parámetro de salto  $t_0$ , la correlación del bloque aumenta hasta saturar en un valor de  $|C^B| \sim 0.5$  para  $t_0 \rightarrow \infty$ .

Por otra parte, la entropía parte de un valor próximo al máximo  $S^B = 2 \log(2)$  [12] para valores de  $t_0$  bajos. A medida que aumenta  $t_0$  y a partir de  $t_0 = 1$ , la entropía se va reduciendo hasta hacerse prácticamente nula para valores de  $t_0$  elevados, lo que indica que efectivamente el bloque B se ha separado del resto del sistema.

Finalmente, el salto de energía decrece a un ritmo  $\Delta E \sim t_0^{-2}$  a partir de  $t_0 = 1$  (este ritmo de decrecimiento se puede justificar por medio de la ecuación (30) de la sección 2.1.1), mostrando que la separación de los niveles de energía es cada vez más pequeña y reduciéndose por lo tanto la estabilidad de dicha correlación según se explica en la sección 2.2.1.

Para seguir profundizando en el análisis de esta malla se va a aumentar el valor de algunos enlaces del sistema, como se indicaba en la Figura 16, para así conseguir aislar una cadena. La Figura 26 muestra el esquema general de ambos subdiseños.

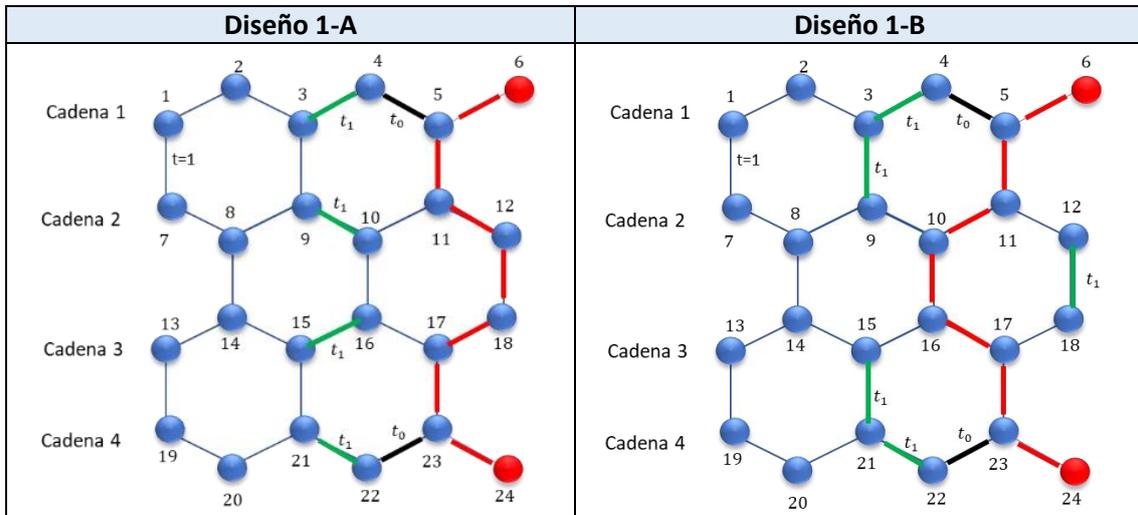


Figura 26: Esquema de dos cadenas (rojo) que conectan los elementos del bloque {6, 24}, tras amplificar ciertos enlaces  $t_1$  (verde) en la malla del diseño 1. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

En la Tabla 17 se resume las distintas intensidades de los diferentes parámetros de salto en función del diseño que se van a utilizar en los cálculos posteriores.

Tabla 17: Intensidad de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

	$t_0$	$t_1$	Resto de enlaces $t$
Diseño 1	[0.1, 10]	1	1
Diseño 1-A	[0.1, 10]	10	1
Diseño 1-B	[0.1, 10]	10	1

### 3.2.2.2.1 Análisis del subdiseño 1-A

Si se compara la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  del diseño 1-A con la correlación del bloque del diseño 1 original, en función de la intensidad del enlace  $t_0$ , se obtienen los siguientes resultados.

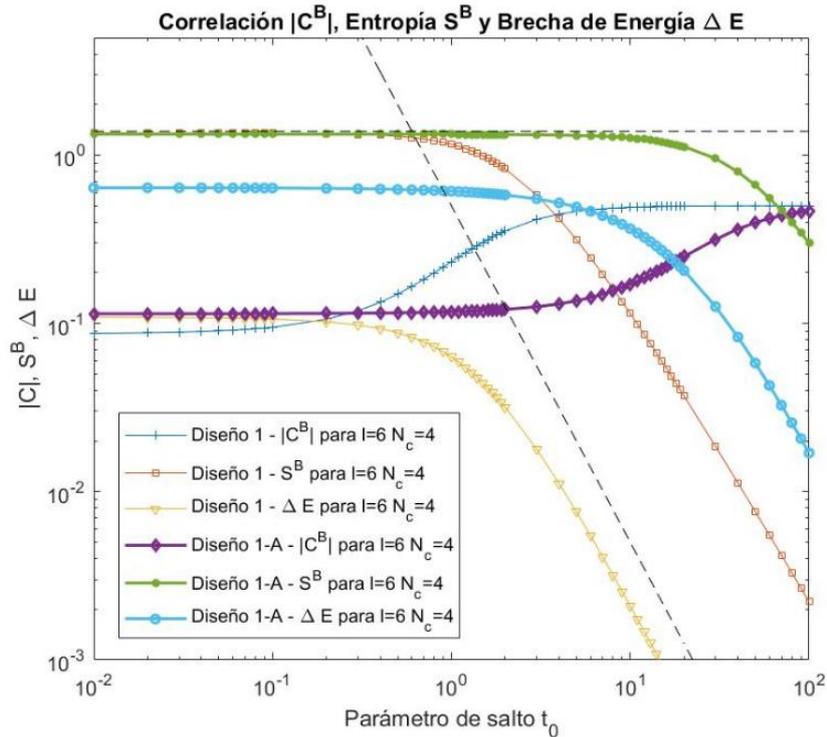


Figura 27: Comparación de correlación, entropía y brecha de energía entre el diseño 1 y el diseño 1-A

Tabla 18: Comparación de parámetro de salto, entropía y brecha energía entre el diseño 1 y el diseño 1-A para un mismo valor de la correlación de bloque

Diseño ( $l=6, N_c=4$ )	$ C^B $	$t_0$	$ S^B $	$ \Delta E $
Diseño 1	0.32	1.6	0.96	$4.1 \cdot 10^{-2}$
Diseño 1-A	0.32	30	0.96	0.12

Como se puede observar gráficamente en la Figura 27, y más claramente en la Tabla 18, tanto la correlación máxima como el inicio del descenso de la entropía, se ha desplazado hacia la derecha en el diseño 1-A ya que los parámetros de salto  $t_1$  hacen que sea necesario un mayor valor de  $t_0$  para desacoplar el bloque.

Más llamativo es el comportamiento de la energía, en donde se observa que se necesita mayor energía en el diseño 1-A para pasar al siguiente nivel de energía. Es decir, modificando ligeramente algunos de los parámetros de salto y consiguiendo desacoplar una cadena del resto del sistema se consigue una mayor estabilidad del estado fundamental en el sistema global.

Cabría pensar que, si variamos ligeramente el diseño 1-A, utilizando ahora cadenas de mayor longitud (Figura 28), la correlación inicial para valores de  $t_0$  bajos en comparación con  $t_1$  no variaría, pues al fin y al cabo la cadena va a seguir desacoplada del resto del sistema. Esto se verifica en la Figura 29

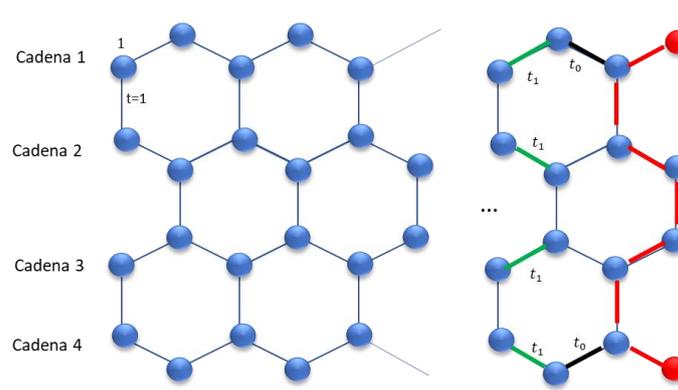


Figura 28: Malla del diseño 1-A formada por 4 cadenas de longitud  $l$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

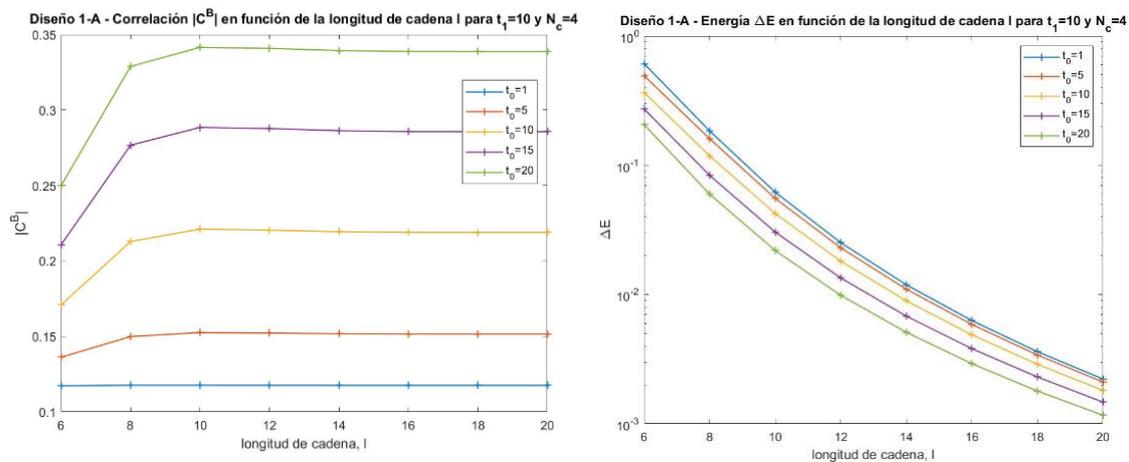


Figura 29: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 1-A (Figura 28) con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

En la Figura 29 es muy llamativo ver como cuando  $t_1 \gg t_0$ , es decir, cuando la cadena esta desacoplada del resto del sistema, la correlación entre extremos no cambia y se mantiene constante  $|C^B| \sim 0.117$  e idéntica a la correlación entre extremos de una cadena unidimensional. A medida que  $t_0$  va aumentando, la cadena se va acoplando al resto del sistema y por lo tanto la correlación va cambiando en función de la longitud de la cadena, influyendo por tanto la topología de la malla. De la misma manera al aumentar  $t_0$ , el bloque  $B = \{l, l \cdot N_c\}$  se va desacoplando y por lo tanto la correlación va aumentando.

Hacer más grande  $t_0$  implica también una disminución de la brecha de energía entre el estado fundamental y el primer estado excitado. En definitiva, el enlace que se crea entre los elementos del bloque es más débil.

Si se realiza ahora el mismo ejercicio, pero aumentando el número de cadenas y dejando fija su longitud, como se muestra en Figura 30, se obtienen los resultados de la Figura 31.

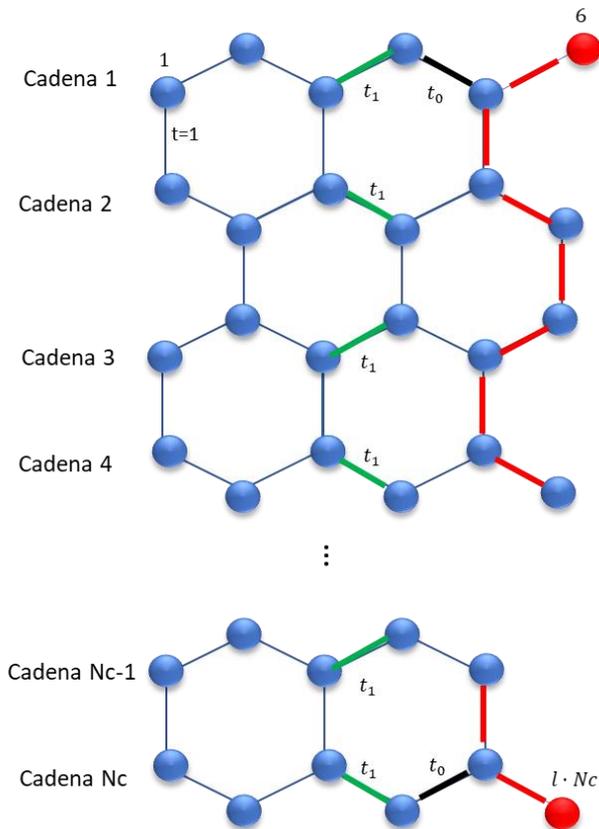


Figura 30: Malla del diseño 1-A formada por  $N_c$  cadenas de longitud 6. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

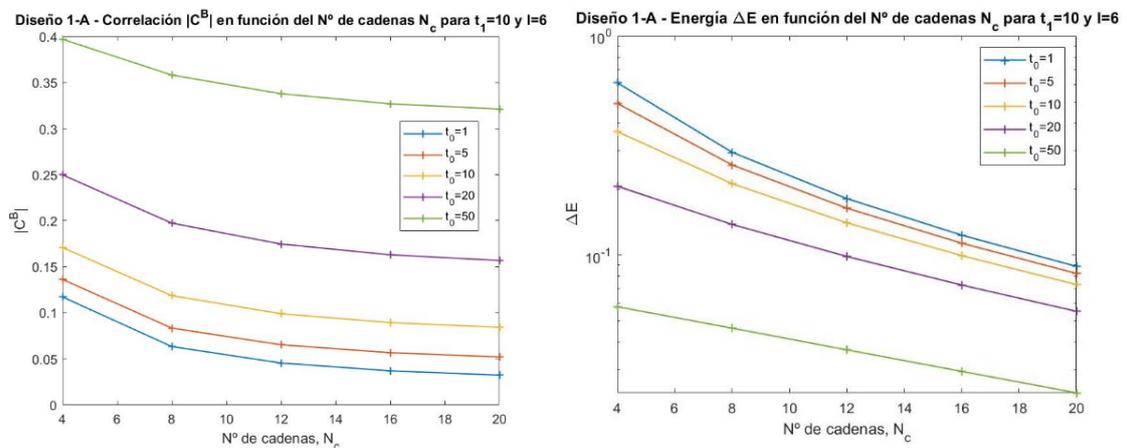


Figura 31: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 1-A (Figura 30) con una longitud de cadena 6 fija, con número de cadenas variables y para diferentes  $t_0$

Como era de esperar, cuando  $t_1 \gg t_0$  existe una cadena desacoplada del resto del sistema que presenta una correlación de bloque idéntica a la que tendría los extremos de una cadena unidimensional del mismo tamaño. Como se observaba en el caso anterior, al aumentar el parámetro  $t_0$ , la cadena inicial deja de estar desacoplada, pero al mismo tiempo es el bloque  $B = \{l, l \cdot N_c\}$  el que inicia el desacople como se observa en la correlación de la Figura 31. Como es de esperar, un mayor número de cadenas implica una menor correlación y también una estabilidad peor del enlace entre los elementos del bloque.

Es de destacar que la energía decrece a un ritmo menor que en el caso anterior (Figura 28 y Figura 29) debido a que al añadir más cadenas lo que se está haciendo es alargar la cadena

unidimensional que se encuentra aislada o parcialmente aislada (dependiendo del valor de  $t_0$ ). El mayor ritmo de decrecimiento de la energía que se ve en la Figura 29 es debido a que al alargar las cadenas se alarga la malla, quedándose la cadena unidimensional inalterada.

Es también muy llamativa la representación de la brecha de energía en donde se ve que a medida que se incrementa  $t_0$  la curvatura de las curvas se va reduciendo. Se puede decir que el descenso del salto de energía, cuando  $t_0 \gg t_1$ , es más rápido, ya que es en este caso cuando se forma el enlace entre los elementos del bloque.

### 3.2.2.2.2 Análisis del subdiseño 1-B

A continuación, se va a profundizar en el diseño 1-B (cadena aislada interna) que se ha vuelto a representar en la Figura 32. Se recuerda que la intensidad de los enlaces se proporcionó en la Tabla 17.

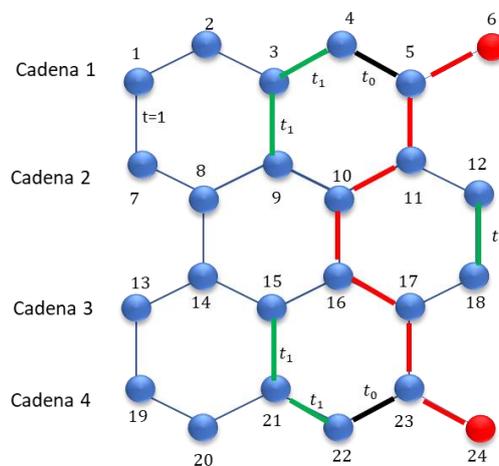


Figura 32: Diseño 1-B. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

Aquí se vuelve a observar una cadena (dibujada en rojo en la Figura 32) que podría estar desacoplada del resto del sistema, aunque ya se ha visto en los análisis hechos en la sección anterior y por medio de la matriz de correlación de la Figura 17, que la cadena dibujada en rojo no comparte las propiedades de una cadena unidimensional.

Se ha visto como para este diseño existe un efecto del resto de la malla que impide que la cadena supuestamente aislada (de color rojo en la Figura 32) se desacople de manera efectiva, siendo los enlaces  $\{4,5\}$ ,  $\{22, 23\}$ ,  $\{9, 10\}$  y  $\{15, 16\}$  los que tienen un mayor peso al unir la cadena al resto del sistema.

Si ahora se modifica el valor de  $t_0$ , y se compara la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  del diseño 1-B con la correlación del bloque del diseño original sin enlaces  $t_1$ , se obtienen los siguientes resultados.

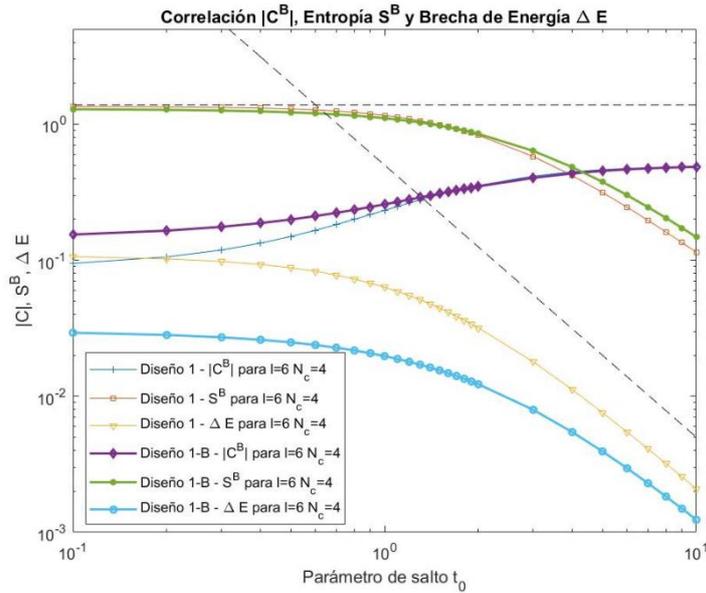


Figura 33: Comparación de correlación entropía y brecha de energía entre el diseño 1 y el diseño 1-B

En la Figura 33 se observa que a nivel correlación existen pocas diferencias entre el diseño 1 y el diseño 1-B (con enlaces  $t_1 = 10$ ), nuevamente, esto es indicativo de que ninguna de las cadenas de las que se hablaba anteriormente se llegan a desacoplar del resto de la malla. A nivel energético el diseño 1-B es desfavorable comparado con el diseño 1, aunque es cierto que para  $t_0$  grandes, y por tanto cuando el bloque se desacopla del resto de la malla, esta energía tiende a converger en ambos mallados, indicando similitudes en su comportamiento. Esto es indicativo de que a nivel energético el desacople del bloque  $B = \{6,24\}$  tiene un peso muy importante en ambas mallas.

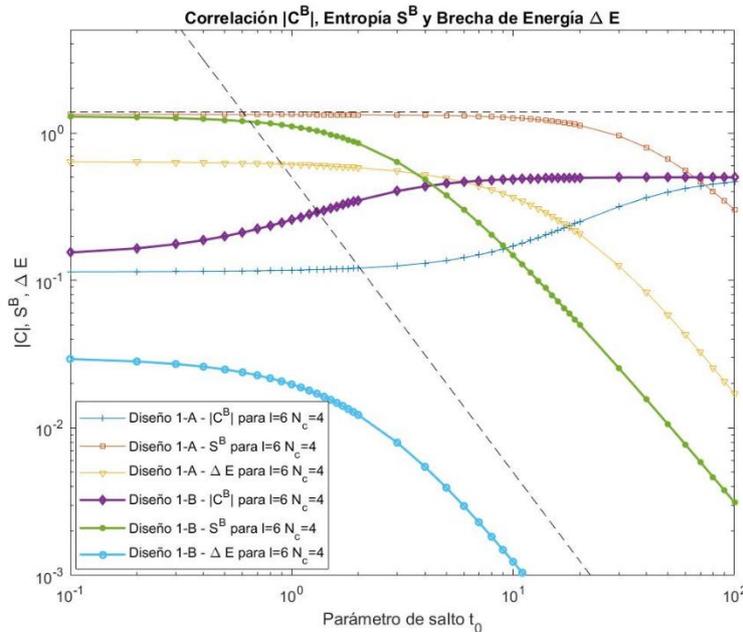


Figura 34: Comparación de correlación entropía y brecha de energía entre el diseño 1-A y el diseño 1-B

En la Figura 34 se comparan las mallas del diseño 1-A y la del diseño 1-B. Solamente se quiere resaltar la gran diferencia energética entre ambos diseños, en donde el diseño 1-A va a ser el más estable por presentar una cadena desacoplada.

Cabría pensar que, si se varía ligeramente el diseño 1-B, utilizando ahora cadenas de mayor longitud (Figura 35), la correlación inicial no variaría para valores de  $t_0$  bajos en comparación con  $t_1$ , pues al fin y al cabo la cadena va a seguir teniendo la misma forma.

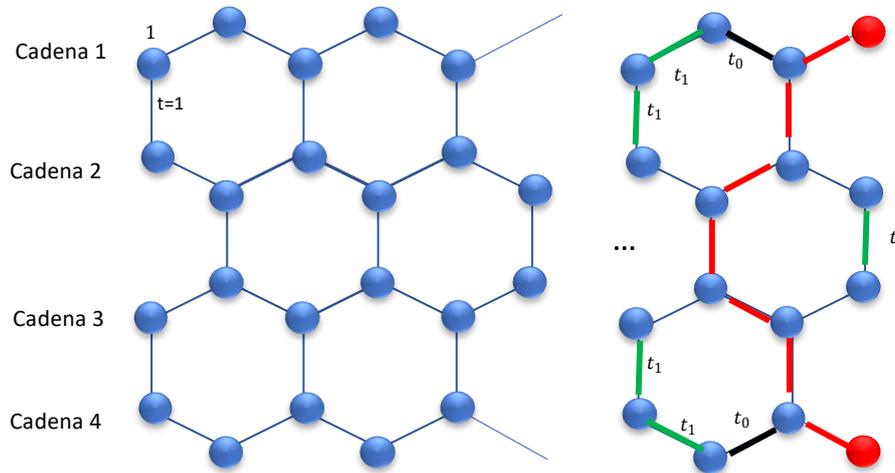


Figura 35: Malla del diseño 1-B formada por 4 cadenas de longitud  $l$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

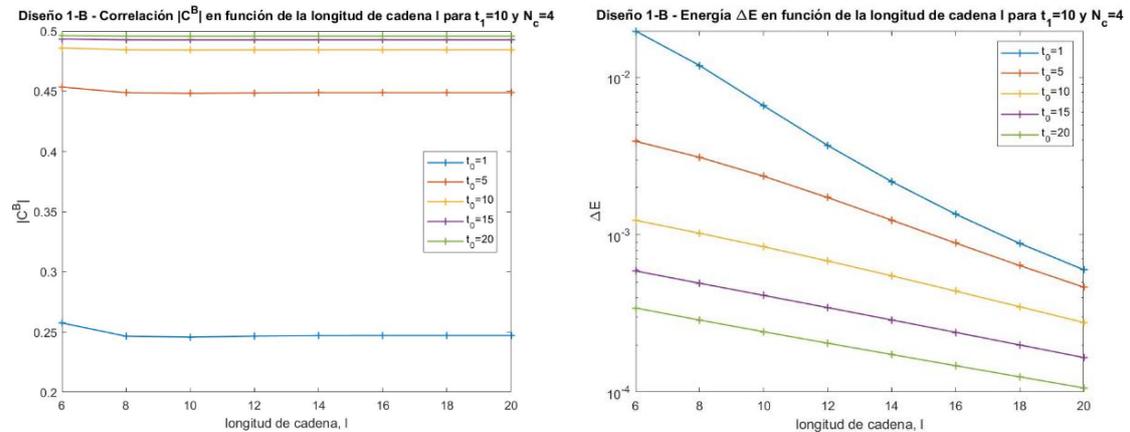


Figura 36: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 1-B con un número de cadenas fijo e igual a 4, con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

En efecto, en la Figura 36 se comprueba que utilizar cadenas de longitudes mayores no afecta a la correlación del bloque, manteniéndose prácticamente constante para cualquier valor de  $t_0$ . Como se ha visto antes, a medida que  $t_0$  va creciendo, el bloque se desacopla del resto de la malla y por lo tanto la correlación es mayor. Por otra parte, como se viene observando, mayores longitudes dan lugar a sistemas con un estado fundamental más inestable.

Si ahora se añaden cadenas al sistema, como se representa en la Figura 37, se obtienen los resultados que se muestran en la Figura 38.

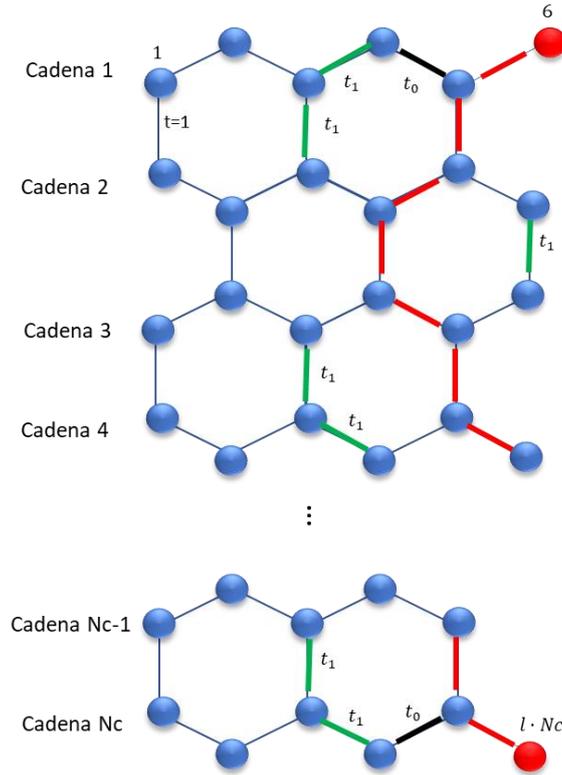


Figura 37: Malla del diseño 1-B formada por  $N_c$  cadenas de longitud 6. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

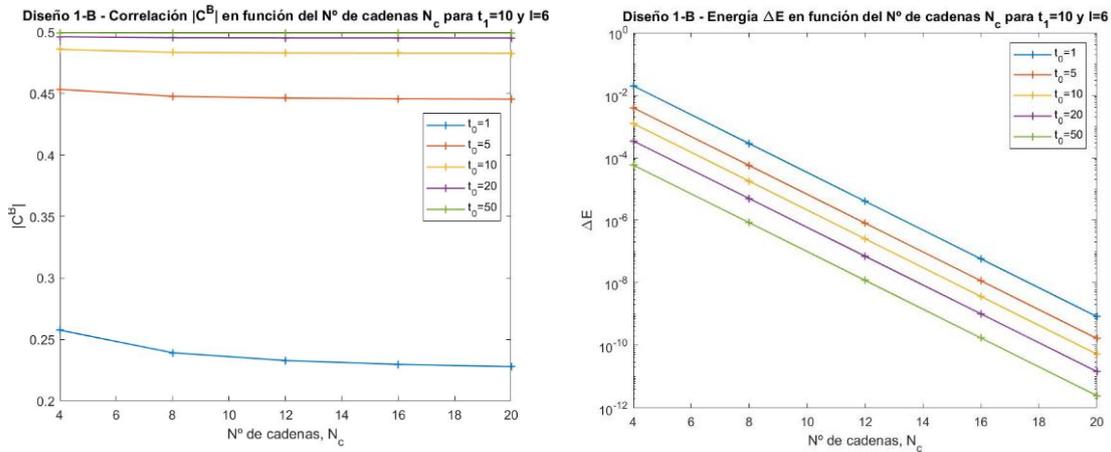


Figura 38: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 1.2 con un número de cadenas fijo e igual a 4, con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

Aumentar el número de cadenas dentro de este sistema hace que la correlación del bloque disminuya lentamente para cualquier valor de  $t_0$  escogido. Igual que ocurría anteriormente, un mayor valor de  $t_0$  supone una mayor correlación de bloque.

Finalmente, se observa que un aumento del número de cadenas implica una mayor caída de la energía en comparación a la caída que se tenía para mayores longitudes de cadena. Esto se puede explicar porque en la nueva topología se encuentran más nodos entre los elementos del bloque correlacionado, dando lugar a un sistema con un estado fundamental energéticamente menos robusto, o lo que es lo mismo, un enlace entre los elementos del bloque menos estable.

3.2.2.3 Análisis del diseño 2

Como se muestra en la imagen central de la Tabla 3, para la segunda opción se va a analizar la malla y las características del bloque formado entre los elementos de color rojo  $B = \{6,24\}$  modificando para ello, los dos enlaces entre los elementos  $\{5,11\}$  y  $\{17,23\}$ .

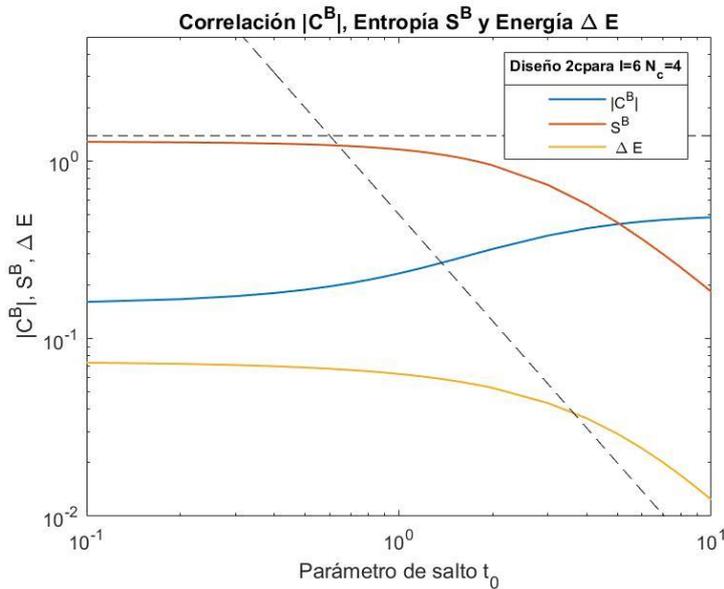


Figura 39: Correlación, entropía y brecha de energía para la malla del diseño 2 ( $l = 6, N_c = 4$ )

En la Figura 39 se puede observar que las características de los elementos del bloque son muy similares a las obtenidas en la configuración del diseño 1. Las pequeñas diferencias entre ambos sistemas se pueden apreciar en la Figura 40, en donde se han representado las curvas para ambos diseños.

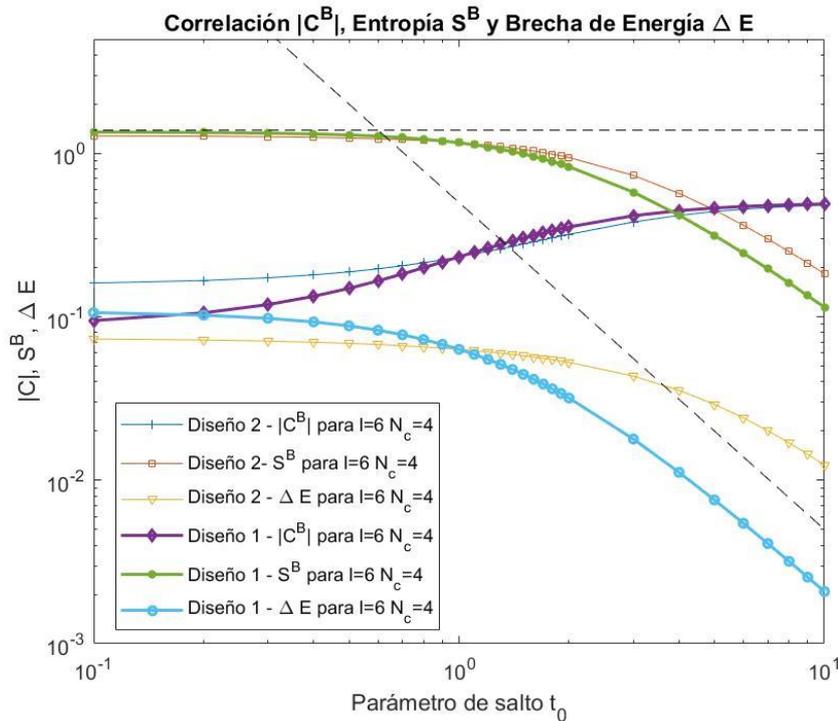


Figura 40: Comparación de la correlación de bloque, entropía de bloque y brecha de energía entre el diseño 1 y el diseño 2

Tabla 19: Valores de la correlación de bloque, entropía de bloque y energía para 2 mallas de longitud de cadena  $l=6$  y número de cadenas  $N_c=4$ .

Diseño	$t_0$	$ C^B $	$ S^B $	$ \Delta E $
Diseño 1	0.1	$9.48 \cdot 10^{-2}$	1.35	0.106
	10	0.490	0.114	$2.09 \cdot 10^{-3}$
Diseño 2	0.1	0.161	1.28	$7.32 \cdot 10^{-2}$
	10	0.482	0.183	$1.24 \cdot 10^{-2}$

De la Figura 40 junto con la Tabla 19, cabe destacar que para  $t_0$  pequeños ( $t_0 \sim 0.1$ ) la correlación que se observa en el diseño 2 es bastante superior a la que se observa en el diseño 1. Lo contrario ocurre para  $t_0$  elevados ( $t_0 \sim 10$ ), donde la correlación del bloque del diseño 1 es ligeramente superior. Esta tendencia se repite con la entropía, entendiendo por lo tanto que el enlace entre los elementos del bloque se producirá antes en el diseño 1. Para  $t_0$  pequeños ( $t_0 \sim 0.1$ ) el estado fundamental del diseño 1 es energéticamente más robusto que el diseño 2, llegando a existir dos órdenes de magnitud de diferencia con el diseño 2. Esto es diferente para  $t_0$  grandes ( $t_0 \sim 10$ ), observándose mayor robustez en el diseño 2.

Se entiende por lo tanto que el diseño 1 va a dar lugar a un enlace entre los elementos del bloque antes que el nuevo diseño 2, pero este enlace origina un sistema menos robusto que el del diseño 2.

Para seguir profundizando en el análisis de esta malla, se va a proceder a aumentar el valor de algunos enlaces del sistema para así conseguir aislar una cadena, tal y como se hizo en el análisis del diseño 1. La Figura 26 esquematiza la supuesta cadena que se quiere aislar junto con los enlaces que se van a modificar.

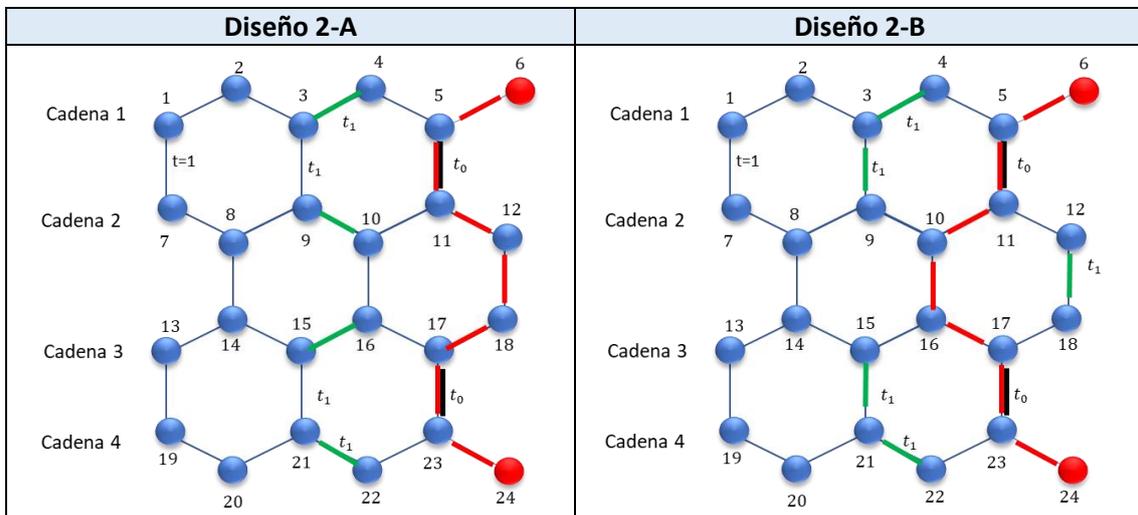


Figura 41: Esquema de dos supuestas cadenas (rojo) que conectan los elementos del bloque  $\{6, 24\}$ , tras amplificar ciertos enlaces (verde) en la malla del diseño 2. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

En la Tabla 20 se resume las distintas intensidades de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

Tabla 20: Intensidad de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

	$t_0$	$t_1$	Resto de enlaces $t$
Diseño 2	[0.01, 10]	1	1

Diseño 2-A	[0.01, 10]	10	1
Diseño 2-B	[0.01, 10]	10	1

Como se ve en la Figura 41 y Tabla 20, nuevamente se han introducido unos enlaces  $t_1 = 10$  como se hizo en el análisis del diseño 1. Ahora se van a comparar ambas configuraciones (diseño 2 con diseño 2.1 y diseño 2.2) y ver cómo influye el parámetro  $t_0$  en dichos diseños.

### 3.2.2.3.1 Análisis del subdiseño 2-A

Cabe destacar que si se intensifican los enlaces  $t_1$  del diseño 2.1 existirán dos cadenas desacopladas como las que se veían en la Figura 18. A diferencia del diseño 1.1, en el diseño 2.1 no existe un enlace  $t_0$  que una la cadena al resto de la malla, pues ahora el enlace  $t_0$  se encuentra dentro de la cadena desacoplada.

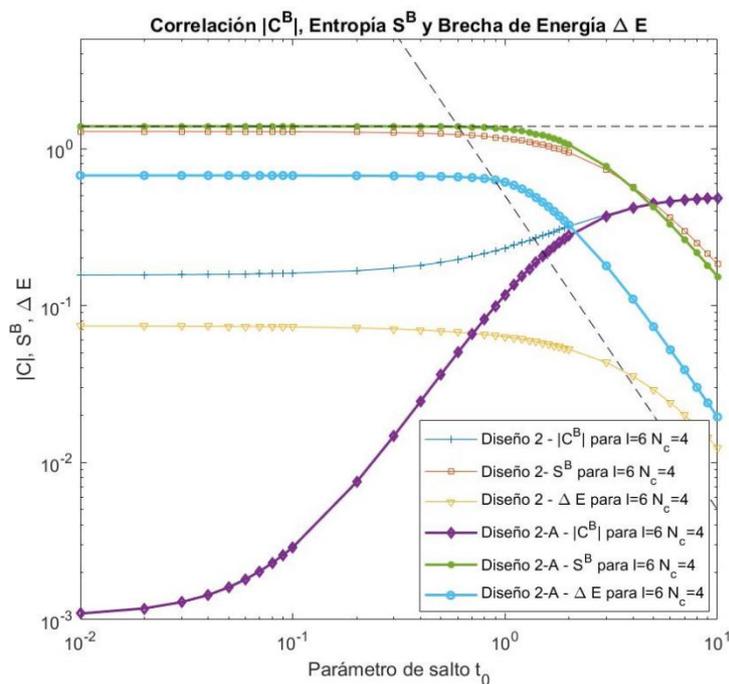


Figura 42 Comparación de correlación, entropía y brecha de energía entre del diseño 2 y 2-A en función de  $t_0$

Efectivamente, al tener unos enlaces  $t_1$  que desacoplan la cadena, parece que en el diseño 2-A la correlación del bloque presenta un comportamiento similar al que presenta la correlación de los extremos de una cadena como la que se analiza en el Anexo I. Aunque es cierto señalar que para valores de  $t_0$  muy bajos ( $t_0 \sim 0.01$ ) el valor de la correlación satura, y las similitudes con la cadena desaparecen, porque a partir de un cierto valor  $t_0$  los elementos del bloque dejan de formar parte de la cadena aislada para integrarse en el resto de la malla.

Energéticamente cabe destacar que para  $t_0$  bajos ( $t_0 < 1$ ) existe una gran diferencia entre ambos diseños, siendo el diseño 2-A el que presenta un estado fundamental más robusto, precisamente por el hecho de existir una cadena desacoplada del resto de la malla. A medida que  $t_0$  se hace más grande ambos sistemas convergen, aproximadamente al mismo valor de energía, debido a que el bloque se ha desacoplado del resto del sistema, y energéticamente ambos diseños son similares.

A continuación, se quiere ver cómo varían las propiedades de la correlación y de la energía si se utilizan cadenas de mayor longitud o un mayor número de cadenas.

En primer lugar, si se utilizan cadenas de mayor longitud como se representa en la Figura 43, se obtienen los resultados de la Figura 44.

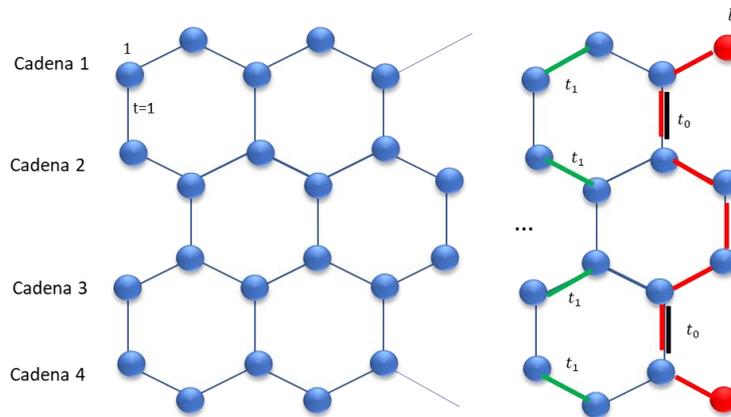


Figura 43: Malla del diseño 2-A formada por 4 cadenas de longitud  $l$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

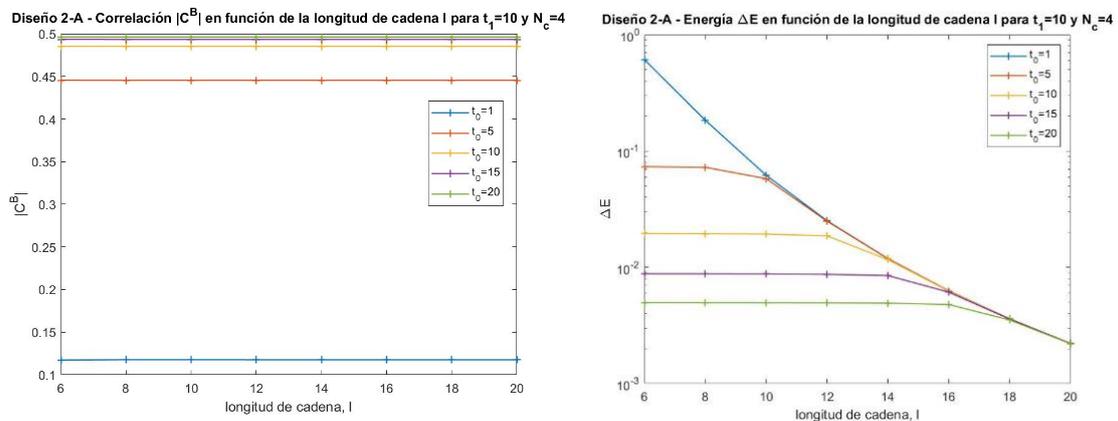


Figura 44: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 2-A (Figura 43) con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

Efectivamente, se puede ver que la correlación del bloque se mantiene constante e independiente de la longitud de la cadena sea cual sea el valor de  $t_0$  que se utilice. Como es de esperar, a mayor  $t_0$  mayor aislamiento del bloque y mayor correlación entre dichos elementos.

Por otra parte, es curioso observar el comportamiento del salto de energía. Parece que a mayor  $t_0$  menor es la brecha de energía del sistema, pero más tiempo se mantiene constante conforme se aumenta la longitud de las cadenas. Finalmente, se ve que todas las energías de los diferentes sistemas convergen al mismo valor para una cierta longitud que depende del valor de  $t_0$ , por lo que se entiende que, a partir de una cierta longitud, el valor de  $t_0$  es irrelevante para la estabilidad del estado fundamental del sistema.

De esto último se puede extraer que la brecha de energía del sistema depende de dos parámetros. Por un lado, el tamaño de la malla, donde a mayor tamaño menor energía. Por otro lado, el enlace que se forma entre los elementos del bloque, donde a mayor correlación y, por lo tanto, al existir un enlace más fuerte, menor es el salto energía. Para longitudes de cadenas pequeñas el enlace que se forma entre los elementos de bloque va a determinar la brecha de energía del sistema, pero a medida que la malla va creciendo el peso del enlace entre los elementos del bloque desaparece. Se entiende que el salto de energía del sistema global es la

menor de entre los dos sistemas que se encuentran desacoplado (cadena unidimensional y resto de la malla).

Si se realiza ahora el mismo ejercicio, pero aumentando el número de cadenas y dejando fija su longitud, como se muestra en Figura 45, se obtienen los resultados de la Figura 46.

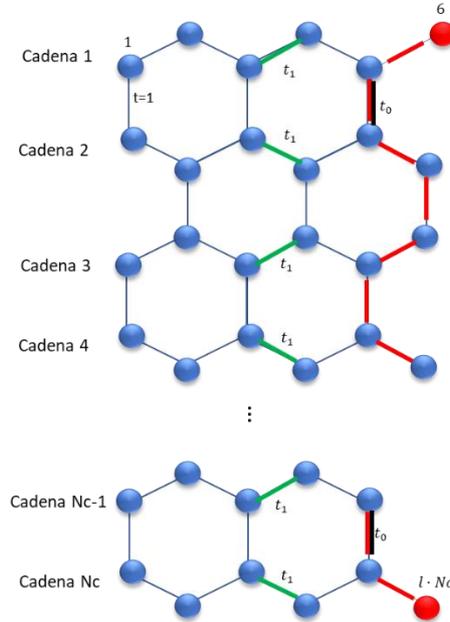


Figura 45: Malla del diseño 2-A formada por  $N_c$  cadenas de longitud 6. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

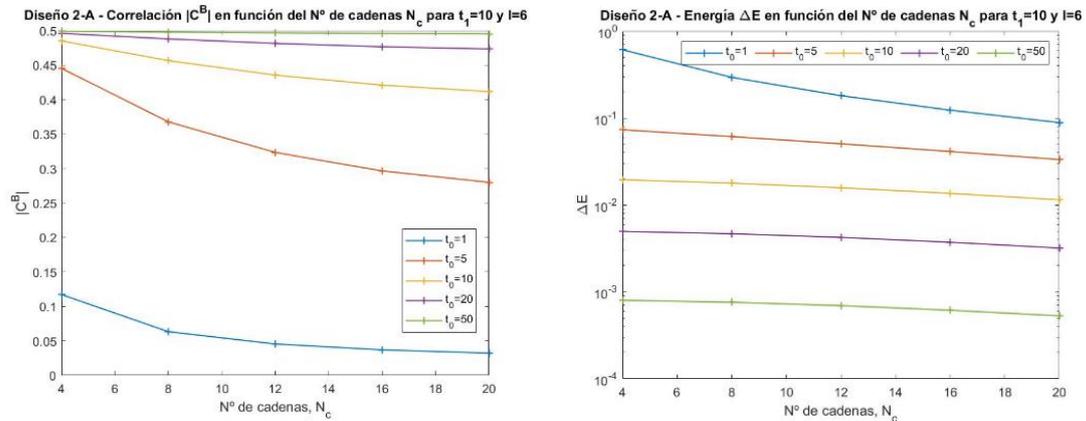


Figura 46: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 2-A (Figura 45) con una longitud de cadena fija, con número de cadenas variable y para diferentes  $t_0$

Para valores de  $t_0 < t_1$  se observa una disminución de la correlación similar a la que se observa entre los extremos de una cadena unidimensional de fermiones como la del Apéndice I. Cuando  $t_0 > t_1$  el bloque está completamente desacoplado y la correlación entre los elementos que forman el bloque es máxima y constante, por lo tanto, independiente del número de cadenas de las que está formado la malla. Mayor diferencia se aprecia en el salto de energía, donde es característico que a mayor  $t_0$  menor es este salto y más inestable es el estado fundamental, resultado motivado por el enlace que se crea entre los elementos del bloque. Un rasgo común es la disminución de la energía conforme se van añadiendo más cadenas a la malla, aunque es cierto que el ritmo de descenso de la energía es más lento en comparación con otros sistemas,

lo que indica una mayor estabilidad del estado fundamental debido principalmente a que la cadena se encuentra desacoplada.

### 3.2.2.3.2 Análisis del subdiseño 2-B

Si ahora se modifica el valor de  $t_0$  y se compara la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  del diseño 2-B con la correlación del bloque del diseño 2 original sin enlaces  $t_1$  se obtienen los siguientes resultados.

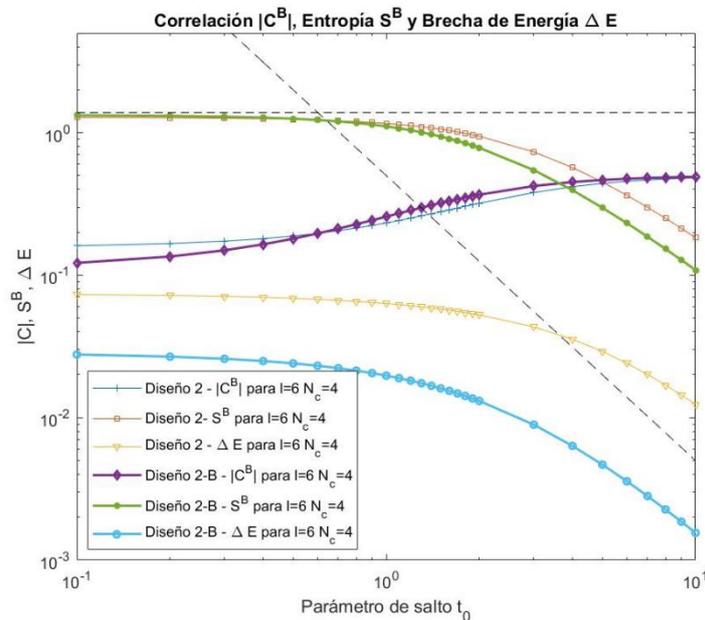


Figura 47: Comparación de correlación entropía y brecha de energía entre el diseño 2 y 2-B en función de  $t_0$

Parece que ambos diseños presentan un comportamiento parecido, a diferencia de lo analizado anteriormente. El comportamiento de la correlación y entropía es muy similar en el diseño 2 y 2-B. Mayores son las diferencias del salto de energía entre ambos sistemas, siendo el estado fundamental del diseño 2-B el menos robusto.

Se vuelve a llegar a la conclusión de que la cadena resaltada en rojo en el diseño 2-B de la Figura 41 no se desacopla del resto del sistema, a pesar de que a simple se podría pensar que sí se podría desacoplar. No sólo esto, sino que el estado fundamental del diseño 2-B es energéticamente más desfavorable que el diseño 2 original.

A continuación, se quiere ver como varían las propiedades de la correlación y de la energía si se utilizan cadenas de mayor longitud o un mayor número de cadenas.

En primer lugar, si se utilizan cadenas de mayor longitud como se representa en la Figura 48, se obtienen los resultados de la Figura 49.

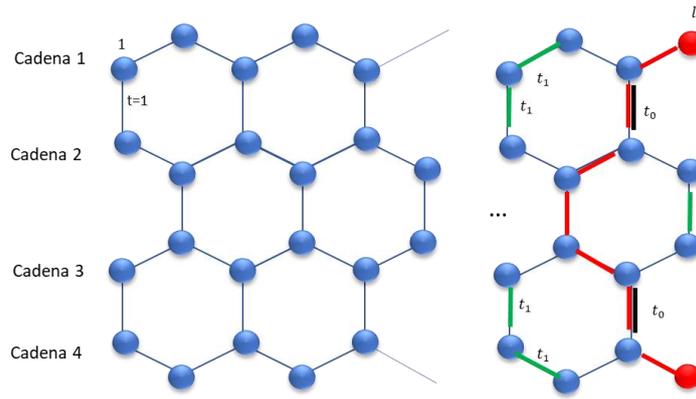


Figura 48: Malla del diseño 2-B formada por 4 cadenas de longitud  $l$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

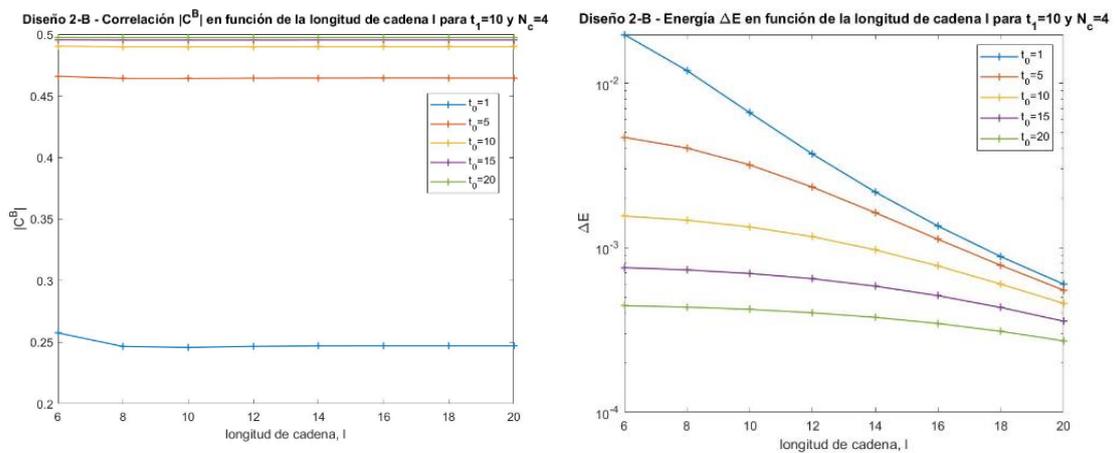


Figura 49: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 2-B (Figura 48) con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

Se ve que la correlación se mantiene prácticamente constante, aunque sí que es cierto que existen unas muy pequeñas variaciones conforme se utilizan cadenas de longitud más grande. Con respecto a la energía se observa nuevamente como tiende a converger hacia el mismo valor a medida que se utilizan mayores longitudes, teniendo menor relevancia el parámetro  $t_0$  en la estabilidad del estado fundamental de la malla.

Si se realiza ahora el mismo ejercicio, pero aumentando el número de cadenas y dejando fija su longitud, como se muestra en Figura 50, se obtienen los resultados de la Figura 51.

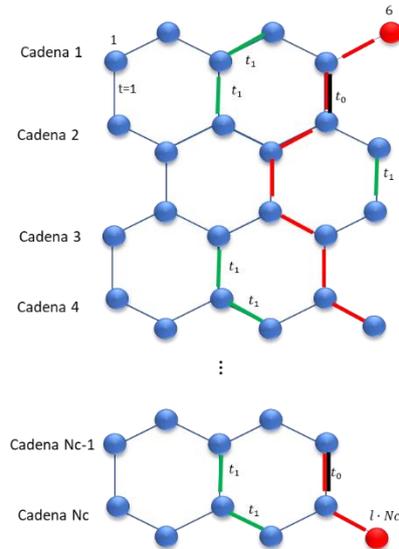


Figura 50: Malla del diseño 2-B formada por  $N_c$  cadenas de longitud 6. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

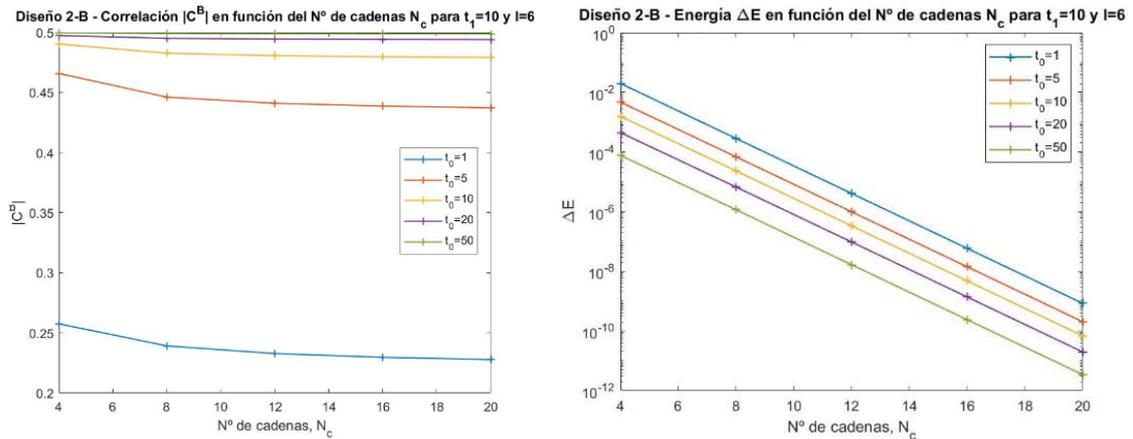


Figura 51: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 2-B (Figura 50) con una longitud de cadena fija, con número de cadenas variable y para diferentes  $t_0$

Como era de esperar, aumentar el número de cadenas implica reducir la correlación, independientemente del valor que tenga  $t_0$ . Lo mismo se observa con la brecha energética, señalando particularmente el importante ritmo de descenso que indica la poca robustez del estado fundamental y del enlace entre los elementos del bloque del sistema a medida que el número de cadenas aumenta.

### 3.2.2.4 Análisis del diseño 3

Para este diseño se van a combinar las estructuras analizadas en los casos anteriores, teniendo una malla como la imagen de la derecha de la Tabla 3. Para este caso los resultados se muestran a continuación:

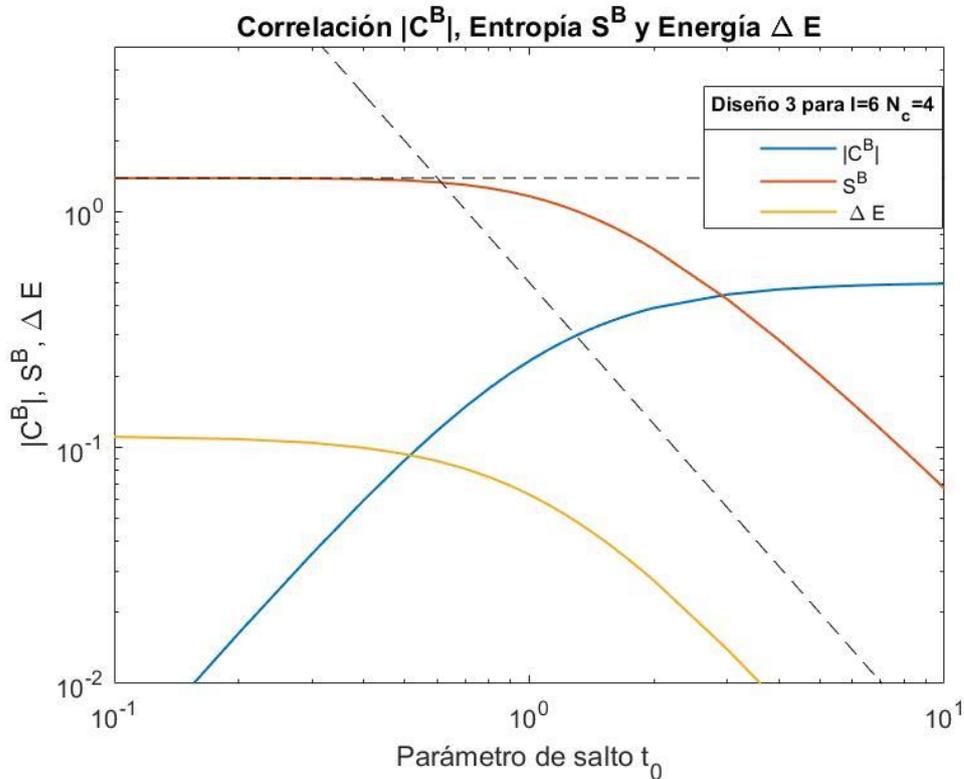


Figura 52: Correlación, entropía y brecha de energía para un bloque compuesto por los fermiones libres  $\{l, N_c \times l\}$  correspondientes al diseño 3 de la Tabla 1, para distintas longitudes  $l$  ( $l=4$  y  $l=20$ ) y para un número de cadenas  $N_c=4$

En este caso la correlación de los bloques (formado por los fermiones libres  $\{6,24\}$ ) aumenta conforme el valor del parámetro de salto  $t_0$  va haciéndose mayor, hasta saturar en un valor aproximado  $|C^B| \sim 0.5$ . A diferencia de los diseños analizados anteriormente no existe una correlación inicial para  $t_0$  pequeños. Esto es así porque en este caso, para estos valores de  $t_0$ , el nodo huérfano se encuentra aislado junto a su vecino más próximo (nodo 5 y nodo 23), eliminando por tanto la correlación a distancia con el otro extremo

Se puede comprobar que la entropía máxima es  $S^B = 2 \log(2)$  [12]. Conforme el valor del parámetro de salto va creciendo y aproximadamente a partir de  $t_0 = 1$ , el valor de la entropía desciende, indicando el inicio del desacoplamiento del bloque con respecto al resto del sistema.

Para finalizar, se ve como a mayor  $t_0$  se tiene un menor salto energía. De esto se deduce una menor robustez del estado fundamental de la malla. Esta brecha energía va descendiendo a un ritmo de  $t_0^{-2}$  (este ritmo de decrecimiento se puede justificar por medio de la ecuación (30) de la sección 2.2.1), como se puede ver por medio de la línea discontinua negra. Esta tendencia es indicativa de que, cuanto más intenso es la correlación de los elementos del bloque, más inestable se vuelve dicho enlace.

A continuación, en las figuras inferiores se compara el diseño 3 con el diseño 2 y 1.

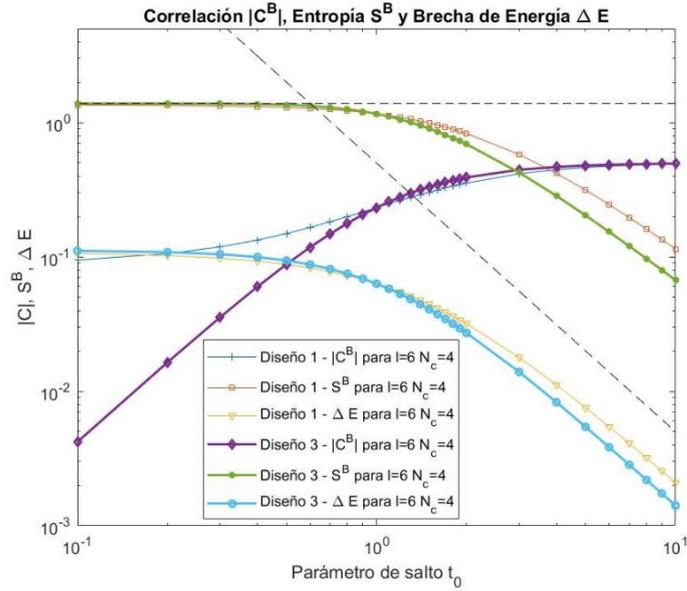


Figura 53: Comparación de la correlación de bloque, entropía de bloque y brecha de energía entre el diseño 1 y el diseño 3

A la vista de la Figura 53, cabe destacar la diferencia entre las correlaciones cuando el parámetro  $t_0$  es pequeño ( $t_0 \ll 1$ ). Para el diseño 1, los elementos del bloque van a estar conectados con el resto de la malla para estos valores bajos de  $t_0$ , cosa que no ocurre en el diseño 3. Para  $t_0$  altos ( $t_0 \gg 1$ ) las propiedades de ambos sistemas son muy similares, tanto a nivel correlación-entropía como a nivel energético, aunque hay que señalar que el diseño 1 es ligeramente más favorable.

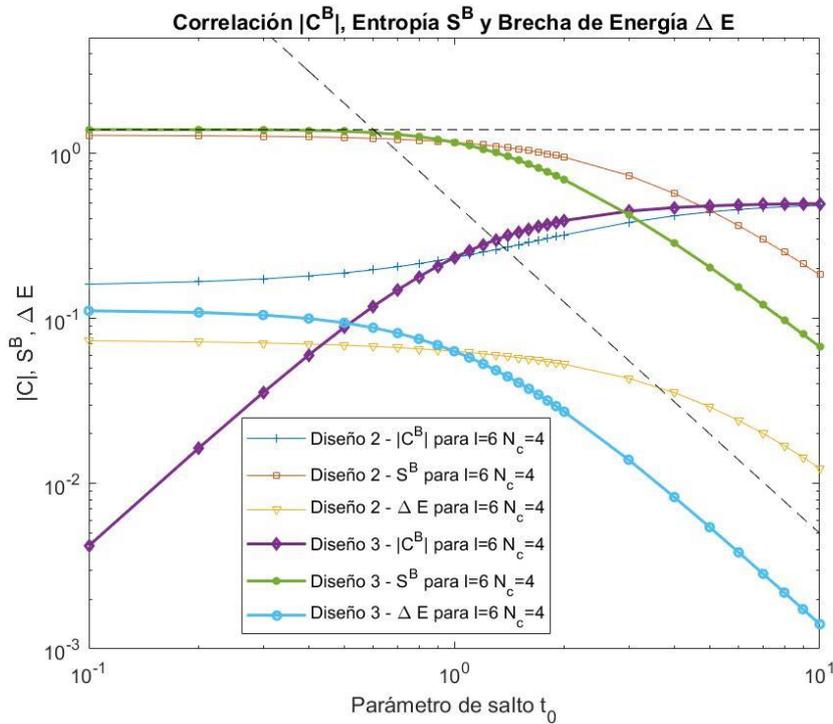


Figura 54: Comparación de la correlación de bloque, entropía de bloque y brecha de energía entre el diseño 2 y el diseño 3

Si ahora se analiza la Figura 54, donde se compara diseño 2 y diseño 3, se observa que la correlación es muy similar a la explicada anteriormente. Mayores son las diferencias a valores medios y altos de  $t_0$ , principalmente en el salto de energía, donde en el diseño 3 esta brecha es más pequeña.

Si se comparan los 3 diseños numéricamente para un mismo valor elevado de  $t_0$  se puede deducir que el diseño 2 tiene un estado fundamental más robusto, o lo que es similar, un enlace entre los elementos del bloque más estable. Por otra parte, a nivel correlación y formación de un enlace entre los elementos del bloque, es el diseño 3 el que presenta valores más favorables al tener la menor entropía de los tres. Esto es así puesto que ahora los elementos del bloque se están quedando efectivamente más aislados.

Tabla 21: Valores de la correlación de bloque, entropía de bloque y energía para 3 diseño de mallas de longitud de cadena  $l=4$  y número de cadenas  $N_c=4$

Diseño ( $l=6, N_c=4$ )	$t_0$	$ C^B $	$ S^B $	$ \Delta E $
Diseño 1	10	0.490	0.114	$2.09 \cdot 10^{-3}$
Diseño 2	10	0.482	0.183	$1.24 \cdot 10^{-2}$
Diseño 3	10	0.495	$6.72 \cdot 10^{-2}$	$1.41 \cdot 10^{-3}$

El diseño 3 es una combinación entre el diseño 1 y el diseño 2, por lo que tras estos resultados, se puede concluir que a nivel energético el diseño 3 se va a parecer más a aquel diseño más desfavorable, que coincide con el diseño 1.

Para seguir profundizando en el análisis de esta malla, se va a proceder aumentar el valor de algunos enlaces del sistema para así conseguir aislar una cadena, tal y como se hizo en el análisis de los anteriores diseños. La Figura 55 esquematiza la supuesta cadena que se quiere aislar junto con los enlaces que se van a modificar.

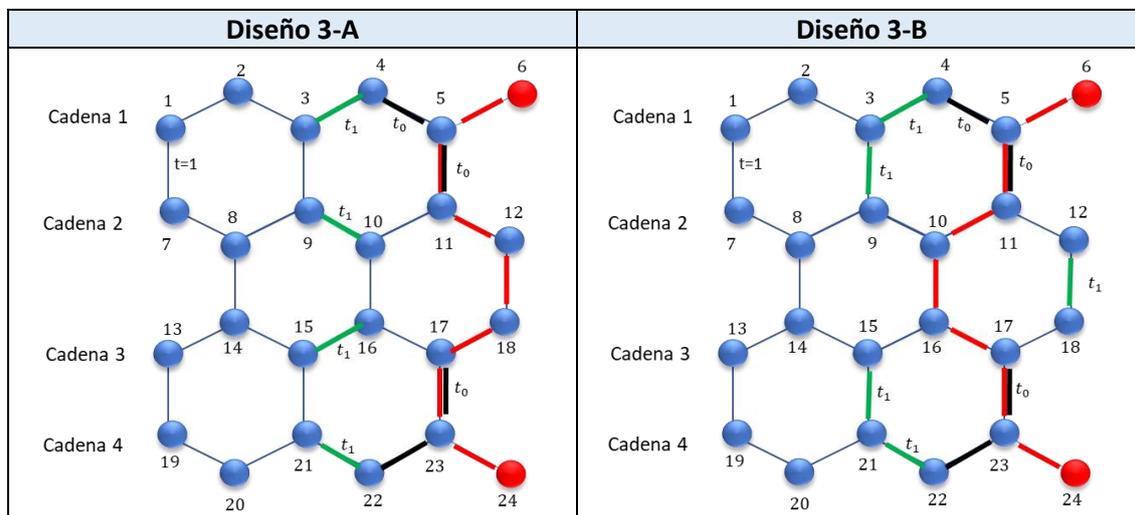


Figura 55: Esquema de dos supuestas cadenas (rojo) que conectan los elementos del bloque  $\{6, 24\}$ , tras amplificar ciertos enlaces (verde) en la malla del diseño 3. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

En la Tabla 22 se resumen las distintas intensidades de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

Tabla 22: Intensidad de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

	$t_0$	$t_1$	Resto de enlaces $t$
--	-------	-------	----------------------

Diseño 3	[0.1, 10]	1	1
Diseño 3-A	[0.1, 10]	10	1
Diseño 3-B	[0.1, 10]	10	1

3.2.2.4.1 Análisis del subdiseño 3-A

Como se ve en la Figura 55 y la Tabla 22, nuevamente se han introducido unos enlaces  $t_1$  como se hizo en el análisis del diseño 1 y 2. Ahora se va a comparar ambas configuraciones (diseño 3 con el diseño 3-A y diseño 3-B) y ver cómo influye el parámetro  $t_0$  en dichos diseños.

Cabe destacar que si se intensifican los enlaces  $t_1$  del diseño 3-A y 3-B existirán dos cadenas desacopladas como las que se veían en la Figura 18. Al igual que ocurría en el diseño 1-A, en el diseño 3-B existe un enlace  $t_0$  que une la cadena desacoplada al resto de la malla.

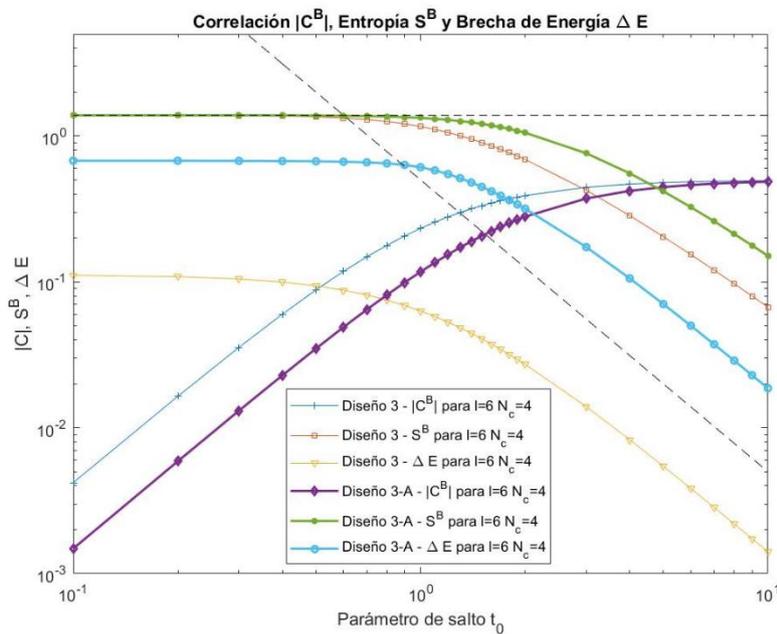


Figura 56: Comparación de correlación entropía y brecha de energía entre el diseño 3 y 3-A en función de  $t_0$

En la Figura 56 se han comparado el diseño 3 y el diseño 3-A para así ver como impactan los enlaces  $t_1 = 10$  en el sistema. Se observa que a nivel correlación-entropía ambos diseños se comportan de manera similar, siendo el diseño 3 original el que presenta una menor entropía y, por tanto, el sistema que presenta un enlace más intenso entre los elementos del bloque.

En cuanto al salto de energía, se ve claramente la mayor estabilidad del estado fundamental en el diseño 3-A, se entiende que para  $t_1 \gg t_0$  existe una cadena desacoplada que favorece energéticamente al sistema. Para  $t_0$  mayores va a ser el bloque  $B = \{6,24\}$  el que se va a encontrar desacoplado del resto del sistema.

Como se hizo en los análisis anteriores, ahora se va a ver cómo cambian las propiedades del diseño 3-A, al introducir o bien un mayor número de cadenas o cadenas de longitud más larga.

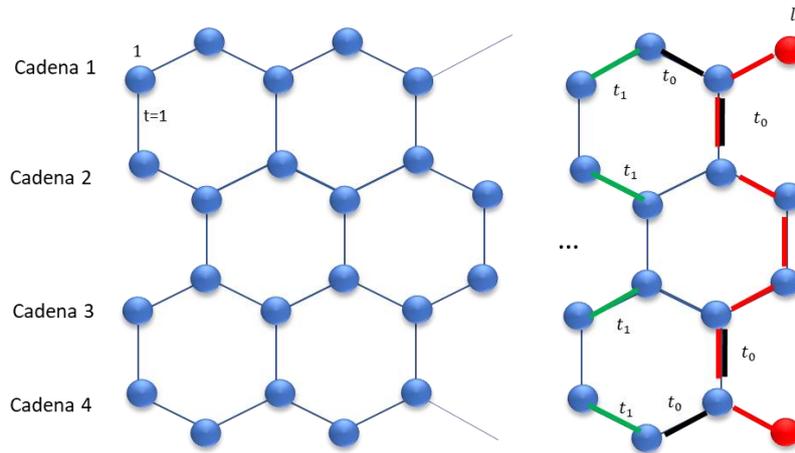


Figura 57: Malla del diseño 3-A formada por 4 cadenas de longitud  $l$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

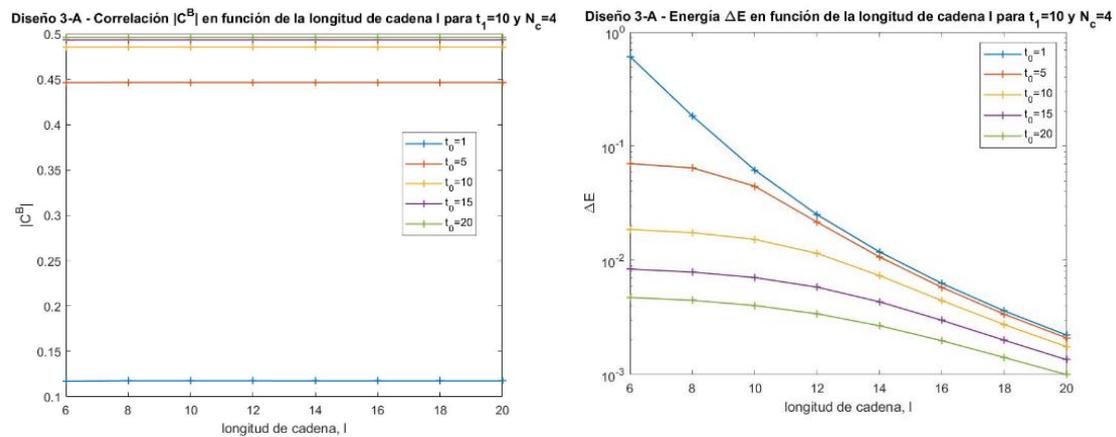


Figura 58: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 3-A (Figura 57) con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

A la vista de las gráficas representadas en la figura superior, se observa que añadir cadenas de mayor longitud no afecta a la correlación. Sí que se ve un mayor impacto en el salto de energía. Mayores longitudes implican una menor robustez del estado fundamental.

Se observa, también, que la brecha de energía para diferente  $t_0$  tiende a converger, aunque con un pequeño margen, que parece se amplifica a medida que  $t_0$  aumenta. Se entiende que a medida que  $t_0$  se hace más grande, los elementos del bloque se desacoplan del resto de la malla, pero para este caso un aumento de los enlaces  $t_0$  también implica que la cadena desacoplada, que existía inicialmente, se vuelva a acoplar al resto del sistema, introduciendo por tanto esa diferencia de energía que se observa para diferentes valores de  $t_0$ .

En el siguiente caso, se van a analizar las mismas propiedades, pero para el diseño 3-A con cadenas adicionales, como se representa en la Figura 59.

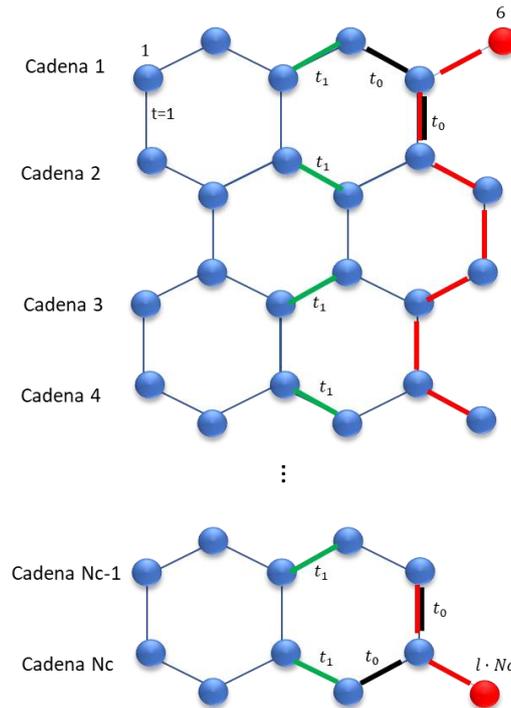


Figura 59: Malla del diseño 3-A formada por  $N_c$  cadenas de longitud 6. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

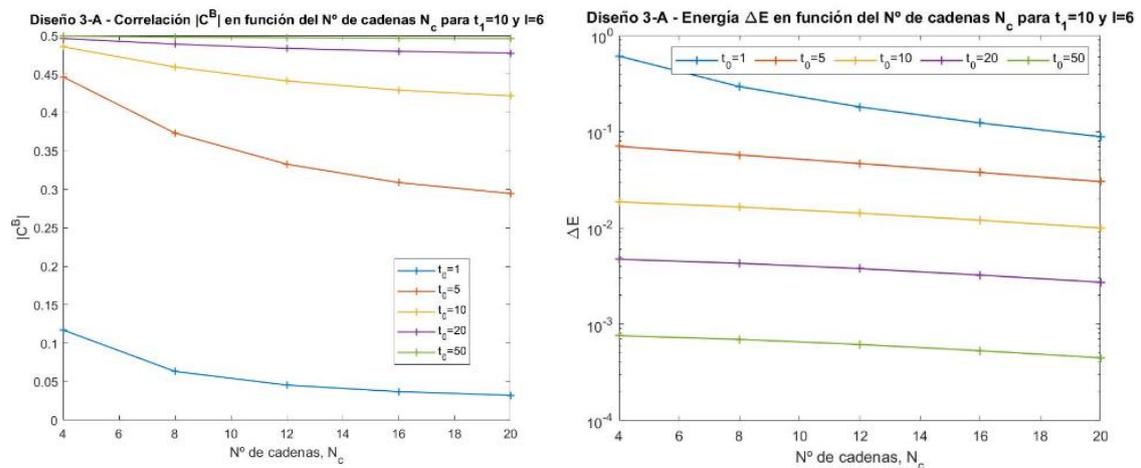


Figura 60: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 3-A (Figura 59) con número de cadenas variable y para diferentes  $t_0$

Como se observa en las gráficas de la Figura 60, cuando  $t_0 < t_1$ , un aumento del número de cadenas implica una reducción paulatina de la correlación entre los elementos del bloque. Si  $t_0 > t_1$ , el bloque se encontrará desacoplado y la correlación será máxima y constante, por lo tanto, independiente del número de cadenas del sistema.

A nivel energético se observa, que a medida que se añaden más cadenas al sistema la brecha de energía desciende, pero a un ritmo menor que para el caso anterior. Esto es debido a que al añadir un mayor número de cadenas al sistema se está creando otro sistema en el que existe una cadena desacoplada, pero de mayor longitud que la anterior, que va a tener un estado fundamental energéticamente más estable. La cadena de la que se acaba de hablar está representada en color rojo en la Figura 59.

3.2.2.4.2 Análisis del subdiseño 3-B

A continuación, comparando la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  del diseño 3-B de la Figura 55, con la correlación del bloque del diseño 3 original sin enlaces  $t_1$ , se obtienen los siguientes resultados.

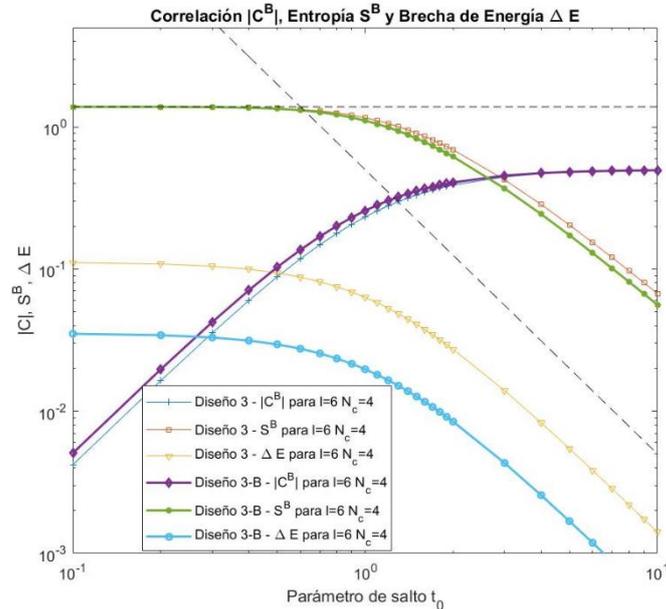


Figura 61: Comparación de correlación entropía y brecha de energía entre el diseño 3 y 3-B en función de  $t_0$

En la Figura 61 se observa que la correlación y la entropía de ambos diseños son prácticamente idénticos, siendo el diseño 3-B el que presenta un salto de energía menor. A comparación de lo que ocurría con el diseño 3-A, ahora no se está desacoplando ninguna cadena, por lo que las diferencias entre ambos diseños son escasas más allá de los enlaces  $t_1$  que presenta el diseño 3-B. Se entiende, por lo tanto, que estos enlaces  $t_1$  solo los responsables de la disminución del salto de energía del sistema.

Como se viene haciendo en los anteriores apartados, se va ahora a proceder con el análisis de los diseños, añadiendo un mayor número de cadenas o cadenas de mayor longitud.

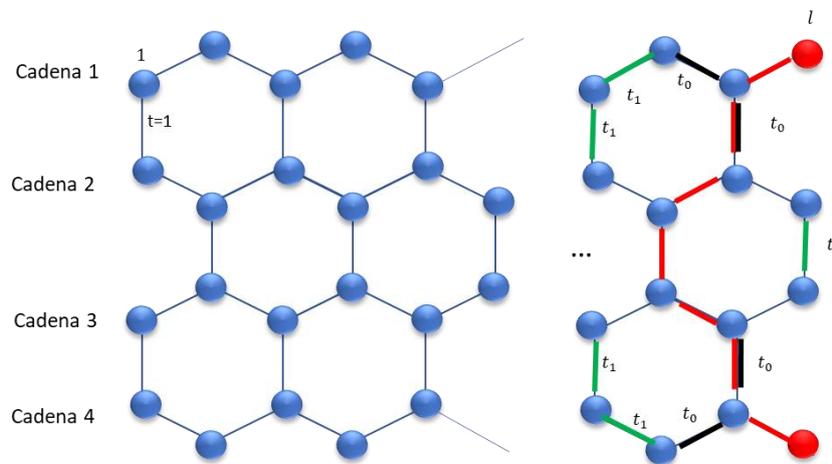


Figura 62: Malla del diseño 3.2 formada por 4 cadenas de longitud  $l$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

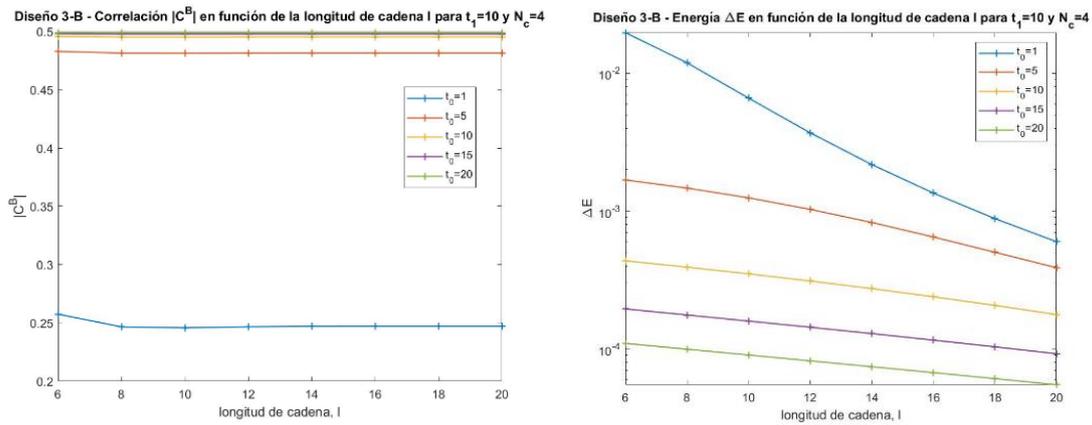


Figura 63: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 3-B (Figura 62) con longitudes de cadena variable y para diferentes  $t_0$

Como se viene observando, utilizar cadenas de mayor longitud casi no afecta a la correlación del bloque, que se mantiene prácticamente constante. Por otra parte, a nivel energético se produce una reducción suave del salto de energía.

Si ahora lo que se añaden son más cadena al sistema, como en la Figura 64, se obtienen los resultados de la Figura 65.

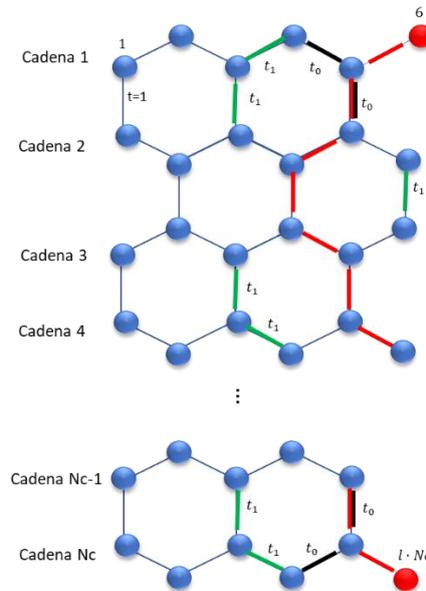


Figura 64: Malla del diseño 3-B formada por  $N_c$  cadenas de longitud 6. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

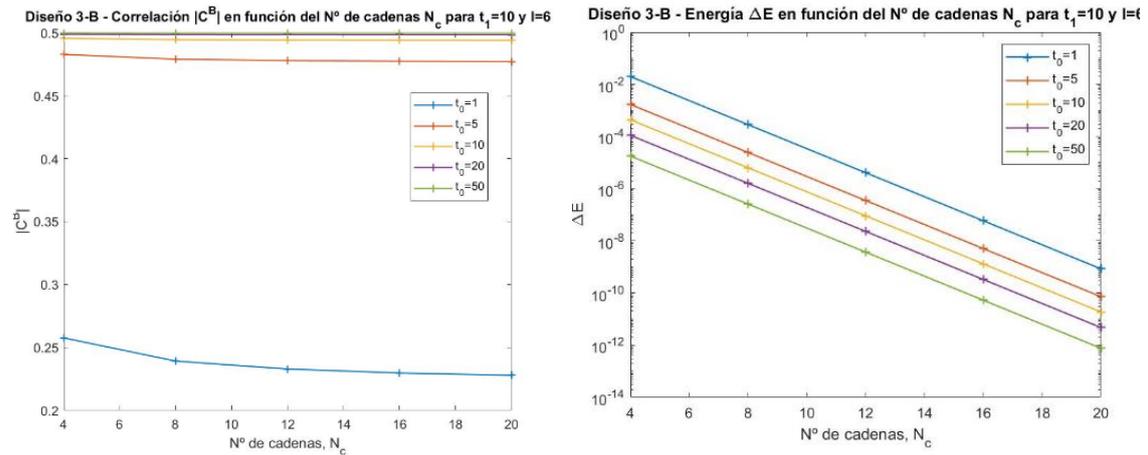


Figura 65: Correlación de bloque y brecha de energía para una malla del tipo del diseño 3-B (Figura 64) con número de cadenas variable y para diferentes  $t_0$

Ahora sí que se observa una reducción de la correlación a medida que se añaden más cadenas al sistema, debido a que los elementos del bloque se encuentran más alejados entre sí. Llama la atención el fuerte ritmo de disminución de la energía con el número de cadenas, debido principalmente a que ahora no existe una cadena que este desacoplada del resto del sistema

### 3.2.2.5 Comparación entre diseños

Ahora se va a comparar la intensidad del enlace que se forma y el tamaño de la brecha de energía que presenta cada diseño. Para esta labor se van a representar la entropía del bloque  $S^B$  junto con el salto de energía  $|\Delta E|$ .

Se sabe que la entropía del bloque es un parámetro que representa la intensidad del enlace formado entre los elementos del bloque, a menor entropía mayor intensidad. Se ha elegido este parámetro en lugar de la correlación del bloque, ya que este último satura en un valor de  $|C^B| \sim 0.5$ , lo que impide ver claramente esta intensidad de la que se acaba de hablar.

En primer lugar, se van a comparar los diseños 1, 2 y 3 tal y como se representan en la Figura 66. Se recuerda que se va a utilizar un parámetro de salto  $t_0 \in [0.1, 10]$ .

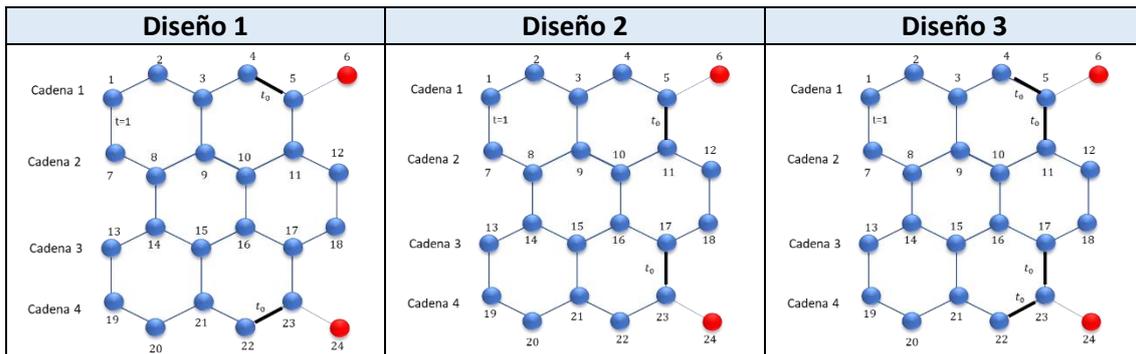


Figura 66: Diseños 1, 2 y 3. Los enlaces  $t_0$  se identifican en negro. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

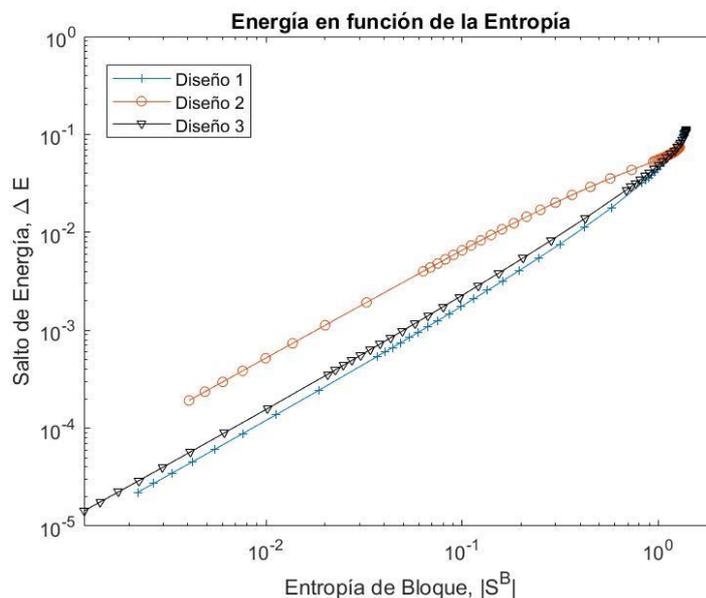


Figura 67: Comparación de la brecha de energía en función de la entropía para los diseños 1, 2 y 3

En la Figura 67 se observa que, para una misma entropía, es decir, para una misma intensidad de enlace, el diseño 2 es el que presenta un mayor salto de energía y, por lo tanto, una mayor estabilidad de enlace. Cabe destacar la gran similitud entre las curvas del diseño 1 y 3. Como se dijo anteriormente, el diseño 3 (se recuerda que se ha construido como combinación del diseño 1 y 2) se asemeja más al diseño con menor salto de energía, en otras palabras, el enlace  $t_0$  entre los nodos  $\{4, 5\}$  da lugar a un sistema con un estado fundamental menos robusto energéticamente hablando.

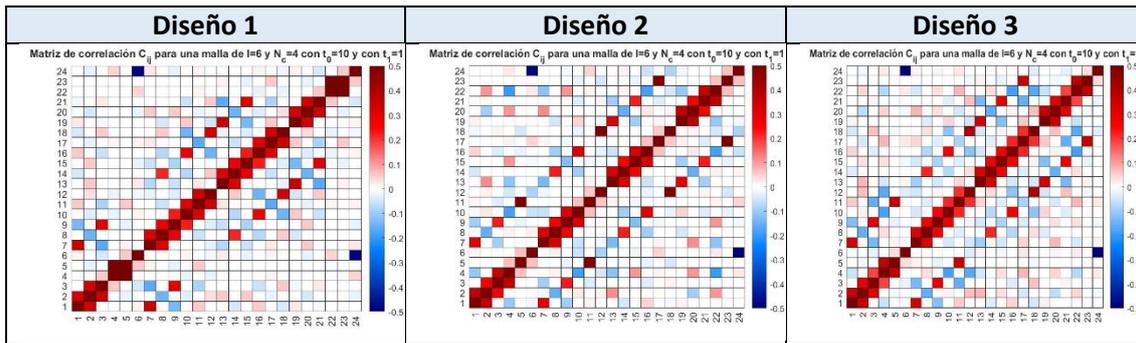


Figura 68: Comparación de las matrices de correlación de los diseños 1, 2 y 3

En las matrices de correlación de la Figura 68 se aprecian las similitudes y diferencias entre los distintos diseños. Es interesante destacar en el diseño 3, que la correlación del enlace  $\{4, 5\}$  ( $C^{\{4,5\}} = 0.36$ ) es ligeramente superior a la correlación entre el enlace  $\{5, 11\}$  ( $C^{\{5,11\}} = 0.34$ ), de aquí las similitudes a nivel energético entre los diseños 1 y 3.

Otra manera adicional de estudiar la intensidad del enlace y la estabilidad energética del estado fundamental, es por medio del producto de la correlación del bloque y el salto de energía ( $|C^B| \cdot \Delta E$ ). La Figura 69 compara este producto para los diferentes diseños 1, 2 y 3 de la Figura 66.

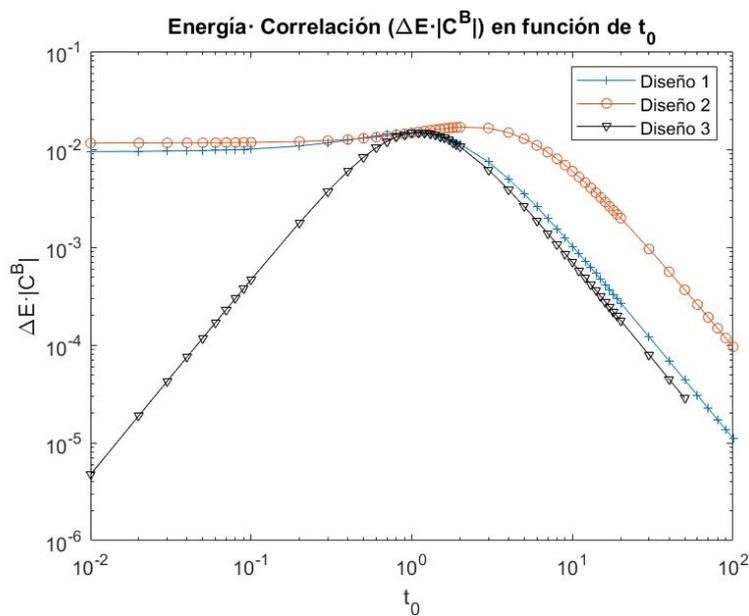


Figura 69: Brecha de energía · correlación en función del parámetro  $t_0$  para los diseños 1, 2 y 3

De la Figura 69, es significativo señalar cómo el diseño 1 y el diseño 2 se asemejan para valores de  $t_0$  pequeños ( $t_0 < 1$ ), valores para los cuales los elementos del bloque no se encuentran desacoplados. Para valores de  $t_0 > 1$  son el diseño 1 y el diseño 3 los que tienen curvas parecidas, pero es el diseño 2 el que presenta unos valores más favorables del producto correlación y salto de energía.

Tras estos resultados se puede concluir que el diseño 3 se asemeja al diseño 1, motivado principalmente porque el enlace  $\{4, 5\}$  es más fuerte que el  $\{5, 11\}$ .

A continuación, se va a realizar el mismo ejercicio para los diseños en los que se ha intentado aislar una cadena dentro de la malla. Por esto, se va a fijar nuevamente el valor de  $t_1 = 10$  para

intentar tener un sistema con cadenas desacopladas, y se va a variar progresivamente el valor de  $t_0$  para calcular los valores que se quieren representar (entropía y salto de energía)

En primer lugar, se van a comparar aquellos diseños que se han denominado en este trabajo como 1-A, 2-A y 3-A, tal y como se representa en los diseños de la Figura 70.

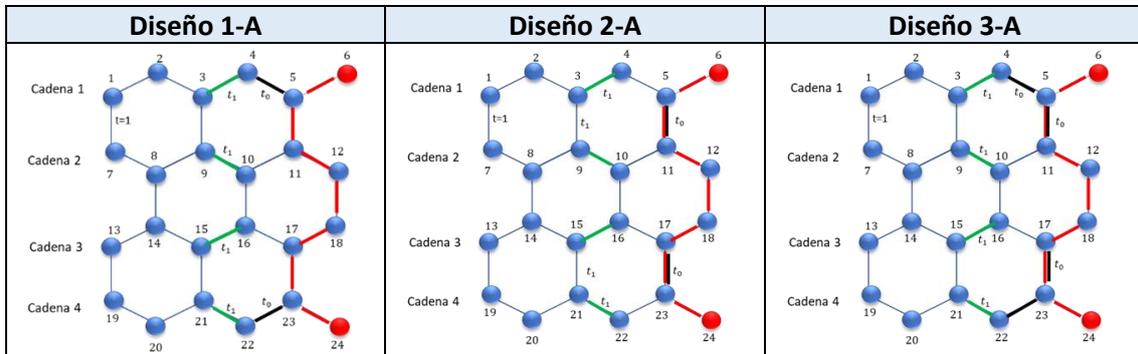


Figura 70: Diseños 1-A, 2-A y 3-A. Los enlaces  $t_1$  se identifican en color verde, los  $t_0$  en negro y la cadena aislada en rojo. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

En la Tabla 23 se resume las distintas intensidades de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

Tabla 23: Intensidad de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

	$t_0$	$t_1$	Resto de enlaces $t$
Diseño 1-A	[0.1, 10]	10	1
Diseño 2-A	[0.1, 10]	10	1
Diseño 3-A	[0.1, 10]	10	1

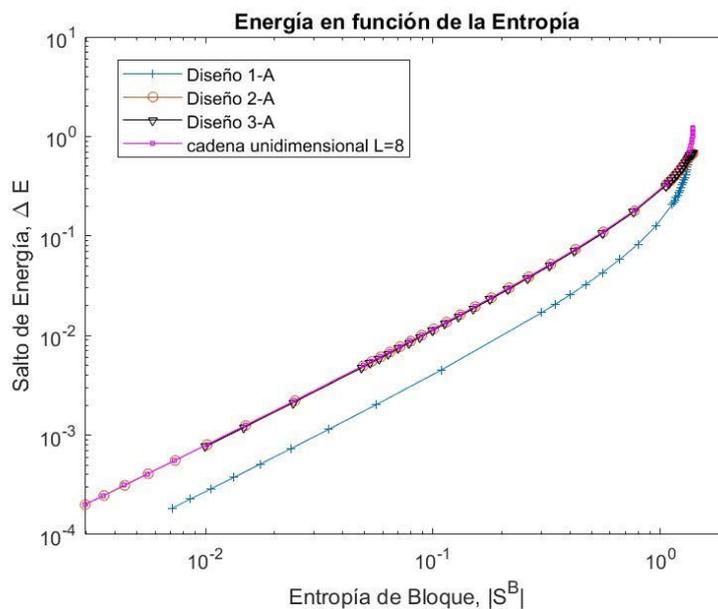


Figura 71: Comparación de la brecha de energía en función de la entropía para los diseños 1-A, 2-A y 3-A

En la Figura 71 se observa que los diseños 2-A y 3-A son los que presentan mayor salto energía y, por tanto, una mayor estabilidad de enlace entre los elementos del bloque. Es sencillo ver a través de la configuración de los diseños que se presentan en la Figura 70, que en el diseño 2 la cadena permanece en todo momento desacoplada, ya que el enlace  $t_0$  se queda dentro de la

cadena, lo que hace que aumente la estabilidad. Ambos diseños 2-A y 3-A presentan los mismos valores que una cadena unidimensional de la misma longitud que la cadena desacoplada.

Al contrario, en el diseño 1-A, valores elevados del enlace  $t_0$  unen los extremos de la cadena con el resto del sistema, lo que hace que esta se vuelva a acoplar al resto de la malla, observándose una menor estabilidad.

Es significativo observar como ahora el diseño 3-A se comporta de manera similar al diseño 2-A, debido a que el enlace  $t_0$  de los elementos  $\{5,11\}$  ( $C^{\{5,11\}} = 0.37$ ) es ligeramente dominante al enlace  $t_0$  entre los elementos  $\{4,5\}$  ( $C^{\{4,5\}} = 0.34$ ). Esto se observa más fácilmente a través de las matrices de correlación en la Figura 72. Se ve que las similitudes entre 2-A y 3-A son mayores que con 1-A.

Es de destacar como ambos diseños 2-A y 3-A presentan las mismas propiedades que una cadena unidimensional, por lo que se entiende que en dichos diseños existe una cadena desacoplada del resto del sistema, que se comporta como una cadena unidimensional.

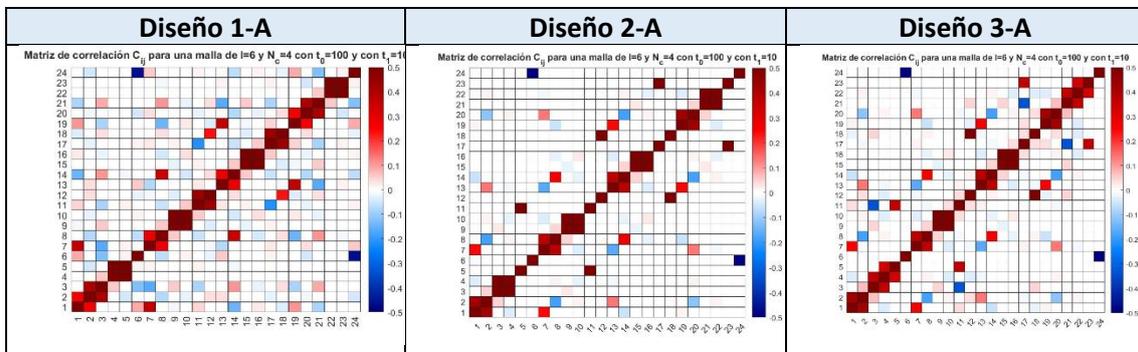


Figura 72: Comparación de las matrices de correlación de los diseños 1-A, 2-A y 3-A

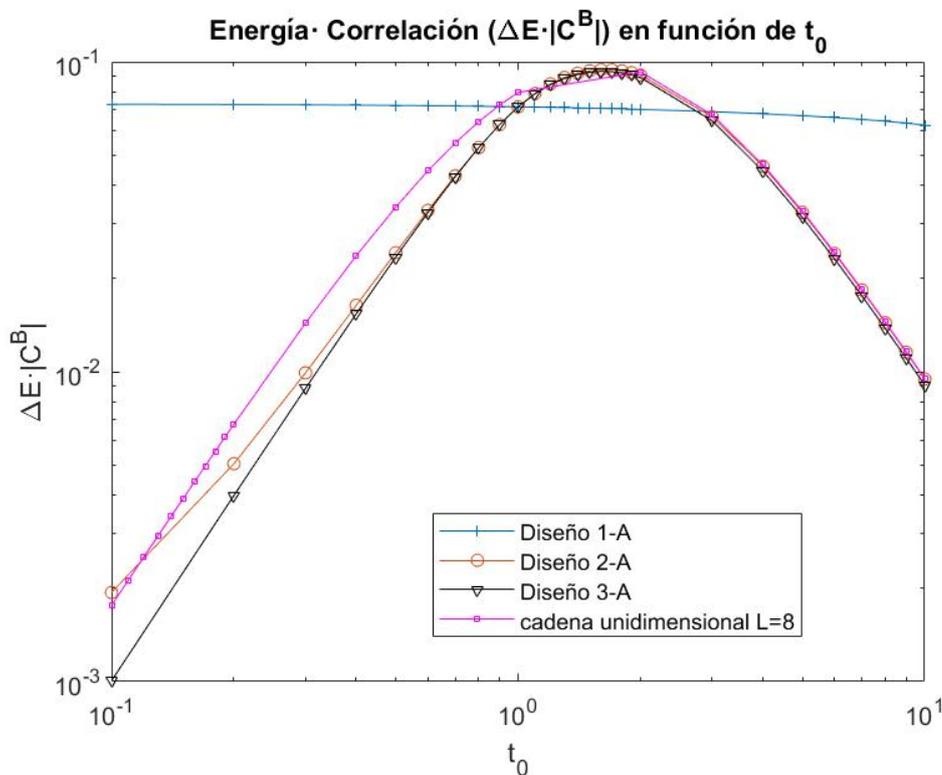


Figura 73: Brecha de energía · correlación en función del parámetro  $t_0$  para los diseños 1-A, 2-A y 3-A

De la Figura 73 cabe destacar como la curva del diseño 1-A tiene una pendiente negativa, lo cual indica que la máxima correlación de bloque y estabilidad se va a dar cuando  $t_0$  es muy pequeño. Para este diseño, aumentar el valor de  $t_0$  implica unir la cadena, que inicialmente estaba desacoplada, al resto del sistema, lo que conlleva una menor estabilidad.

Nuevamente se vuelve a observar la gran similitud entre el diseño 2-A y 3-A con la cadena unidimensional, especialmente cuando  $t_0 > 1$ , donde los tres sistemas son prácticamente idénticos. Mayor diferencia existe cuando  $t_0 \ll 1$ , especialmente para el diseño 2-A. Como se decía en la sección “3.2.2.3 Análisis del diseño 2”, reducir  $t_0$  a valores muy pequeños implica que los elementos del bloque (los nodos huérfanos) dejan de formar parte de la cadena unidimensional para unirse al resto del sistema y, por lo tanto, dejan de compartir las propiedades de una cadena unidimensional. Sin embargo, esto no ocurre en el diseño 3-A.

Ahora se van a analizar los sistemas que se han denominado en este trabajo como diseños 1-B, 2-B, 3-B como se representan en la Figura 74

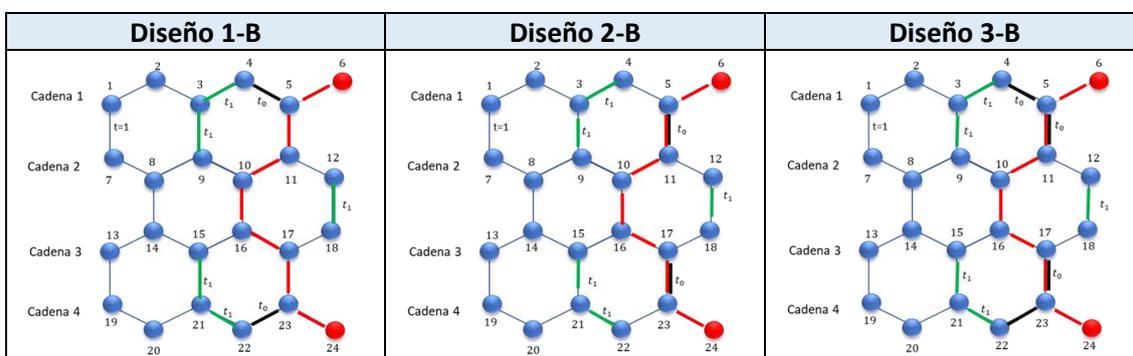


Figura 74: Diseños 1-B, 2-B y 3B. Los enlaces  $t_1$  se identifican en color verde, los  $t_0$  en negro y la cadena aislada en rojo. Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_0$

En la Tabla 24 se resume las distintas intensidades de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

Tabla 24: Intensidad de los diferentes parámetros de salto en función del diseño

	$t_0$	$t_1$	Resto de enlaces $t$
Diseño 1-B	[0.1, 10]	10	1
Diseño 2-B	[0.1, 10]	10	1
Diseño 3-B	[0.1, 10]	10	1

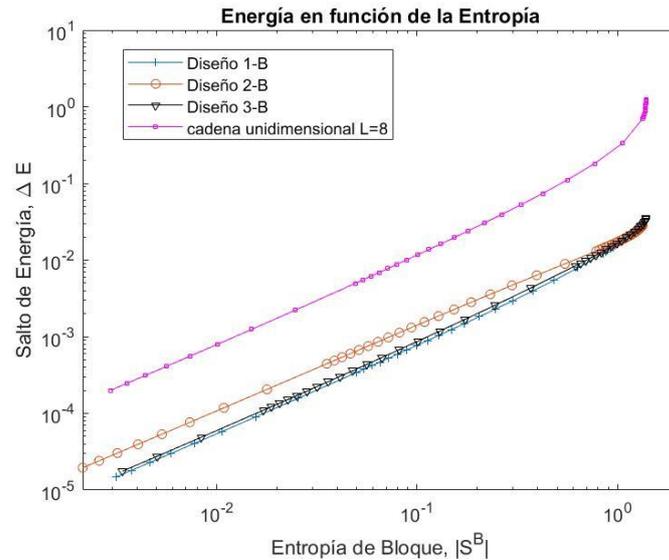


Figura 75: Comparación de la brecha de energía en función de la entropía para los diseños 1-B, 2-B y 3-B

En la Figura 75 se observa que vuelve a ser el diseño 2-B el que presenta una mayor estabilidad para el mismo valor de entropía. Nuevamente, es más interesante a nivel energético aislar los elementos del bloque por medio de un enlace  $t_0$  entre los elementos  $\{5,11\}$  dentro de la cadena que se está intentando aislar, que por medio de un enlace  $t_0$  entre los elementos  $\{4,5\}$ , que de alguna manera tienden a unir la cadena, supuestamente aislada, con el resto de la malla.

Esta vez el diseño 3-B se encuentra a nivel energético entre los diseños 1-B y 2-B, aunque con propiedades más próximas a las del 1-B.

Es de destacar que no existe ninguna similitud con una cadena unidimensional, de hecho, la diferencia energética entre ambos sistemas es considerable. De esto se entiende que para este caso no existe ninguna cadena que se llegue a desacoplar del resto del sistema. Aunque nuevamente esto último se observará con mayor claridad por medio de las matrices de correlación de la Figura 76. En estas matrices se observa como existen pequeñas correlaciones, por ejemplo, entre los elementos  $\{10,9\}$  y  $\{15,16\}$ , que muestran las interacciones de la cadena que se ha intentado aislar con el resto de la malla.

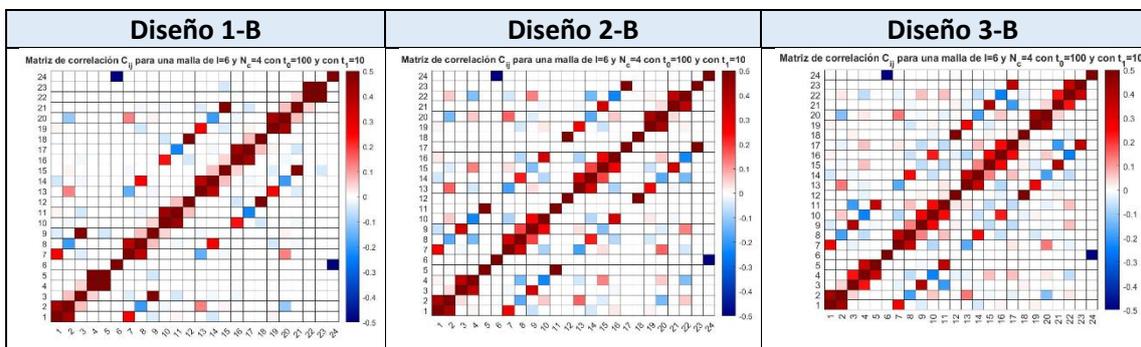


Figura 76: Comparación de las matrices de correlación de los diseños 1-B, 2-B y 3-B

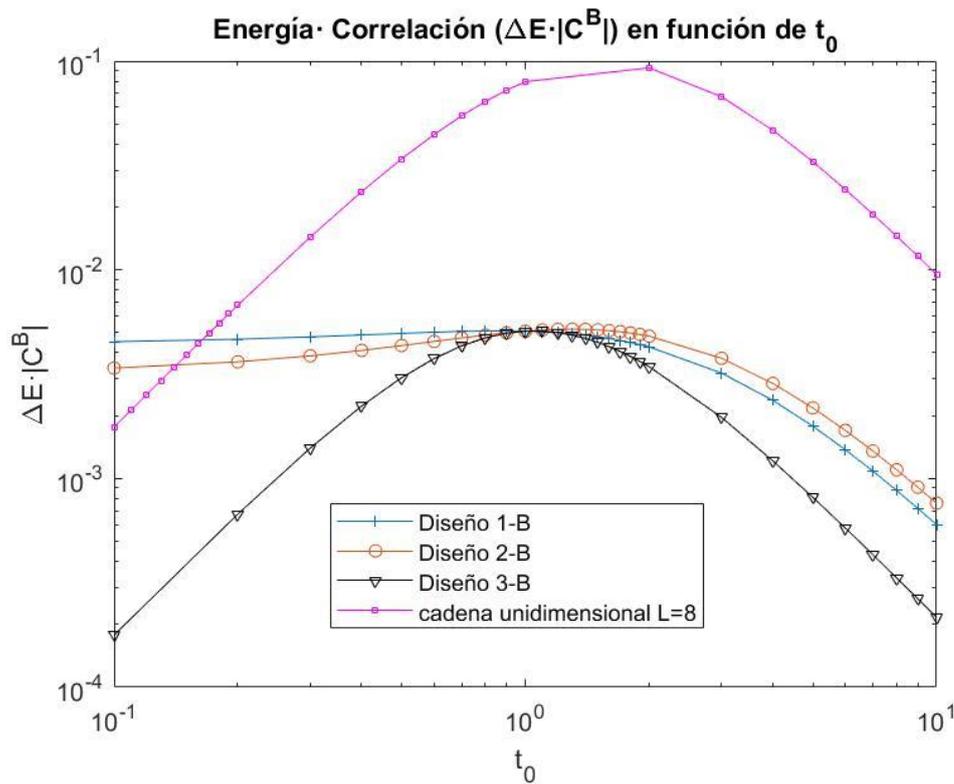


Figura 77: Brecha de energía · correlación en función del parámetro  $t_0$  para los diseños 1-B, 2-B y 3-B

De la Figura 77 se puede destacar nuevamente la gran diferencia de todos los diseños con la cadena unidimensional. Son los diseños 1-B y 2-B los más similares entre sí, ya que, para estos casos, cuando  $t_0 < 1$  los elementos del bloque no se llegan a aislar por completo del resto del sistema, existiendo una pequeña correlación entre ellos, y manteniéndose la energía constante. Por otra parte, cuando  $t_0 > 1$  los elementos del bloque quedan aislados, correlacionándose entre ellos, reduciéndose la energía del sistema.

La curva del diseño 3-B comparte la forma de la curva de la cadena unidimensional. Los elementos que forman los bloques en ambos sistemas tienen un comportamiento de correlación similar; con la diferencia de que a nivel energético el diseño 3-B es más desfavorable, ya que no se desacopla una cadena unidimensional, como sí que ocurría en el diseño 3-A, de ahí que se observe ese salto de energías entre diseño 3-B y cadena unidimensional.

Es característico que el máximo de las curvas se encuentre para valores de  $t_0 \in [1,2]$ . Se entiende que a partir de  $t_0 = 1$  la correlación de los elementos del bloque comienza a crecer a un ritmo más rápido que en el que el salto de energía decrece. Poco después, el descenso de la energía pesa más que el crecimiento de la correlación, observándose el máximo en las curvas.

### 3.2.3 Características de una malla hexagonal quirál con nodos centrados en las caras

Para ver el impacto que tiene la malla en el desacople de las cadenas en su interior, se va a variar ligeramente la malla original, colocando nodos centrales en el centro de las caras del hexágono y uniendo dichos nodos con determinados vértices, de tal manera que se mantenga la quiralidad del sistema. Ya se ha visto en la sección anterior (sección 3.2.1.1 Simetría quirál en el sistema), que la quiralidad es una propiedad importante de este sistema, por lo que, el nuevo diseño se va a construir de tal manera que la quiralidad no desaparezca. En la Figura 78 se esquematiza el nuevo sistema con todos los parámetros de salto iguales  $t = 1$ .

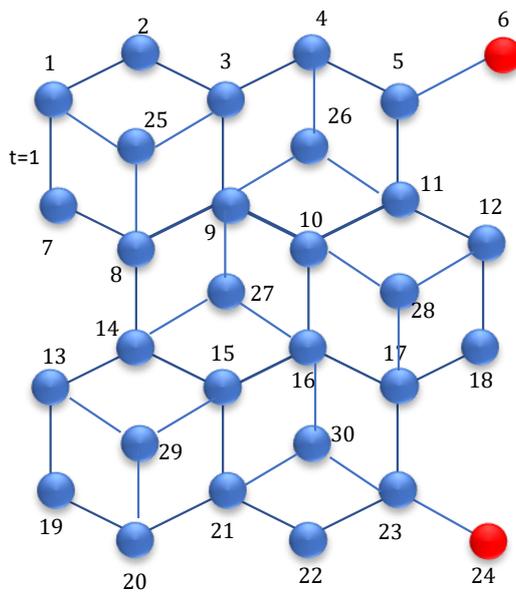


Figura 78: Malla hexagonal quirál con nodos centrados en las caras y todos los enlaces  $t$  idénticos a la unidad  $t = 1$

La matriz de correlación se ha representado en la Figura 79. En ella se observa cómo la diagonal esta equilibrada, siendo esto una indicación de que el nuevo sistema mantiene la simetría quirál.

Matriz de correlación  $C_{ij}$  para una malla hexagonal con nodos en el centro de los hexágonos

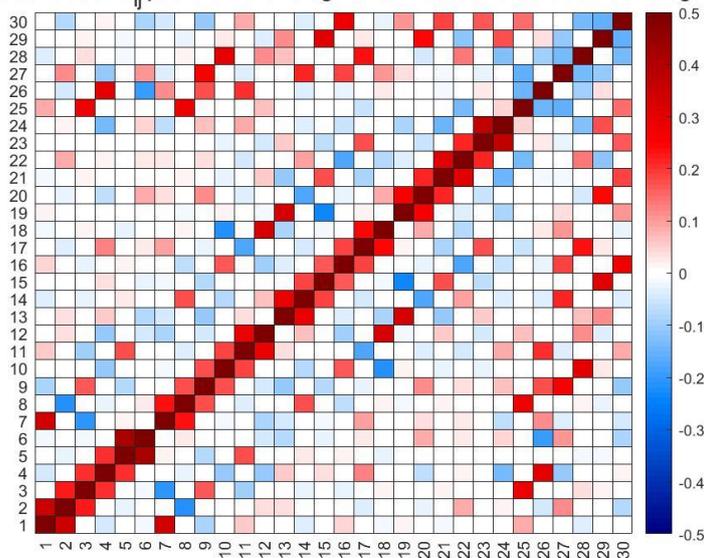


Figura 79: Matriz de correlación para la malla de  $l = 6$  y  $N_c = 4$  y nodos centrados en las caras de la Figura 78

Llama la atención que en el nuevo sistema la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$   $C^B = 0.047$  es menor que la del sistema anterior, indicando que los nodos centrales modifican sustancialmente las propiedades del sistema. Especialmente alta es la correlación de los elementos huérfanos con los nodos centrales, por ejemplo  $\{6, 26\}$  y  $\{24, 29\}$ .

También cabe señalar que los nodos centrales presentan cierta correlación con los nodos centrales vecinos, como se puede ver en la esquina superior derecha de la matriz de correlación de la Figura 79.

Adicionalmente se ve que el espectro de energía sigue siendo simétrico a la vista de los resultados de la Tabla 25.

Tabla 25: Espectro de energía parcial o primeros autovalores para un sistema como el de la Figura 78

$\epsilon_{+1}$	$\epsilon_{-1}$	$\epsilon_{+2}$	$\epsilon_{-2}$	$\epsilon_{+3}$	$\epsilon_{-3}$	$\epsilon_{+4}$	$\epsilon_{-4}$
0.13	-0.13	0.19	-0.19	0.41	-0.41	0.45	-0.45

Una vez demostrado que la quiralidad del nuevo sistema se mantiene, se van a aislar dos cadenas en el interior del nuevo sistema para ver cómo influye la nueva malla en el desacople de la cadena. La Figura 80 muestra el diseño de enlaces que se va a utilizar para aislar las dos cadenas.

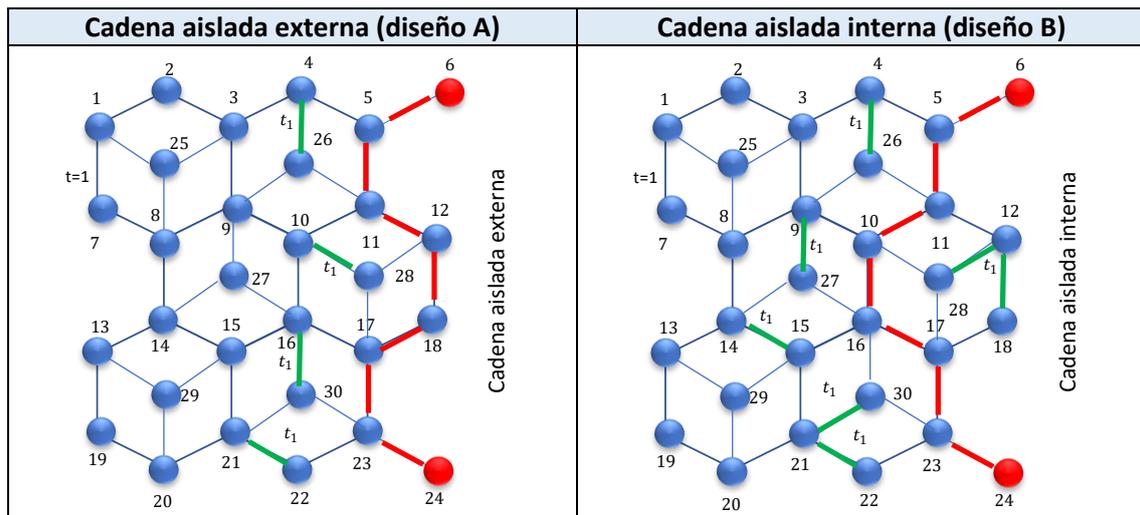


Figura 80: Cadenas aisladas de la malla usando unos enlaces  $t_1$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$

En la Tabla 26 se muestra la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  formado por los dos extremos de la cadena que se ha aislado dentro de la malla por medio de los enlaces  $t_1$ . Para la cadena externa (diseño A) se obtiene un valor de la correlación más próximo al de una cadena unidimensional, como la del Anexo I, aunque es cierto que esta cadena es más costosa de desacoplar (requiere que los enlaces  $t_1$  sean al menos dos órdenes de magnitud superior al resto) en comparación con el sistema sin nodos en el centro de la Tabla 4.

Por otra parte, se observa en la Tabla 26, que con los enlaces  $t_1$  no se consigue desacoplar la cadena interna (diseño B) de manera similar a cómo ocurría con la malla sin los nodos centrales. Llama la atención como al aumentar el valor de  $t_1$  la correlación entre extremos de la cadena se aleja del valor que toma la correlación entre extremos de una cadena unidimensional, de manera similar a lo que ocurría con el sistema de hexágonos sin nodo en el centro, cuyos datos están representados también en la Tabla 4.

Tabla 26: Correlación de bloque  $B = \{6,24\}$  de una malla hexagonal como la del diseño A y B

	$t_1$	$ C^B $	$\Delta =  C^B - C_{cadena}^{1,L} $
Cadena aislada externa (diseño A)	10	$9.76 \cdot 10^{-2}$	$1.71 \cdot 10^{-2}$
Cadena aislada externa (diseño A)	100	0.113	$1.50 \cdot 10^{-3}$
Cadena aislada interna (diseño B)	10	0.145	$3.08 \cdot 10^{-2}$
Cadena aislada interna (diseño B)	100	0.163	$4.82 \cdot 10^{-2}$

Para comparar ambos sistemas con un poco más en profundidad, se va a utilizar ahora la matriz de correlación.

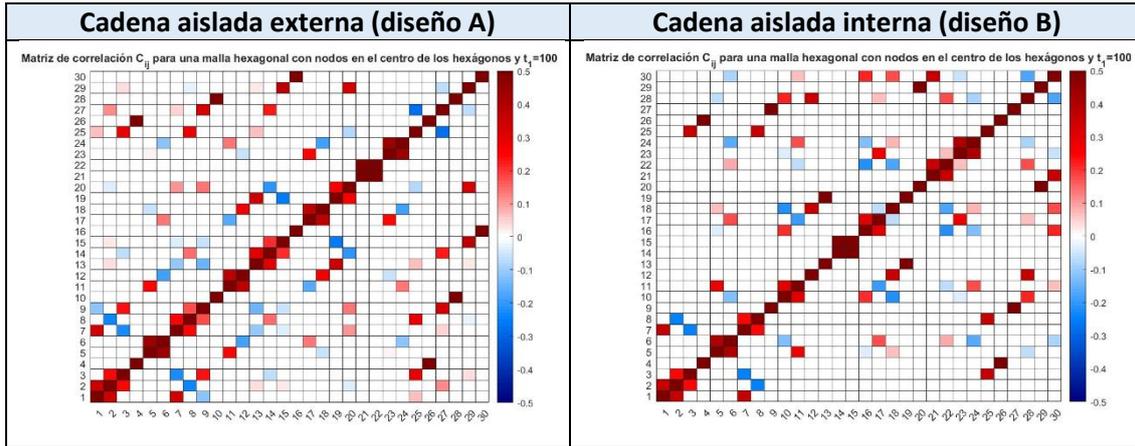


Figura 81: Matriz de correlación para el diseño A (izquierda) y para el diseño B (derecha) de los sistemas de la Figura 80

A la vista de la matriz de correlación de la Figura 81, el sistema con la cadena aislada externa (diseño A) parece que, efectivamente, consigue desacoplar una cadena (de longitud  $L = 8$ ) del resto de la malla. Esto es fácilmente observable al comprobar que los elementos que forman la cadena dentro de la malla no interactúan con el resto de los elementos de la malla, basta con fijarse en la línea 6 para ver los elementos con los que está correlacionados. Además, la correlación del bloque  $B = \{6,24\}$  es similar a la correlación entre extremos de una cadena unidimensional de longitud 8, como se veía en la Tabla 5. Cabe apuntar, que no solo la correlación entre los extremos es similar, sino que la correlación del resto de elementos de la cadena que se ha aislado de la malla hexagonal coincide con las correlaciones de una cadena unidimensional, tal y como se puede comprobar en la Tabla 27.

Tabla 27: Correlación de bloques formados por distintos elementos para los sistemas con una cadena aislada externa ( $t_1 = 100$ ), una cadena aislada interna ( $t_1 = 100$ ) y para una cadena unidimensional

	$ C_{diseño A}^B $		$ C_{diseño B}^B $		$ C_{cadena 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	0.113	$B = \{6,24\}$	0.163	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	0.132	$B = \{6,17\}$	0.173	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,12\}$	0.182	$B = \{6,10\}$	0.125	$B = \{1,4\}$	0.184

La Tabla 27 vuelve a mostrar cómo los valores de la correlación del sistema con la cadena aislada interna (diseño B) no se asemejan a los de una cadena unidimensional.

### 3.2.3.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna)

Como se hizo en una de las secciones anteriores (sección 3.2.2.1.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna)), a continuación, se va a profundizar en este diseño B o sistema con una cadena

aislada interna. Lo que se persigue es buscar las condiciones del sistema que hacen que la cadena se consiga desacoplar finalmente del resto de la malla. Para ello se va a ir un paso más allá y se van a establecer unos enlaces  $t_2$  con una intensidad menor a la que se utiliza en el resto de los enlaces ( $t_2 < 1$ ). Estos enlaces se situarán en determinadas posiciones para así conseguir aislar de manera más efectiva la cadena que se persigue desacoplar. La Figura 82 esquematiza el sistema junto con los enlaces que se acaban de describir.

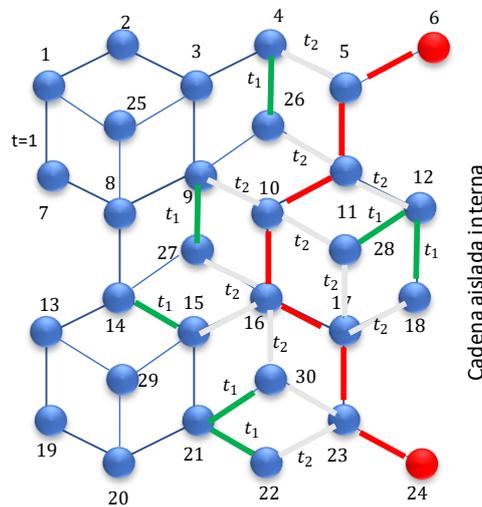


Figura 82: Diseño con la cadena aislada interna (rojo) o diseño B ligeramente modificado con los enlaces  $t_2$  (blanco). Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1$  y  $t_2$

En la Tabla 28 se han calculado los valores numéricos de la correlación de un bloque compuesto por distintos elementos de la cadena que se está intentando aislar.

Tabla 28: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño B}}^B $		$ C_{\text{cadena 1D}}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.115	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.132	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.183	$B = \{1,4\}$	0.184

A la vista de estos resultados se observa que, efectivamente, se ha conseguido desacoplar la cadena por medio de estos enlaces  $t_2$ .

Ahora cabría preguntarse en qué condiciones se produce el desacoplo de la cadena, teniendo en cuenta lo que se ha visto en la sección 3.2.2.1.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna). Para ello se van a analizar 2 casos distintos. Por un lado, se van a aislar, por medio de un enlace  $t_2$ , los pares unidos con un enlace fuerte  $t_1$ ; por otro lado, se van a aislar, por medio de un enlace  $t_2$ , los tríos que se unen con un enlace fuerte  $t_1$ .

En primer lugar, se va a aislar la cadena separándola de los pares unidos con un enlace  $t_1$ .

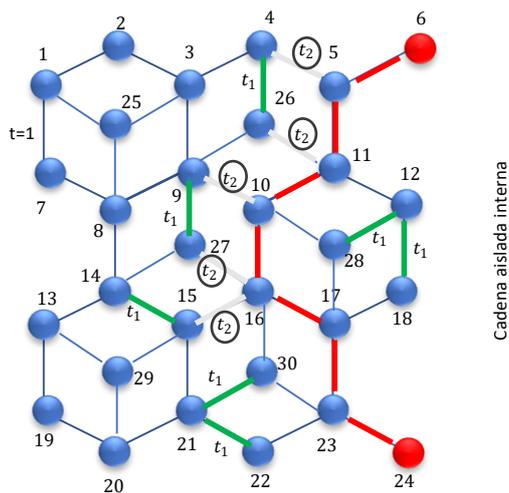


Figura 83: Opción 1 con enlaces  $t_2 = 0.1$  entre los elementos  $\{4,5\}$ ,  $\{26, 11\}$ ,  $\{9, 10\}$ ,  $\{27, 16\}$ ,  $\{15, 16\}$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1 = 10$  (verde) y  $t_2 = 0.1$  (blanco)

Tabla 29: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional como la de la Figura 83 con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.161	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.174	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.119	$B = \{1,4\}$	0.184

Para la Figura 83 se obtienen unos valores de correlación lejanos a los que presenta la cadena unidimensional como se ve en la Tabla 29. De esto se deduce el poco peso de estos enlaces para desacoplar la cadena.

A continuación, se va a aislar la cadena separándola de los tríos unidos por los enlaces  $t_1$ .

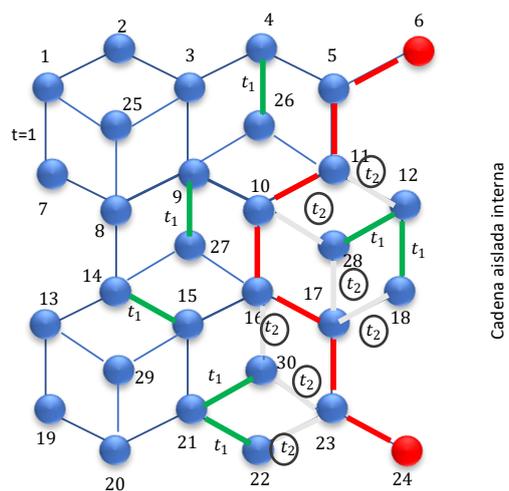


Figura 84: Opción 2 con enlaces  $t_2 = 0.1$  entre los elementos  $\{11, 12\}$ ,  $\{10, 28\}$ ,  $\{17, 28\}$ ,  $\{17, 18\}$ ,  $\{16, 30\}$ ,  $\{30, 23\}$  y  $\{22, 23\}$ . Los parámetros de salto de la malla toman el valor  $t = 1$ , excepto los enlaces  $t_1 = 10$  (verde) y  $t_2 = 0.1$  (blanco)

Tabla 30: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional como la de la Figura 84 con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 10$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	10	0.1	0.105	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	10	0.1	0.121	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	10	0.1	0.169	$B = \{1,4\}$	0.184

A la vista de los resultados obtenidos en la Tabla 30, la posición en la que se han colocado los enlaces  $t_2$  es más favorable para desacoplar la cadena.

En la Tabla 31 se ve que si se aumenta la intensidad de los enlaces  $t_1$  la cadena se llega a aislar completamente.

Tabla 31: Comparación de la correlación de una cadena unidimensional como la de la Figura 84 con la correlación de bloque formado por distintos elementos para un valor del parámetro  $t_2 = 0.1$  y  $t_1 = 100$

	$t_1$	$t_2$	$ C_{\text{diseño } B}^B $		$ C_{\text{cadena } 1D}^B $
$B = \{6,24\}$	100	0.1	0.115	$B = \{1,8\}$	0.115
$B = \{6,17\}$	100	0.1	0.131	$B = \{1,6\}$	0.132
$B = \{6,10\}$	100	0.1	0.181	$B = \{1,4\}$	0.184

Tras estos resultados se puede confirmar la conclusión obtenida en la sección “3.2.2.1.1 Análisis del diseño B (cadena aislada interna)”, es decir, los enlaces fuertes  $t_1$  que unen pares de nodos, aíslan dichos sitios del sistema. Esto no ocurre cuando se unen 3 nodos a partir de 2 enlaces fuertes  $t_1$ , donde dichos nodos siguen interactuando con fermiones del resto del sistema.

## 4. Conclusiones

En este trabajo se ha continuado la línea de investigación realizada en [8, 9], pero esta vez utilizando una malla bidimensional con una estructura hexagonal similar a la del grafeno y utilizando condiciones de contorno abiertas.

Se ha visto la importancia que tiene la simetría quiral en las propiedades de la malla, en particular en la densidad homogénea de los fermiones en la red y en el espectro de energía. Además, se ha comprobado cómo al desaparecer dicha simetría (por ejemplo, al colocar nodos que interactúan con sus vecinos en el centro de los hexágonos) la homogeneidad de la malla desaparece, teniendo esto consecuencias directas en las correlaciones existentes entre los nodos de la red, tal y como se ha visto en las matrices de correlación (Figura 5 y Figura 8). También se ha podido verificar que si se construye una malla con un nodo central que interaccione con los vértices de los hexágonos, aunque sea muy levemente, la simetría quiral se acaba rompiendo.

Por otra parte, utilizando como referencia dos nodos de la red (lo que en el trabajo se ha llamado nodos huérfanos de la red), y variando la intensidad de ciertos parámetros de salto  $t$ , se ha estudiado cómo se comporta la malla al aislar una cadena en su interior intentando separarla del resto del sistema. Se ha verificado que una cadena unidimensional es fácilmente aislable si se encuentra en el borde de la malla, si bien eso parece más complicado si se intenta aislar una cadena unidimensional que atraviese el interior de la malla.

La topología, o la manera en que se relacionan los elementos de la malla, es determinante a la hora de aislar las cadenas; por ejemplo, la manera en la que se coloquen los parámetros de salto (o enlaces) y los nodos que unan dichos parámetros, será determinante en el comportamiento de la malla. Se ha visto que un enlace fuerte ( $t_1 \gg t$ ) aísla del resto del sistema al par de nodos que une, mientras que dos enlaces fuertes ( $t_1 \gg t$ ) consecutivos no consiguen aislar del resto del sistema a los 3 nodos que unen. Se entiende que la distribución homogénea de electrones derivado de la quiralidad, es una propiedad determinante en este fenómeno.

Se ha realizado un análisis similar al anterior utilizando una malla hexagonal con nodos centrados en el centro y unidos a determinados vértices del hexágono, de tal manera que se respete la quiralidad, obteniéndose las mismas conclusiones.

Utilizando nuevamente como referencia los dos nodos huérfanos de la malla, se han analizado las propiedades de 3 diseños donde se han variado ciertos enlaces o parámetros de salto para ver cómo varía la correlación de dichos nodos. Se ha visto cómo estos nodos se desacoplan del resto del sistema cuando son aislados de sus vecinos próximos, existiendo correlaciones elevadas entre ambos elementos y creándose un enlace entre ellos.

Se ha visto claramente en alguno de estos diseños cómo la brecha de energía de dichos sistemas parece depender de dos parámetros. Por un lado, el tamaño de la malla, donde a mayor tamaño menor salto de energía. Por otro lado, el enlace que se forma entre los elementos del bloque (o nodos huérfanos), en donde a partir de la aproximación SDRG la brecha de energía está relacionada con el parámetro de salto efectivo del enlace a distancia que se forme [6], reduciéndose el salto de energía con el aumento del enlace efectivo  $t_{eff}$  que exista entre los nodos.

También se ha comprobado cómo, de manera general, las propiedades de la malla (brecha de energía y entropía) son más favorables en aquellos sistemas en donde se consigue desacoplar una cadena unidimensional de la malla original. Es muy importante señalar cómo las

propiedades de dicha malla, con una cadena desacoplada, son prácticamente idénticas a las de una cadena unidimensional como la que se presenta en el anexo I de este trabajo.

Quedaría pendiente para futuros trabajos, realizar análisis similares utilizando un modelo de interacción entre nodos que tenga en cuenta los segundos vecinos, para así obtener resultados más próximos a los que se pueda dar en un sistema real.

Se entiende que propiedades como las analizadas en este trabajo podrían surgir de manera natural en materiales con una estructura de panal de abeja como el grafeno. Además, ya existen técnicas experimentales (“Cold-Atom toolbox”) [14] que permiten controlar y manipular sistemas de átomos e iones a temperaturas muy bajas. Es por esto por lo que la simulación cuántica resultaría factible para poder comprobar a nivel experimental lo que en este trabajo se ha realizado a nivel computacional.

## Anexo I - Correlación de extremo a extremo de una cadena unidimensional

En este anexo se van a resumir brevemente las características que presenta una cadena unidimensional donde se ha maximizado la correlación entre extremos tal y como se estudia en [8, 9].

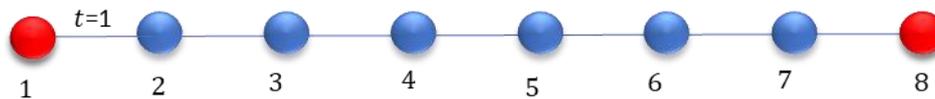


Figura 85: Cadena unidimensional de longitud 8

Para una cadena como la de la Figura 85, con todos los parámetros de salto iguales, se tiene la siguiente matriz de correlación, donde se observa cómo se correlacionan cada elemento de la cadena.

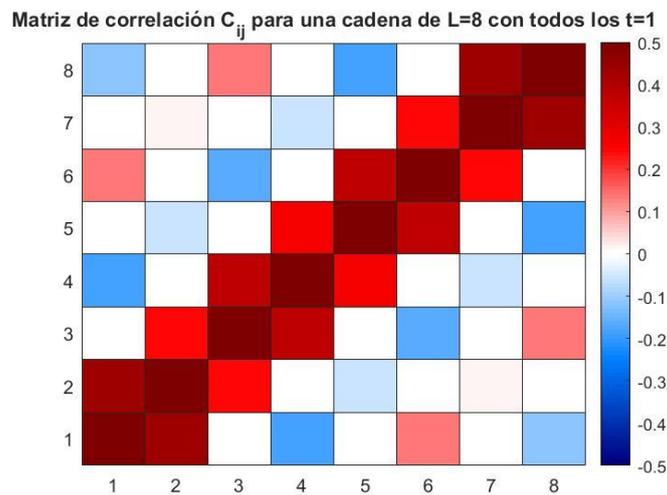


Figura 86: Matriz de correlación para una cadena de longitud  $L=8$ , con todos los parámetros de salto iguales  $t = 1$

En particular, es interesante observar cómo varía la correlación entre extremos, como se representa en la Figura 87 y Tabla 32.

Tabla 32: Correlación entre extremos de una cadena de distinta longitud con todos los enlaces  $t$  iguales

	$t$	$ C^B $
Cadena $L = 6$	1	0.151
Cadena $L = 8$	1	0.115
Cadena $L = 10$	1	$9.28 \cdot 10^{-2}$
Cadena $L = 12$	1	$7.81 \cdot 10^{-2}$
Cadena $L = 14$	1	$6.74 \cdot 10^{-2}$
Cadena $L = 16$	1	$5.93 \cdot 10^{-2}$

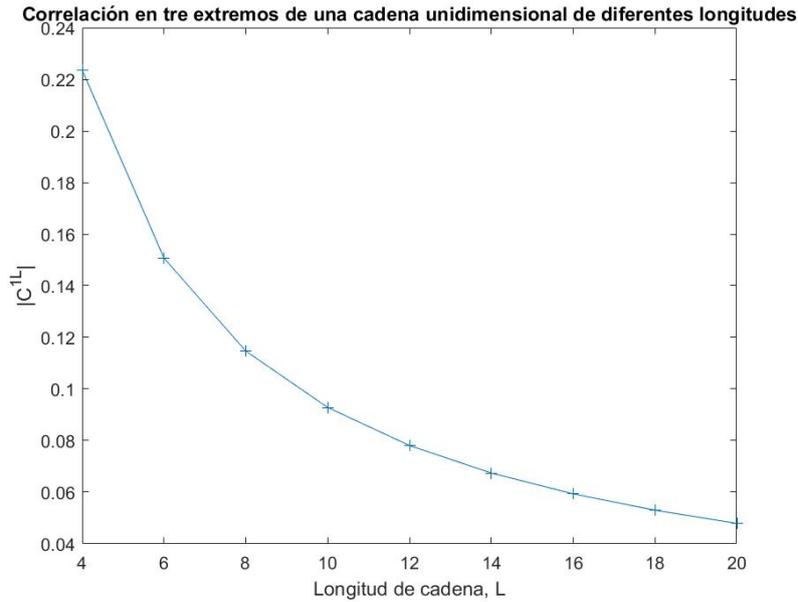


Figura 87: Correlación entre extremos de una cadena unidimensional con todos los  $t$  iguales

De la curva se puede deducir que una mayor longitud implica una menor correlación entre extremos.

Se vio en [8, 9] que la mejor manera de aumentar la correlación entre extremos era aislar dichos extremos mediante un enlace más fuerte entre el 2º y 3º elemento y el penúltimo y antepenúltimo, tal y como se muestra en la Figura 88.

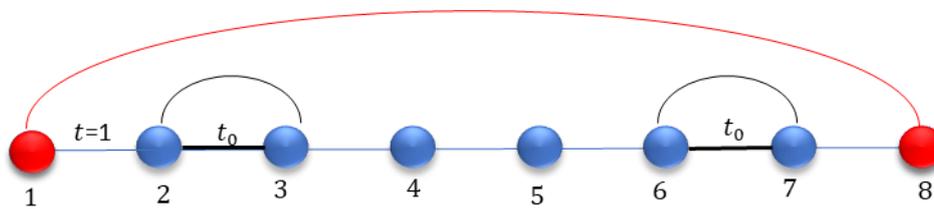


Figura 88: Cadena unidimensional con la correlación entre extremos mejorada ( $t_0 \gg t = 1$ )

Implementando este cambio en la cadena se consigue maximizar la correlación entre extremos hasta llegar a crearse un enlace a distancia entre ellos.

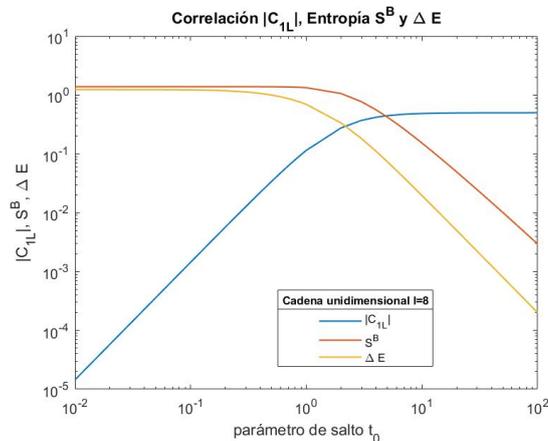


Figura 89: Correlación y entropía entre extremos y energía de la cadena unidimensional de la Figura 88

Se observa como a medida que aumenta el valor de  $t_0$  la correlación va aumentando hasta llegar a un valor máximo de  $|C^{1,L}| = 0.5$ . La presencia de este enlace a distancia se puede observar por medio de la entropía que desciende a medida que  $t_0$  aumenta. La energía también disminuye a medida que este enlace a distancia se crea, indicando la debilidad de dicho enlace.

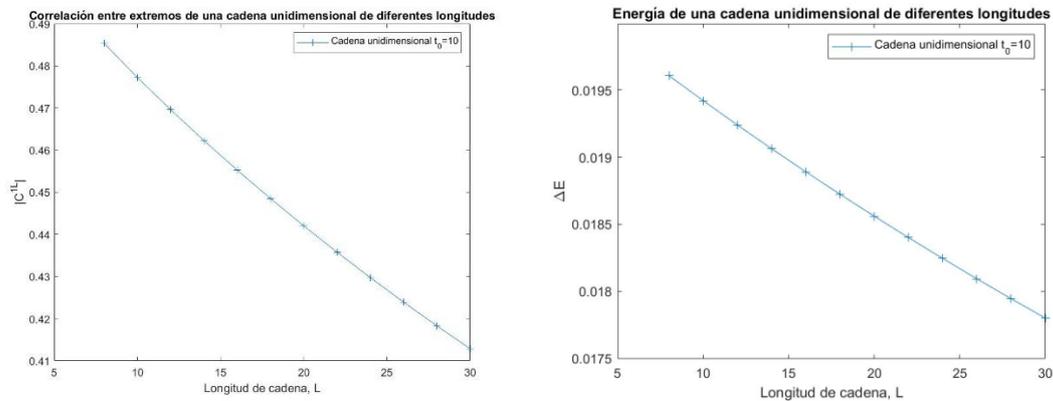


Figura 90: Correlación entre extremos y salto de energía para un parámetro de salto  $t_0$  fijo en función de la longitud de cadena

En la figura superior se aprecia como afecta la longitud de cadena a la intensidad de la correlación de la cadena para un  $t_0$  fijo. Una cadena más larga implica una mayor distancia entre los extremos y, por lo tanto, una menor correlación entre ellos. Lo mismo ocurre con el salto de energía, donde una mayor longitud implica una menor energía y menor estabilidad del enlace.

## Referencias

- [1] T. Giamarchi, A. Lucci, C. Berthod, "Introduction to Many Body Physics" (Universtiy of Geneva, 2008).
- [2] W.P. Lima, F.R.V. Araújo, D.R. da Costa, S.H.R. Sena, J.M. Pereira "Tight-Binding Model in First and Second Quantization for Band Estructure Calculations", (Brazilian Journal of Physics 2022)
- [3] F. Utermohlen, "Tight-Binding Model in the Second Quantization" (2018)
- [4] C. Dasgupta, S. K. Ma, "Lowtemperature properties of the random Heisenberg antiferromagnetic chain", Phys. Rev. B 22, 1305 (University of California, San Diego, 1980)
- [5] V. Alba, S. Santalla, P. Ruggiero, J. rodriguez-Laguna, P. Calabrese, G. Sierra "Unusual área-law violation in random inhomogeneous systems" (2018)
- [6] G. Ramírez, J. Rodríguez-Laguna, G. Sierra, "Etanglement in low-energy states of the random-hopping model", J. Stat. Mech. P07003, (Madrid, 2014)
- [7] J.K. Asbóth, L. Oroszlány, A. Pályi, "A short Course on Topological Insulator" (Springer, Berlin, 2016)
- [8] H. Santos, J.E. Alvaleros, J. Rodríguez-Laguna, "Engineering large end-to-end correlation in finite fermions chains", [arXiv:1809.06246](https://arxiv.org/abs/1809.06246) (2008)
- [9] H. Santos, J.E. Alvaleros, J. Rodríguez-Laguna, "Entanglement detachment in fermioninc systems", [arXiv:1809.06793](https://arxiv.org/abs/1809.06793) (2008)
- [10] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, "Quantum Mechanics Vol III" (Wiley-VCH 2020)
- [11] I. Peschel, "Calculation of reduced density matrices from correlation", J.Phys. [A: Math. Gen. 36, L205 \( 2003\)](https://doi.org/10.1088/0305-4616/36/1/L205)
- [12] I. Peschel, V. Eisler. "Reduced density matrices and entanglement entropy in free lattice models", J. Phys. A: Math. Theor. 42 504003 (2009)
- [13] G. Ramírez, J. Rodríguez-Laguna, G. Sierra, "From conformal to volumen-law for the entanglement entropy in exponentially deformed critical spin  $\frac{1}{2}$  chains", J. Stat. Mech. P10004 (2014)
- [14] D. Jaksch, P. Zoller, "The cold atom Hubbard toolbox", (Clarendon Laboratory, Oxford, 2004)
- [15] H. Metcalf, P. van der Straten, "Laser Cooling and Trapping", Springer (New York, 1999).
- [16] S. Milovanovic, F.M. Peeters, "Strained Graphene structures: from valletrionycs to pressure sensing" (University of Antwerp, 2017)