

# Control de estados cuánticos en puntos cuánticos mediante campos magnéticos.

por

**Alba Yanina Ramos**

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y  
Computación como parte de los requerimientos para la obtención del  
grado de

Doctora en Física

de la

Universidad Nacional de Córdoba

Director: Dr. Omar Osenda



Control de estados cuánticos en puntos cuánticos mediante campos magnéticos por Alba  
Yanina Ramos. Se distribuye bajo  
Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 2.5 Argentina.

## Resumen

La presente tesis se concentra en el control de estados cuánticos de un electrón el cual ha sido confinado en un punto cuántico. El control se realiza mediante la aplicación de campos externos al electrón confinado. La descripción cuántica del electrón se realiza en términos de la Aproximación de Masa Efectiva (EMA), la cual permite utilizar los parámetros macroscópicos y efectivos de los materiales involucrados. Esta aproximación ha sido utilizada para la descripción física de electrones confinados en estructuras semiconductoras nanoscópicas. Para optimizar el control de los estados se considera qué parámetros de diseño son más relevantes dependiendo de la situación. El diseño de un punto cuántico involucra las dimensiones y los materiales a utilizar.

## Abstract

This thesis focuses on controlling quantum states of an electron which has been confined in a quantum dot. Control is performed by applying external fields to the confined electron. The quantum description of the electron is in terms of Effective Mass Approximation (EMA), which allows the use of effective and macroscopic parameters of the materials involved. This approach has been used for the physical description of confined electrons in nanoscale semiconductor structures. To optimize the control of states it is considered which are the most relevant design parameters depending on the situation. The design involves the quantum dot size and materials to use.

**Palabras Clave:** estados resonantes, puntos cuánticos, control cuántico, campos magnéticos, método variacional.

### Clasificación:

**03.65.-w**, Quantum mechanics.

**03.65.Ge**, Solutions of wave equations: Bound states.

**03.65.Aa**, Quantum systems with finite Hilbert space.

**03.67.Lx**, Quantum computation architectures and implementations.

**31.15.xt**, Variational techniques.

**73.22.-f**, Electronic structure of nanoscale materials and related systems.



# Agradecimientos

A lo largo de todos estos años viví muchas experiencias que me hicieron crecer desde lo académico y lo personal. Es por ello que quiero agradecer a mi director Omar Osenda, en quien encontré a un consejero, una persona que siempre estuvo allí cuando la necesité, que siempre tenía todo pensado y me calmaba en momentos de ansiedad. También a su familia por su buena onda y los buenos momentos compartidos.

Esta etapa no la pude haber realizado sin el apoyo de Lucas, va un enorme agradecimiento a él, que siempre estuvo a mi lado en los buenos y malos momentos y con quien me gustaría compartir el resto de mi vida.

A mi familia, que siempre estuvo a mi lado a pesar de la distancia y que siempre me mandaban mensajes de ánimo cerca de la fecha de entrega.

A todos mis amigos y en especial a mis amigos de las oficinas 231 y 232 (Ivana, Pablo, Nirvana, Leo, Iván, Fede C., Fede G, Marco, David, Carla, Tabi, Andrés, Mauri, Ana, Anita) con quienes compartí muchísimos almuerzos y juntadas. Con ellos hicimos armábamos las charlas de autoayuda cerca de entrega de la tesis. A mis amigos de básquet (Alvi, Pablo P., Ivana, Lucas, Mariano, Luis, Gabi, Dafna, Gastón, Yirana, Pablo G., Ivan Gomez, Ivan Gentile, Eze, Javi) los jueves de básquet hacían que cualquier mal día se me olvidara, fué siempre mi cable a tierra. A la gente de las olimpiadas Conicet, esos tres días de deportes me sirvieron para continuar trabajando en el año como si comenzara uno nuevo.

A toda la gente que conforma la FaMAF, tanto docentes como no docentes. En especial a gente de Codepo por responder todas nuestras preguntas y siempre con buen humor.

Al mi comisión asesora y mi tribunal de tesis por tomarse el tiempo de leer mi tesis y aportar para que mejorara tanto su estructura y redacción como las nuevas ideas para el futuro.

También quisiera agradecer al Conicet, por las dos becas otorgadas que me posibilitaron la financiación de esta etapa de estudios de posgrado. Además agradezco a Conicet y Secyt, cuyos subsidios permitieron financiar nuestros proyectos de grupo y gracias a los cuales pudimos realizar viajes a congresos y escuelas, los cuales fueron fundamentales para mi formación.



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>v</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>15</b>
1.1. Los avances tecnológicos y la mecánica cuántica . . . . .	15
1.2. Una visión histórica del desarrollo de la información cuántica . . . . .	17
1.3. Puntos cuánticos . . . . .	18
1.3.1. Átomos artificiales y el estudio de la física atómica . . . . .	19
1.3.2. Su importancia en la información y computación cuánticas . . . . .	20
1.4. Organización de esta tesis . . . . .	21
<b>2. Marco teórico y métodos para caracterizar estados resonantes</b>	<b>25</b>
2.1. Marco teórico general de estados ligados, resonantes y no localizados . . . . .	25
2.2. Resonancias . . . . .	26
2.3. Tratamiento de estados resonantes . . . . .	28
2.3.1. Cálculos mecánico-cuánticos de resonancias en el formalismo Hermitiano . . . . .	28
2.3.2. A partir de un formalismo de mecánica cuántica no hermitiana . . . . .	32
<b>3. Estados resonantes en puntos cuánticos con campo magnético constante</b>	<b>43</b>
3.1. Introducción . . . . .	43
3.2. Modelo . . . . .	46
3.3. Detectando los estados de resonancia usando rotación exterior compleja . . . . .	50
3.4. Detectando los estados de resonancia usando la probabilidad de localización . . . . .	56
3.5. Detectando los estados de resonancia usando fidelidad . . . . .	58
3.6. Localización de la resonancia . . . . .	59
3.7. Discusiones . . . . .	60
<b>4. Propiedades espectrales de un modelo de qubit híbrido</b>	<b>65</b>
4.1. Introducción . . . . .	65
4.2. Modelo unidimensional de Tokura . . . . .	68
4.3. Propuesta de modelo bidimensional . . . . .	71
4.3.1. Implementación del cálculo numérico . . . . .	75
4.3.2. Modelo unidimensional . . . . .	77

4.3.3. Modelo bidimensional . . . . .	85
4.3.4. Modelo bidimensional confinado en $y$ . . . . .	88
4.4. Modelo bidimensional óptimo . . . . .	91
<b>5. Dinámica</b>	<b>101</b>
5.1. Introducción . . . . .	101
5.2. Oscilaciones de Rabi: dinámica de un sistema de dos niveles . . . . .	102
5.3. Control sinusoidal de un electrón . . . . .	104
5.3.1. Métodos de resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo . . . . .	105
5.3.2. Pérdida . . . . .	108
5.4. Dinámica modelos bidimensionales . . . . .	109
5.4.1. Dinámica para el modelo bidimensional ideal . . . . .	113
<b>6. Conclusiones y perspectivas</b>	<b>119</b>
<b>A. Métodos aproximados para estados estacionarios</b>	<b>121</b>
A.1. Método perturbativo . . . . .	121
A.2. Método variacional de Rayleigh-Ritz . . . . .	123
<b>B. Algunos elementos de matriz del punto cuántico cilíndrico</b>	<b>127</b>
B.1. Rotación exterior compleja . . . . .	129
<b>C. Trayectorias para <math>B &lt; 5[T]</math> y ancho de resonancia</b>	<b>133</b>
<b>D. Algunos gráficos extra del punto cuántico híbrido</b>	<b>135</b>
D.1. Problema unidimensional . . . . .	135
D.2. Bidimensional . . . . .	136
D.3. Bidimensional confinado en $y$ . . . . .	136
<b>E. Reducción del problema generalizado al problema estándar</b>	<b>143</b>
<b>F. Elementos de matriz e integrales conocidas que se usaron para resolver el problema del punto cuántico híbrido</b>	<b>145</b>
F.1. Términos diagonales . . . . .	145
F.2. Términos no diagonales . . . . .	146
F.3. Momento . . . . .	147
F.4. Integrales . . . . .	147
<b>G. Transformando una matriz Hermitiana a una matriz simétrica</b>	<b>151</b>
<b>H. Algunos gráficos extra asociados a la dinámica del punto cuántico híbrido</b>	<b>153</b>



# Índice de figuras

1.1.	La figura muestra los avances tecnológicos en microprocesadores hasta el año 2015. Está basada en los datos de M. Horowitz, F. Labonte, O. Shacham, K. Olukotun, L. Hammond y C. Batten. Later hasta el año 2010. Karl Rupp agregó los datos de los procesadores de AMD Opteron, Intel Xeon, Power+ y Power8, así como los de la Xeon Phi, y extendió el gráfico hasta el 2015 (ver <a href="https://www.karlrupp.net/2015/06/40-years-of-microprocessor-trend-data/">https://www.karlrupp.net/2015/06/40-years-of-microprocessor-trend-data/</a> ). . . . .	16
2.1.	La figura muestra un potencial efectivo que modela el proceso de decaimiento $\alpha$ . La energía de resonancia $E_1$ se encuentra entre la energía del estado ligado $E_0$ y el umbral de confinamiento. . . . .	27
2.2.	En esta figura se observa un gráfico típico de <i>estabilización</i> . Se utilizó el método de Rayleigh-Ritz para obtenerlo. Se muestra energía en unidades atómica vs. parámetro variacional no-lineal $\eta$ . Los parámetros que se usaron fueron $a = -8[u.a.]$ (profundidad del pozo) y $b = 5[u.a.]$ (altura de la barrera), con 50 funciones de prueba. Se puede apreciar que para $E \sim 0,99[u.a.]$ tenemos una resonancia. . . . .	30
2.3.	En esta figura se muestran los posibles autovalores del Hamiltoniano $H(\theta)$ . Los estados ligados son autovalores aislados del Hamiltoniano al igual que las resonancias. Las resonancias tienen la $Im(E) < 0$ . El umbral es el valor a partir del cual comienza el espectro continuo. Los estados continuo son rotados un ángulo $2\theta$ con respecto al eje real. La posición de las resonancias, al igual que la posición de los estados ligados son independiente de $\theta$ . <i>Gráfico extraído de la referencia [7]</i> . . . . .	33
2.4.	Espectro aproximado que se obtiene utilizando el método de Rayleigh-Ritz. Los autovalores correspondientes a los estados ligados y a las resonancias se encuentran “aislados” del continuo rotado. El continuo se separa en varios conjuntos de puntos que forman un ángulo $2\theta$ con el eje real. Los distintos conjuntos obedecen a que el sistema puede presentar varios umbrales. Las resonancias se identifican con los autovalores cuya posición cambia suavemente con el ángulo de rotación, mientras que el continuo siempre forma un ángulo $2\theta$ con el eje real. Figura extraída de la referencia [7] . . . . .	36

- 2.5. Ancho de la resonancia,  $\Gamma(\theta)$ , en función de la parte real de la energía del estado resonante,  $E(\theta)$ , donde  $\theta$  es el ángulo de rotación de la transformación. Se muestran posibles trayectorias de un autovalor aproximado asociado a una resonancia cuando se varía el ángulo  $\theta$ . El valor más preciso se considera aquel que “estabiliza” la trayectoria. a) Es una trayectoria en la que las energías de la resonancias empiezan a acercarse cada vez más a la anterior a medida que aumenta  $\theta$ , hasta que empiezan a alejarse, el punto e el que se realiza ese cambio es el que se corresponde con el  $\theta_{opt}$ . En b) el  $\theta_{opt}$  se obtiene para el ángulo en donde la pendiente es nula. c) Muestra que hay dos trayectorias y se cruzan,  $\theta_{opt}$  es el ángulo asociado al punto de cruce. Figura extraída de la referencia [7]. . . . . 37
- 3.1. En el panel de la izquierda se muestra un esquema en donde se encuentran las bandas de conducción y de valencia. En un punto cuántico semiconductor una diferencia de potencial saca un electrón de la banda de valencia y lo lleva a la banda de conducción, en ese caso hablamos de un punto cuántico de un electrón. En el panel de la derecha el pozo de potencial puede formarse a partir de dos materiales semiconductores de diferentes valores de gaps entre la banda de valencia y la de conducción. . . . . 45
- 3.2. En el panel izquierda se muestra el perfil del potencial que depende de  $z$ , mientras que en el panel derecho se muestra una representación del potencial en tres dimensiones. Las barreras del perfil del panel izquierdo se representan como discos en el potencial tridimensional del panel derecho. . . . . 47
- 3.3. a) En este panel se muestra el espectro variacional y los niveles de Landau exactos (NL) en [meV] en función de la intensidad del campo magnético  $B$  en [T]. Las curvas negras corresponden al espectro obtenido con el método variacional y las rojas a los niveles NLs. b) En este panel se muestra la zona alrededor del segundo NL, se puede ver como los niveles que cruzan por encima del segundo NL tienen varios cruces evitados. c) Este panel muestra la diferencia entre los primeros cuatro autovalores variacionales  $E_n^v$  y el primer NL, es decir  $E_{NL}(0,0)$  en función de  $B$ . Cuando la diferencia es menor que cero,  $E_1^v$  cruza el primer NL, cuando  $E_1 < E_{NL}(0,0)$  el estado se localiza, eso coincide con el cambio de pendiente del estado fundamental que se observa en a).d) Autovalores sobre el primer NL. El gráfico muestra como los autoestados son, básicamente paralelos al primer NL y se acumulan sobre él. . . . . 49
- 3.4. La curva en línea entrecortada azul corresponde al campo magnético en función del radio del menor nivel de Landau. El punto naranja indica el valor aproximado del campo magnético en el cuál se produce la localización del sistema y en la abscisa el ancho del pozo  $a_\rho = 7[nm]$ . Esta información fué obtenida a partir del gráfico c) de la figura 3.3. . . . . 51

- 3.5. Parte imaginaria *vs* parte real de los autovalores de la matriz obtenida luego de la transformación de *similaridad*. Se realizó una rotación de  $\theta = 0,12$  a campo fijo  $B = 5 [T]$ . Cada recta está asociada a los *continuos* que están determinados por los Niveles de Landau (NL). El punto que se encuentra en el recuadro rojo es el que corresponde a la energía de la resonancia. Al cambiar el valor de la rotación del continuo la posición de este punto debería modificarse muy poco. Para elegir el valor óptimo de  $\theta$ ,  $\theta_{opt}$  hay que ampliar la zona en donde se encuentran estos puntos para diferentes ángulos de rotación, como se muestra en la figura 3.6(b). . . . . 52
- 3.6. a) La parte imaginaria *vs* la parte real de los autovalores de la matriz obtenida luego de la transformación de *similaridad*. Todos los autovalores fueron calculados para  $B = 5 [T]$  y diferentes ángulos de rotación. Cada manojito de datos tiene valores de ángulo de  $\theta = 0,10$  (puntos negros rellenos),  $\theta = 0,11$  (cuadrados rojos rellenos),  $\theta = 0,12$  (diamantes verdes rellenos), siguiendo así hasta  $\theta = 0,20$  (triángulos verdes sin relleno), cada recta se corresponde con un ángulo diferente y están ordenadas de menor a mayor valor del ángulo. Los tres abanicos de datos están relacionados con los tres primeros NL. Para este valor de campo los dos primeros abanicos se mezclan aproximadamente cuando  $Re(E(\theta)) = 27 [meV]$ . Para  $B < 5 T$ , los abanicos se mezclan antes y se complica determinar la posición de la resonancia. b) Trayectoria  $\theta$  de los autovalores variacionales de la resonancia. Es una ampliación de la zona en donde se acumulan los puntos en (a) y se encuentra encerrada por una elipse de contorno rojo, alrededor de  $Re(E(\theta)) = 21 [meV]$  aproximadamente. . . . . 53
- 3.7. a) Parte real de la energía del estado resonante en función de la intensidad del campo magnético. La curva de cuadrados azules se corresponde con las energías de la resonancia y las dos líneas sólidas se corresponden con los dos niveles más bajos de energía de los Niveles de Landau. El valor de  $B = 0$  fué obtenido realizando la rotación compleja en las coordenadas  $\rho$  y  $z$ . b) El ancho de la resonancia *vs* el campo magnético. Cuando el campo magnético incrementa su valor, el ancho de la resonancia tiende a cero, es decir, se localiza. . . . . 54
- 3.8. Las figuras ejemplifican la forma de obtener las energías y anchos de la resonancia para  $B \leq 5 [T]$ . a) En puntos negros se observa el escaleo complejo para  $B = 1 [T]$  y  $\theta = 0,08$ . Se hace uso de que el escaleo complejo rota  $2\theta$  el continuo y que cada manojito de la figura 3.7(a) está relacionado con los NL. En rojo se muestra la recta que se define a partir de los datos anteriores. b) Se muestra en flechas cómo cambian los estados de  $\theta = 0,06$  a  $\theta = 0,07$  a campo  $B = 3 [T]$ , como los estados forman rectas, las flechas encerradas en círculo rojo son las que se corresponden a estados resonantes. por otra parte se puede entender qué puntos pertenecen a qué abanico de datos a partir de la ecuación (3.14). . . . . 55

- 3.9. La probabilidad de localización *vs* la intensidad del campo magnético. El panel izquierdo muestra  $P_1$  (en línea continua negra), es decir, la probabilidad correspondiente al menor autovalor variacional, con escalas de valores en el eje derecho, y  $\langle |z| \rangle_1$  [nm] (en línea entrecortada roja), con escala de valores en el eje izquierdo. Para campos magnéticos lo suficientemente pequeños los autoestados variacionales se extienden sobre una región mucho más grande que la longitudes características del punto cuántico. Cuando  $B \gtrsim 17$  [T] los autoestados comienzan a localizarse, como muestra el repentino incremento de  $P_1$ . En el panel derecho de arriba hacia abajo se muestran,  $P_2$  (línea continua),  $P_3$  (línea punteada), ...,  $P_8$ . La probabilidad de localización muestra picos cuando los autovalores correspondientes cruzan cerca de una resonancia. . . . . 57
- 3.10. La función  $\mathcal{G}_n$  *vs* la intensidad del campo magnético. La figura muestra la función de las primeras seis autofunciones variacionales,  $\mathcal{G}_1$  (en línea continua),  $\mathcal{G}_2$  (en línea punteada),  $\mathcal{G}_3$  (línea entrecortada), ...,  $\mathcal{G}_6$  (en doble punto y línea). El punto donde las curvas alcanzan su máximo es claramente apreciable.  $B_n$  se determina por el valor de la abscisa en el cual se encuentra el pico. . . . . 59
- 3.11. La parte real de energía de la resonancia calculada usando los tres métodos explicados a lo largo de este capítulo: rotación exterior compleja (cuadrados azules rellenos), localización (círculos negros no rellenos) y fidelidad (diamantes magenta no rellenos). La energía de los estados resonantes que se encuentran por encima del segundo NL pueden obtenerse usando una versión modificada de la rotación exterior compleja ver figura 3.8(a) y (b), los mismos se muestran en cuadrados azules vacíos. . . . . 60
- 3.12.  $E_n(B_n)$  *vs* la intensidad del campo magnético. La figura muestra los datos obtenidos usando diferentes tamaños de base,  $N = 30 \times 30$ , triángulos no rellenos;  $N = 40 \times 40$ , cuadrados no rellenos;  $N = 50 \times 50$ , diamantes no rellenos; y  $N = 60 \times 60$ , puntos rellenos. . . . . 61
- 3.13. Los campos críticos  $B_p(a_\rho)$  y  $B_{\mathcal{F}}(a_\rho)$  *vs* el radio del punto cuántico. La campo crítico obtenido con la probabilidad de localización (cuadrados rojos rellenos) y el obtenido con la fidelidad (puntos negros rellenos) son mostrados para varios valores de radios del punto cuántico. La línea entrecortada es la intensidad del campo magnético en función de la curva correspondiente al radio del menor NL. Queda claro que cuando los radios del punto cuántico son chicos la localización se realiza cuando la función de onda cilíndrica se introduce en el pozo del punto cuántico. Para radios grandes del punto cuántico la localización es dominada por el pozo de potencial y no por el campo magnético. . . . . 62

4.1.	Modelo de un punto cuántico unidimensional en un campo transversal Zeeman. En gris oscuro se muestran los electrodos ferromagnéticos los cuales son colocados en la dirección $x$ , uno en sentido positivo y otro en el sentido contrario, creando así una variación en el campo magnético $b_{sl}$ . Al sistema se le aplica un campo magnético uniforme $B_0$ en la dirección $z$ . El espín del punto cuántico es controlado mediante la aplicación de un voltaje oscilante $V_{ac}$ entre los dos electrodos. Figura extraída de la referencia [33]. . . . .	68
4.2.	a) Representación esquemática de cómo la oscilación espacial entre las funciones de onda y $ +\rangle$ y $ -\rangle$ implican hibridización de múltiples estados. b) Espectro del punto cuántico con dos niveles orbitales de energía separados una distancia $\Delta_{2,1}$ y energía Zeeman constante $\varepsilon_{0z}$ con y sin gradiente $b_{sl}$ . Los niveles más bajos constituyen el qubit: $G_+$ y $G_-$ . Figura extraída de la referencia [33]. . . . .	69
4.3.	Factor de Calidad $Q$ en función del campo magnético $B_0$ para una operación de qubit. Se muestran tres valores de confinamiento del oscilador armónico, para $\hbar\omega_0 = 0,5[meV]$ en línea continua, $\hbar\omega_0 = 1,0[meV]$ en línea entrecortada y $\hbar\omega_0 = 1,5[meV]$ en línea punteada. Figura extraída de la referencia ???. . . . .	71
4.4.	Modelo bidimensional basado en el unidimensional propuesto por Tokura. La dimensión extra se extiende en la dirección $y$ . Nuevamente en gris oscuro se observan las cintas ferromagnéticas, las cuales general un gradiente de campo $b_{sl}$ , en la dirección $z$ se aplica un campo magnético constante $B_0$ . Sobre los electrodos se aplica una diferencia de potencial $V_{ac}$ variable en el tiempo. . . . .	72
4.5.	Los gráficos muestran la estabilidad del sistema unidimensional en función del parámetro variacional no lineal $\eta$ en ausencia de campos magnéticos y de asimetría en el potencial ( $\gamma = 0$ ). Los parámetros fijados son: $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ , $\alpha = 0,067$ , el tamaño de la base es de $n_z = 50$ . No consideramos el espín porque el espectro sería el mismo pero con una doble degeneración. En a) el valor de $a = 30 [nm]$ , en b) $a = 50[nm]$ , en c) $a = 80 [nm]$ y en d) $a = 100 [nm]$ . Se puede observar que este sistema es bastante estable y es posible elegir el mismo parámetro variacional para los diferentes valores de $a$ . 78	78
4.6.	Los gráficos muestran la energía en función de la mitad entre la separación entre los pozos del potencial cuántico. En el gráfico de la izquierda se observa que a medida que aumenta $a$ , el gap entre los niveles cada vez es menor. En el gráfico de la derecha se puede ver la diferencia entre energías consecutivas. La línea continua negra se observa la diferencia entre el estado fundamental y el primer estado excitado ( $E_1 - E_0$ ), la línea entrecortada muestra: $E_2 - E_1$ , en línea punteada: $E_3 - E_2$ y luego las líneas consiguientes muestran el mismo comportamiento físico y crecen consecutivamente en el valor de sus diferencia de energías. . . . .	79

- 4.7. El gráfico de la izquierda muestra energía en función del campo magnético constante  $B_0 [T]$ . Se comprueba la eliminación de la degeneración de las energías y con crecimiento lineal con el valor del campo. Otra característica importante son los cruces evitados de las energías, cada una de ellas se corresponde con un cambio de la orientación de espín de cada auto-valor como se puede comprobar en el gráfico de la derecha que muestra el valor de expectación de  $\sigma_z$  en función de  $B_0$ . En este gráfico se muestra el valor de expectación de los 4 primeros niveles de energía del sistema. En línea negra sólida se muestra el estado fundamental, en rojo entrecortado el primer estado excitado, en verde punteado el segundo estado excitado y en azul de punto y línea es el correspondiente al tercer estado excitado. . . . . 81
- 4.8. .En el panel izquierdo se muestran las primeras tres diferencias entre las energías consecutivas ( $\Delta_{n+1,n} = E_{n+1} - E_n$ ) con respecto  $B_0$ , para  $b_{sl} = 1,16 T/\mu m$  y  $\gamma = 0,1$ . Mientras que en el derecho  $\Delta_{n+1,n}$  se muestran las primeras cuatro respecto a  $b_{sl}$ , para  $B_0 = 0,5T$  y  $\gamma = 0,1$ . En línea negra continua se muestra  $\Delta_{1,0}$ , en roja entrecortada  $\Delta_{2,1}$ , en verde punteada  $\Delta_{3,2}$  y en azul de punto y línea  $\Delta_{4,3}$ . . . . . 82
- 4.9. Estos gráficos muestran los valores de expectación en diagrama de colores, en función del campo gradiente  $b_{sl}$  en el eje  $y$  y del campo magnético constante  $B_0$  en el eje  $x$ . En los gráficos de la izquierda se muestran los valores de expectación asociados al estado fundamental y en los de la derecha los del primer estado excitado. Los paneles superiores muestran  $\langle \sigma_x \rangle$  y los inferiores  $\langle z/a \rangle$ . Se puede ver que los estados que buscamos (auto-estados de  $\sigma_x$  y distinto autovalor y en distintos pozos) se obtendrán para valores chicos de  $B_0$ , y que aumentando el valor de  $b_{sl}$  nos acercamos cada vez más a ese objetivo. Con respecto a los valores de expectación de  $z/a$  vemos que la función de onda del estado fundamental siempre está en el pozo izquierdo para todos los valores de  $B_0$  y el del primer excitado en el izquierdo para valores chicos de  $B_0$ , mientras que cuando aumentan  $b_{sl}$  y  $B_0$  se encuentra en el pozo derecho. . . . . 83
- 4.10. Valores de expectación en función de  $b_{sl}$  para  $B_0 = 0,1[T]$  fijo. Se ve como en esta configuración de parámetros los estados son prácticamente autoestados de  $\sigma_x$ , y si elegimos el valor de  $b_{sl}$  apropiado, el estado fundamental y primer excitado se encuentran en pozos separados pero no centrados en ellos. . . . 85
- 4.11. Energía en  $[meV]$  en función del campo contante  $B_0[T]$  a  $b_{sl} = 1,16[meV]$  fijo. En la izquierda se muestra el espectro del sistema mientras que a la derecha se restan los valores de energías consecutivas. En línea continua negra se encuentra  $\Delta_{1,0}$ , energía del primer estado excitado menos la energía del estado fundamental  $E_0$ , en línea roja entrecortada  $\Delta_{2,1}$  y en verde punteada  $\Delta_{3,2}$ . . . . . 86

4.12. Se muestran los valores de expectación en función de  $B_0[T]$  para  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$ . En el panel izquierdo se encuentra el valor de expectación de  $\sigma_x$  y en el derecho el de  $z/a$ . En línea negra continua se muestra el estado fundamental, en roja entrecortada el primer estado excitado, en verde punteada el segundo excitado y en azul de punto y línea el tercer excitado. . . . . 87

4.13. Se muestran los valores de expectación en función de  $b_{sl}$  y  $a = 100[nm]$ . En el panel izquierdo se encuentra el valor de expectación de  $\sigma_x$  y en el derecho el de  $z/a$ . Para  $b_{sl}$  mayores a  $0,5 [T/\mu m]$  ya se hay sabemos que los estados fundamental y primer excitado se encuentran en pozos diferentes. . . . . 88

4.14. En el panel izquierdo se muestra la energía en función del campo magnético  $B_0$  para  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $a = 70 [nm]$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$  y  $\omega_y = 5 [meV]$ . En el panel de la derecha se muestra las diferencias entre energías consecutivas, en línea negra continua se muestra  $\Delta_{1,0}$ , en línea entrecortada roja  $\Delta_{2,1}$  y en verde punteada  $\Delta_{3,2}$ . Se puede ver que el efecto del confinamiento en  $y$  disminuye la acumulación de estados para valores pequeños de  $B_0$  . . . . . 90

4.15. Se muestran los valores de expectación en función de  $b_{sl}$ . Los gráficos de la izquierda se realizaron con  $B_0 = 0,2[T]$  y  $\omega_y = 5[meV]$  y los de la derecha a  $B_0 = 0,3[T]$  y  $\omega_y = 1[meV]$ . . . . . 90

4.16. Espectro de energía obtenido con el método de Ritz en función del parámetro variacional no lineal  $\mu$  asociado a la coordenada  $y$ . Los autovalores son estables para un intervalo, cuyo ancho es más grande que el más pequeño de los autovalores. El actual tamaño del intervalo se puede extender mediante el incremento de la cantidad de funciones que componen la base. . . . . 91

4.17. Espectro aproximado *vs* el campo magnético  $b_{sl}a$ . El espectro está compuesto por pares de estado casi degenerados, por eso en la escala en la que se muestra la figura, cada línea está formada por dos niveles de energía muy cercanos. Para los parámetros usados, ver el texto, los tres primeros pares de niveles no muestran cruces evitados. . . . . 92

4.18. Los valores de expectación de los operadores ( $z/a$  (panel izquierdo)) y  $\sigma_x$  (panel derecho)) como función del campo magnético  $b_{sl}a$  para los primeros cuatro autoestados. En cada gráfico, los rótulos  $E_0, E_1, E_2$  y  $E_4$  corresponden a los valores obtenidos para el estado fundamental, primer, segundo y tercer estados excitados, respectivamente. Está claro que en este régimen, los autoestados están fuertemente localizados alrededor del centro de los pozos del potencial, el estado fundamental está localizado el el pozo de la izquierda y el primer estado excitado, en el de la derecha. Los estados se acercan cada vez más a ser autoestados de  $\sigma_x$  mientras aumenta el valor del campo magnético. . . . . 93

- 4.19. En los paneles a) y b) se muestran las diferencias de energías entre el primer estado excitado y el estado fundamental en función de  $b_{sla}$ , el panel b) es una ampliación en la zona con energías de  $\hbar\omega_0$  entre 25 y 40[meV]. En los paneles c) y d) se muestran los valores de expectación para el nivel fundamental de los operadores  $\sigma_x$  y  $z/a$ , respectivamente, todos como función de la intensidad del campo magnético  $b_{sla}$  y para diferentes características del QD con energías de  $\hbar\omega_0 = 20, 25, 30, 35$  y 40 meV. . . . . 95
- 5.1. En este esquema se muestra un sistema de dos niveles que tiene autoestados  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$ , el electrón recibe una energía  $\hbar\omega$ , donde  $\omega = \omega_0 + \Delta$ , y  $\Delta$  es el cambio de la frecuencia respecto a la de resonancia. . . . . 102
- 5.2. Se muestran las probabilidades asociadas a los estados  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  en función del tiempo en  $\Omega^{-1}$ . En línea negra continua se representa  $|C_1|^2$  y la roja entrecortada es  $|C_2|^2$ . Los gráficos superiores tiene  $\Delta = 0$ , el de la izquierda tiene  $\Omega = 2\pi$ , y el de la derecha  $\Omega = 4\pi$ . Los gráficos inferiores tienen  $\Omega = 2\pi$  fijo, el gráfico izquierdo tiene  $\Delta = 2\pi$  y el de la derecha  $\Delta = 4\pi$ . . 104
- 5.3. En el panel izquierdo se muestra Pérdida promedio en función del forzamiento  $A_0$ . En el derecho se muestra la transmisión  $|C_1|_{max}^2 - |C_1|_{min}^2$  vs.  $A_0$ . En línea negra continua se muestra el S1, en rojo entrecortado el S2, en verde punteado el S3, en azul punto y línea S4, naranja con puntos S5, marrón con cuadrados S6. La frecuencia de control coincide con la frecuencia de resonancia, es decir,  $\omega = \omega_{res}$ . . . . . 111
- 5.4. Se muestra período  $T$  en función del forzamiento, sólo mostramos los sistemas que nos proporcionaban un *buen* estado inicial. En línea negra continua se encuentra S5, rojo entrecortado S6 y en verde punteado S4, mientras menor es el valor de forzamiento mayor es el tiempo que tarda el sistema en permutar entre los estados. . . . . 112
- 5.5. Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para S6. El panel superior izquierdo se hace con forzamiento  $A_0 = 0,01$ , el central con  $A_0 = 0,05$ , el de la derecha  $A_0 = 0,1$ , el central izquierdo  $A_0 = 0,2$ , el central  $A_0 = 0,3$ , el derecho  $A_0 = 0,7$  y siguientes inferiores, izquierdo  $A_0 = 1,0$ , central  $A_0 = 1,5$ , derecho  $A_0 = 1,6$  y el último  $A_0 = 1,8$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%. . . . . 114
- 5.6. Pérdida y transmisión vs  $A_0$ . Para el sistema S6. Línea negra continua  $\omega = \omega_{res}$ , roja entrecortada  $\omega = 1,01\omega_{res}$ , verde punteada  $\omega = 1,05\omega_{res}$  y azul punto y línea  $\omega = 1,10\omega_{res}$ . . . . . 115



5.7. Pérdida promedio en función del forzamiento para diferentes valores de frecuencia. En negro y punto circulares se muestra la frecuencia coincidente con la de resonancia, en rojo con puntos cuadrados  $\omega = 1,01 \times \omega_{res}$ , en verde con puntos de diamantes  $\omega = 1,05 \times \omega_{res}$  y en azul con triángulos  $\omega = 1,10 \times \omega_{res}$ . El gráfico superior izquierdo corresponde a  $a = 20[nm]$ , el superior derecho a  $a = 25[nm]$  y el inferior izquierdo a  $a = 30[nm]$ . El último es una comparación entre los diferentes tamaños mostrados anteriormente en donde se agregó además la pérdida para  $a = 22[nm]$ . En todos los casos la frecuencia del sistema coincide con la frecuencia de resonancia. . . . . 116

C.1. Se muestra la (o las) trayectoria (trayectorias)  $\theta$  para diferentes valores del campo magnético. El panel superior izquierdo muestra la trayectoria para  $B = 1 [T]$ , el superior derecho para  $B = 2 [T]$ , el inferior izquierdo para  $B = 3 [T]$  y el inferior derecho para  $B = 4T$ . Se puede ver que para los tres campos más bajos hay dos trayectorias. . . . . 134

C.2. Se muestra el ancho de la resonancia en función del campo magnético  $B$ . Cada punto se obtuvo con el método de rotación exterior compleja. Los puntos rojos vacíos se obtuvieron con el método mostrado en la sección 3.3. Con ese criterio se construyeron las trayectorias que se muestran en la figura C.1. . . . . 134

D.1. Se muestra la energía en función del campo gradiente  $b_{sl}$ . En el panel izquierdo el primero el campo magnético constante es nulo y el potencial es simétrico. El derecho cambia respecto al izquierdo en que se le agrega un término de asimetría al potencial  $\gamma = 0,1$ . . . . . 135

D.2. Estos gráficos muestran los valores de expectación de  $\sigma_z$  en diagrama de colores, en función del campo gradiente  $b_{sl}$  en el eje  $y$  y del campo magnético constante  $B_0$  en el eje  $x$ . En el gráfico de la izquierda se encuentra el valor de expectación asociado al estado fundamental y en el izquierdo el asociado al primer estado excitado. Notemos que el aumento de  $B_0$  hace que tengamos auto-estados de  $\sigma_z$  con autovalor 1 tanto para el estado fundamental como para primer estado excitado sin importar el valor de  $b_{sl}$ . . . . . 136

D.3. Se muestran los valores de expectación en función de  $B_0[T]$  con  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$ . En línea negra continua se muestran los valores de expectación para el estado fundamental, en línea roja entrecortada los del primer estado excitado, en verde punteadas las del segundo estado excitado y en azul de punto y línea los del tercer estado excitado. A medida que aumenta  $B_0$ , los estados se convierten en autestados de  $\sigma_z$ , lo cual es razonable porque los espines intentan alinearse con el campo. Los auto-estados no se encuentran centrado en los pozos, sino en  $a/2$  y  $-a/2$  para el estado fundamental y primer excitado respectivamente, mientras que los dos siguientes se encuentran en  $z = 0$ . . . . . 137

- D.4. Se muestran los valores de expectación en función de  $b_{sl}[T/\mu m]$  a  $B_0 = 0,5[T]$  fijo. Los diferentes tipos de líneas y colores se corresponden a valores de expectación para diferentes estados. Se muestran los primeros cuatro, en línea negra continua el fundamental, roja entrecortada el primer excitado, verde punteada el segundo y en azul punto y raya, el tercero. Se ve que a medida que aumenta el valor de  $b_{sl}$ , los estados aumentan su valor de expectación respecto a  $\sigma_x$  y disminuyen la de  $\sigma_z$ , en acuerdo con su rol en el Hamiltoniano,  $\omega_{sl}$  es un factor que acompaña a  $\sigma_x$  y  $\omega_c$  lo hace equivalentemente con  $\sigma_z$ , mientras que el valor de expectación de  $z/a$  tiende a cero cuando aumenta  $b_{sl}$ . . . . . 138
- D.5. Se muestran el valor de expectación de  $\sigma_z$  en función de  $B_0[T]$  para  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$ , para  $a = 70[nm]$ ,  $\hbar\omega_0 = 1[meV]$ ,  $\gamma = 0,1$ . . . . . 139
- D.6. Espectro en función de  $B_0$  para  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$  fijo. En el panel izquierdo se observa energía y en el derecho la diferencia entre energías sucesivas. . . 139
- D.7. Estos gráficos se realizaron para una separación entre los pozos de  $a = 100[nm]$  a  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$  fijo. En el gráfico de la izquierda se muestra la energía en función del campo  $B_0[T]$  y en el de la derecha se muestran las diferencias entre energías sucesivas. . . . . 140
- D.8. En estos gráficos de izquierda se muestra la energía en función del campo magnético  $B_0$  para  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $a = 70[nm]$  y  $\hbar\omega_0 = 1[meV]$ . En los gráficos de la derecha se muestra las diferencias de energía entre energías consecutivas, en línea negra continua se muestra  $E_1 - E_0$ , en línea entrecortada roja  $E_2 - E_1$  y en verde punteada  $E_3 - E_2$ . En los gráficos superiores  $\omega_y = 1[meV]$ , en los centrales  $\omega_y = 5[meV]$  y en los inferiores  $\omega_y = 10[meV]$ . En los gráficos de la derecha se puede ver como crece la energía cuando aumenta el valor de  $\omega_y$  mientras que en los de la izquierda se ve que la física del sistema es muy parecida. . . . . 141
- H.1. Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S1$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%. 153
- H.2. Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S2$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%. 154

- H.3. Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S3$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.155
- H.4. Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S4$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.156
- H.5. Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S5$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,01$ , el central con  $A_0 = 0,05$ , el de la derecha  $A_0 = 0,1$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,2$  y el derecho  $A_0 = 0,3$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.. . . . . 157



# Capítulo 1

## Introducción

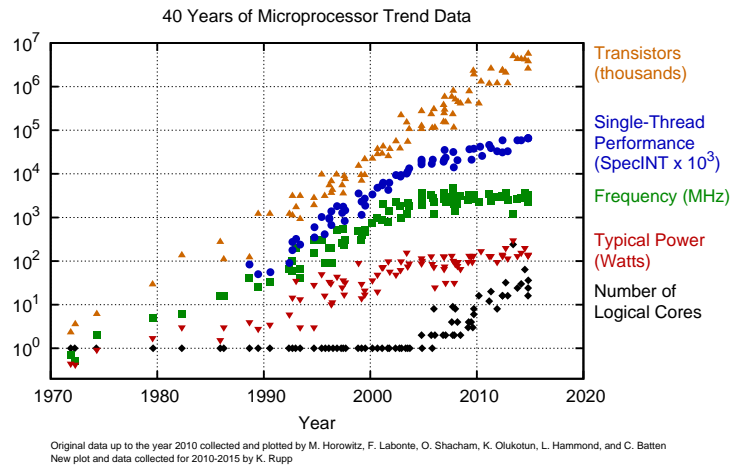
### 1.1. Los avances tecnológicos y la mecánica cuántica

Los electrones son la piedra basal de la revolución microelectrónica. Las leyes que gobiernan el comportamiento de los electrones son el fruto del desarrollo de la teoría de la mecánica cuántica y de la relatividad. En 1927, Erwin Schödinger ya había planteado su famosa ecuación pero el movimiento electrónico no estaba completamente explicado si no se tenía en cuenta su carácter relativista. En los siguientes años llegó la solución a este problema, con el desarrollo de la ecuación de Dirac. Esta ecuación trajo consigo dos predicciones completamente inesperadas desde el punto de vista científico. La primera fue la existencia de las *antipartículas* y la segunda, que se pone de manifiesto que el momento angular intrínseco del electrón puede tener dos posibles orientaciones. Toda esta nueva información permitió el avance de la física del estado sólido y gracias a ella se produjo uno de los grandes inventos del siglo XX, el transistor. El transistor fue inventado por la compañía de teléfonos *Bell telephone*. Los físicos Bardeen, Brattain y Shockley estudiaron el transistor y dieron origen a los llamados circuitos integrados. Los transistores se encuentran presentes en la mayoría de los aparatos electrónicos que conocemos y en particular gobiernan la potencia del procesamiento de una computadora. Ese estudio les valió nada más y nada menos que el premio nobel en 1956 y permitió inmediatamente abrir paso a la miniaturización electrónica.

En los últimos cuarenta años el número de transistores por unidad de área que podían ser grabados en un chip de silicio se duplicaba cada 18 meses, esta tendencia es conocida como la Ley de Moore. El nombre de esta ley ha sido adoptado para cualquier cambio exponencial que se produzca en la industria y es una de muchas versiones formuladas por Gordon Moore de la Corporación Intel [1].

Sin embargo, desde el punto de vista tecnológico, se está llegando al límite de la cantidad de transistores que se pueden situar por unidad de área. Esto se debe a que no es posible disipar la potencia obtenida lo suficientemente rápido y a que estos dispositivos se están acercando al límite cuántico y por lo tanto ven afectado su funcionamiento. En la figura (1.1) se muestra el crecimiento del número de transistores en microprocesadores por

año. Se observa una clara tendencia exponencial incluso después del 2010. La cantidad de energía disipada por transistor sigue la predicción de Moore después de ese año. Esto se explica viendo que la cantidad de núcleos aumentó, es decir, el incremento en el número de núcleos es proporcional al número de transistores (por miles). La tendencia de la cantidad de transistores por unidad de área no puede seguir siendo exponencial en primer lugar porque la tecnología de fabricación de los chips comerciales más avanzados está ya en  $22[nm]$ , mientras se planea el paso a los  $14[nm]$ , por otro lado IBM, ha anunciado recientemente procesos viables de fabricación a  $7[nm]$ , pero hace tiempo se sabe que no se podrá sobrepasar la escala atómica.



**Figura 1.1:** La figura muestra los avances tecnológicos en microprocesadores hasta el año 2015. Está basada en los datos de M. Horowitz, F. Labonte, O. Shacham, K. Olukotun, L. Hammond y C. Batten. Later hasta el año 2010. Karl Rupp agregó los datos de los procesadores de AMD Opteron, Intel Xeon, Power+ y Power8, así como los de la Xeon Phi, y extendió el gráfico hasta el 2015 (ver <https://www.karlrupp.net/2015/06/40-years-of-microprocessor-trend-data/>).

A medida que se acercan al límite de escala atómica, los efectos cuánticos van cobrando cada vez más importancia y empiezan a interferir en el funcionamiento de los aparatos electrónicos. Otro camino para aumentar el rendimiento, es aumentar la velocidad del reloj, pero también se está alcanzado un límite físico en este aspecto. A mayor frecuencia, más calor y dado lo pequeño del chip, la capacidad de disipación se convierte en un problema muy serio.

Las alternativas vienen dadas justamente de la mano de la mecánica cuántica. Es posible dejar de controlar la corriente de carga, como se hace en los aparatos electrónicos convencionales, y pensar en controlar el flujo de espines electrónicos, agregando así un grado extra de libertad. Se espera que los aparatos *espintrónicos* operen más rápido y produzcan menos calor que los aparatos convencionales. Uno de los objetivos de estos

tiempos es construir un transistor basado en la propiedad espinorial de los electrones, lo cual produciría que la miniaturización continúe. Cuando se almacena información en corrientes clásicas o espintrónicas, se almacena en componentes macroscópicas, para poder aumentar la densidad de almacenamiento hay que recurrir a componentes microscópicas lo cual trae como consecuencia entrar en el mundo de la mecánica cuántica. Con la mecánica cuántica llega un nuevo paradigma para la computación clásica llamado computación cuántica. Las computadoras cuánticas aprovechan el principio de superposición. Un bit cuántico, o qubit, tiene más posibilidades de almacenar información porque, además de los dos estados clásicos 1 y 0, puede encontrarse en una superposición de ellos. Dicho de otro modo, puede estar parcialmente en uno y otro al mismo tiempo.

El confinamiento de electrones en tres dimensiones dentro de semiconductores dan origen a los *puntos cuánticos*. Estas estructuras pueden recrear muchos de los fenómenos observados en átomos y núcleos, haciendo posible la exploración de la física en regímenes en los cuales no hay posibilidad de acceder en los laboratorios, como se explicará en la sección 1.3. Además de esta ventaja los puntos cuánticos o *quantum dots* son posibles candidatos tecnológicos para el desarrollo de las computadoras cuánticas. A continuación desarrollaremos en más detalle estos temas.

## 1.2. Una visión histórica del desarrollo de la información cuántica

En 1982 Richard Feynman, quien recibió el Premio Nobel en 1965, escribió acerca de una computadora cuántica la cual podría simular sistemas físicos [2]. Feynman afirmaba que algunos fenómenos de la mecánica cuántica no pueden ser efectivamente simulados mediante las tradicionales computadoras clásicas y conjeturó que las operaciones computacionales realizadas siguiendo las leyes de la mecánica cuántica deberían ser exponencialmente más poderosas que las de una computadora clásica. Su idea fue que mediante el aprovechamiento del principio de superposición (una partícula puede estar en una combinación de dos o más estados al mismo tiempo) se puede pensar en un bit cuántico que no sólo tiene valores de 0 ó 1 sino que también toma una combinación de estos valores. Por ejemplo si hablamos del espín de un electrón sus estados pueden ser combinaciones lineales del espín arriba o abajo:  $\alpha|up\rangle + \beta|down\rangle$ , donde  $\alpha$  y  $\beta$  complejos tal que:  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Esta es la representación más general de un estado de este sistema y es un vector en un espacio complejo de dos dimensiones. A este bit cuántico se le dió el nombre de *qubit*. Dado que la dimensión del espacio de Hilbert asociado a qubits, que tienen combinación lineal de dos estados, es  $2^N$ , donde  $N$  es el número de qubits (por ejemplo  $N$  partículas de espín  $1/2$ ), se observa que el espacio de Hilbert crece exponencialmente con el número de partículas. Esta es la razón por la cual las operaciones cuánticas escalarían exponencialmente.

En 1985, el físico inglés David Deutsch propuso un modelo computacional en el cual reformula la Máquina de Turing (ver [3]) para aplicarla en el contexto cuántico [4]. Tres

años después, desarrolla la teoría de las compuertas cuánticas [5]. En 1993, Bernstein y Vazirani propusieron una Máquina de Turing cuántica universal que generalizaba la versión propuesta por Deutsch [6]. No fue hasta 1994 que la fiebre de la computación cuántica atraviesa la barrera de la comunidad científica, para pasar a ser de interés público. Esto se debe a que ese año Peter Shor, quien se encontraba en los laboratorios Bell, demostró un algoritmo cuántico que factoriza números primos y lo hace en forma polinomial, es decir, lo hace exponencialmente más rápido que las computadoras clásicas [7, 8]. Este algoritmo es tremendamente importante en criptografía ya que la seguridad de la claves criptográficas públicas puede ser vulnerada con este procedimiento.

En 1997, Gershenfeld y Chuang del MIT desarrollaron una computadora cuántica basada en Resonancia Magnética Nuclear (RMN) [9]. Esta fue la primer implementación experimental de una computadora cuántica, pero se limitaba a dos qubits. Un año después Loss y DiVincenzo propusieron un modelo teórico en el se proponía la implementación de compuertas universales de uno y dos qubits. La computadora usaba como qubits los estados de espín de puntos cuánticos acoplados de un electrón [10]. Esto produjo que estos sistemas se empezaran a estudiar como posibles implementaciones de qubits. Pero existen muchos problemas asociados a su implementación, por ejemplo los relacionados a sus tiempos de operación. Estudiar puntos cuánticos para ser implementados como qubits, su control y su performance de operación son las principales motivaciones de esta tesis.

El mismo año Omër implementó un lenguaje de programación para computadoras cuánticas llamado QCL, el cuál es un lenguaje de procesamiento, como el lenguaje C, que puede usarse para implementar y simular varios algoritmos cuánticos [11]. Con esto se empezó el camino del desarrollo de la computadora cuántica desde el punto de vista del software.

En 2001, IBM tuvo éxito en el desarrollo de una computadora cuántica de 7 qubits basada en RMN y logró implementar el algoritmo de Shor y factorizar el número 15 [12].

Además de los puntos cuánticos y los qubits basados en RMN hay muchos sistemas físicos candidatos a implementar algoritmos de información cuántica. Ejemplos de estos sistemas físicos son: trampas de iones, junturas Josephson, gases cuánticos ultrafríos, fotones, circuitos superconductores y estados oscuros [3, 13, 14].

La computación cuántica involucra la preparación, manipulación y lectura de estados cuánticos de sistemas de muchos qubits. Por eso es importante estudiar qubits que puedan ser controlados individualmente. Sin embargo la idea de una computadora cuántica implica tener la posibilidad de que sistema sea escaleable, es decir, tiene que ser posible agregar más qubits para crear un circuito grande, capaz de realizar cálculos complejos.

### 1.3. Puntos cuánticos

Los puntos cuánticos son estructuras confeccionadas de diferentes tamaños y materiales. Algunos ejemplos son los realizados en moléculas individuales atrapadas entre electrodos [15], en nanocables semiconductores [16] o en nanotubos de carbono [17]. También están los puntos cuánticos autoensamblados [18], los hechos con metales [19], con su-



perconductores [20, 21], con nanopartículas ferromagnéticas [22], con semiconductores laterales [23] o verticales [3], entre otros.

En ellos se puede confinar una cierta cantidad de electrones (un electrón o cientos de ellos) en una reducida región espacial. En algunos puntos cuánticos, se puede fijar el número específico de electrones atrapados, son estos los sistemas en los que estamos interesados. El nombre *puntos cuánticos* hace referencia al confinamiento espacial en las tres dimensiones. Para explicar como se fabrican estos aparatos cuánticos es fundamental considerar el material sobre el cuál se construyen, un caso concreto es el de los semiconductores. En dichos materiales todos los electrones están fuertemente ligados al núcleo, excepto por una pequeña parte, la cual está constituida por electrones en la banda de conducción. Una forma de fabricar un punto cuántico es restringir estos electrones en una estructura semiconductor (generalmente heterogénea) confinándolos lateralmente mediante compuertas electrostáticas o verticalmente mediante técnicas de grabado (por ejemplo nanolitografía) [25]. De esta manera se logra un potencial de confinamiento que atrapa a los electrones de conducción.

### 1.3.1. Átomos artificiales y el estudio de la física atómica

La física de los puntos cuánticos tiene muchos paralelismos con la que encontramos al estudiar física atómica, es por ello que muchas veces los puntos cuánticos son también llamados *átomos artificiales* [26]. Tanto los átomos naturales como los artificiales tienen espectros de energías discretos y muestran oscilaciones cuánticas coherentes entre sus niveles de energía, llamadas *oscilaciones de Rabi*. Pero mientras los átomos naturales son controlados usando fotones o micro-ondas en el rango visible que excitan a los electrones de un estado a otro, los átomos artificiales en los circuitos son controlados mediante corrientes, voltajes o *fotones de microondas* [3]. Los campos eléctricos y magnéticos resultantes controlan el efecto túnel de los electrones en el punto cuántico. Los efectos de estos campos en los puntos cuánticos son análogos a los efectos Stark y Zeeman en un átomo. Estos campos controlan el paso de los electrones al punto cuántico por lo tanto es posible representar átomos de los elementos de la tabla periódica mediante un simple cambio de voltaje o un cambio en su forma, así como el estudio de los isótopos. Además de trazar analogías con los átomos los puntos cuánticos permiten realizar experimentos que pueden llevarse a cabo en regímenes que no podrían realizarse con los átomos dado que sus escalas de energía son muy diferentes. Un ejemplo concreto de esto, es el efecto del campo magnético. El efecto de  $1T$  de intensidad de campo magnético en un punto cuántico que representa un átomo es comparable al efecto de un millón de tesla de intensidad de campo en un átomo real [27].

El diseño de los puntos cuánticos permite obtener estados cuánticos con características adecuadas a la situación en la que van a ser utilizados. Adecuando la frecuencia de transición a la energía de excitación disponible, o el momento dipolar del estado se puede lograr que el acoplamiento entre el campo aplicado y el electrón (o los electrones) sea (sean) varios órdenes de magnitud mayor que los accesibles en átomos o moléculas.

### 1.3.2. Su importancia en la información y computación cuánticas

Clásicamente la información es expresada en “bits”, los cuales son sistemas físicos que tienen dos estados denotados 0 y 1. Se quiere extender esta descripción al caso de la mecánica cuántica. El bit cuántico o qubit es la unidad de información cuántica. Se puede definir el qubit como un sistema cuántico de dos dimensiones, lo que significa que el espacio de estados del sistema es un espacio de Hilbert complejo de dos dimensiones  $\mathcal{H}$ . Es usual definir los estados base estándar como  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , la cual es usada para la preparación y lectura de la información cuántica. Por lo tanto si queremos manipular información cuántica, es necesario un alto nivel de control sobre los qubits.

Para realizar cómputos cuánticos en principio es necesario disponer de un conjunto de operaciones unitarias que determinen un conjunto universal de compuertas cuánticas, al menos en el modelo de computación que utiliza este tipo de operaciones. Hay otros modelos de computación cuántica que no dependen de este tipo de operaciones como, por ejemplo, la computación cuántica adiabática.

Un conjunto universal de compuertas cuánticas está formado por operaciones de uno y dos qubits. En notación matricial la base computacional puede escribirse como

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

y

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

las compuertas necesarias para las operaciones de un qubit son las matrices de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

y

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Mientras que para las operaciones de dos qubits es suficiente con la compuerta CNOT

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Algunos ejemplos de sistemas físicos que pueden identificarse con los estados base del qubit son los estados singlete ( $|0\rangle$ ) y triplete ( $|1\rangle$ ) entre dos electrones atrapados en el mismo

punto cuántico o un electrón en el estado fundamental ( $|0\rangle$ ) o primer excitado ( $|1\rangle$ ), en donde el resto del espectro se encuentra muy separado de los dos primeros niveles. Por esta razón es importante estudiar cuál es el mejor tipo de punto cuántico para tener un qubit definido. Una vez elegido se hace interactuar pares de ellos para ver cómo implementar mejor las compuertas de esos dos qubits. De acuerdo a DiVincenzo [31], cinco requisitos deben satisfacerse con el fin de obtener un sistema de control fiable:

1. ser escalable,
2. la capacidad para inicializar los qubits,
3. tiempos de coherencia relativamente largos (más largos que los tiempos de funcionamiento de las compuertas),
4. capacidad de lectura de un qubit específico y
5. un conjunto universal de compuertas cuánticas.

El mayor desafío al momento de implementar los sistemas cuánticos como sistemas para ser implementados en computación cuántica es la escalabilidad.

En nuestro trabajo se definirán los estados base en un sistema físico concreto, un punto cuántico híbrido, modelado en la aproximación de masa efectiva. Además se analizará que rango de parámetros es el adecuado para inicializar el sistema y qué tan fácil o difícil de controlar es el sistema cuando evoluciona (en el capítulo 4 se analizará este sistema).

## 1.4. Organización de esta tesis

Esta tesis se concentra en el estudio de sistemas basados en puntos cuánticos. La misma aborda temas tanto de física atómica como de computación cuántica. Se analizará qué tan robustos son los sistemas ante la variación de sus parámetros dimensionales. El estudio se realiza desde primeros principios, dentro de la aproximación de masa efectiva. Es importante destacar que los modelos que proponemos contienen información fenomenológica acertada, la cual es válida para las aproximaciones que realizamos y es posible contrastarla con varios modelos propuestos por otros autores.

En el capítulo 2 empezamos resumiendo las herramientas para resolver un problema que se encuentra en el marco de la física atómica. Explicamos qué son las resonancias en las cuales estamos interesados y cuáles son los métodos que vamos a utilizar para caracterizarlas.

En el capítulo 3 aplicamos las herramientas explicadas en el capítulo dos. En concreto, estudiamos el comportamiento de una resonancia de forma en un punto cuántico cilíndrico con un pozo y dos barreras de potencial en la dirección  $z$ . Luego, el sistema es sometido a la presencia de un campo magnético constante aplicado en la misma dirección.

El cambio en la intensidad del campo magnético permite llevar a la resonancia de forma a confinarse en el pozo de potencial antes mencionado. Se muestran nociones a cerca de

cómo detectar una resonancia. Se analizan los espectros variacionales de Rayleigh-Ritz en presencia de resonancias y escaleo complejo para poder determinar energías y tiempos de vida. Se propusieron métodos alternativos para encontrar la parte real de las energías de resonancia y para determinar el momento en el que se localiza. Varios de estos métodos fueron propuestos por nuestro grupo y se utilizaron para detectar resonancias en otros sistemas [30].

En el cuarto capítulo analizamos las propiedades espectrales de un qubit híbrido inspirado en la propuesta de Tarucha y Tokura [16], la cual generalizamos a un punto cuántico bidimensional. Resaltamos las propiedades de los qubits híbridos por sobre otras propuestas de qubits, por ejemplo los que

En el quinto capítulo se estudia el control dinámico de los sistemas del capítulo cuatro. Se estudian el control del qubit, la pérdida promedio y la performance de los sistemas para frecuencias de forzamiento que coinciden con la frecuencia de resonancia o que difieren un porcentaje pequeño de ella.

# Bibliografía

- [1] G. Moore, artículo en publicado en la revista Electronics, volumen **38**, número 8 (1965).
- [2] R. Feynman, Int. J. of Theor. Phys. **21**, 467 (1982).
- [3] M. Pavicic, *Quantum computation and quantum communication: theory and experiments*, University of Zágreb, Croacia, Springer (2005).
- [4] D. Deutsch, Proc. of the Royal Society A **400**, 97-117 (1985).
- [5] D. Deutsch, Proc. of the Royal Society A **425**, 73-90 (1989).
- [6] E. Bernstein y U. Vazirani, *Proc. of the 25th Annual Symposium on the Theory of Computing*, páginas: 11-20 (1993).
- [7] P. Shor, *Proc. of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, páginas: 124-134 (1994).
- [8] P. Shor, SIAM Journal of Computing **26**, 1484-1509 (1997), versión expandida de [7].
- [9] N. Gershenfeld, I. Chuang, Science **275**, 350 (1997).
- [10] D. Loss y D. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57** 120 (1998).
- [11] B. Omër: *Structured Quantum Programming*, Institute for Theoretical Physics, Vienna University of Technology. Ph.D. dissertation (2003).
- [12] L. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. Yanni, M. Sherwood, I. Chuang, Nature **414**, 883-887 (2001).
- [13] Nielsen, M. A. Chuang, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge Univ. Press, 2000).
- [14] A. Trabesinger, Nat. Phys. **8**, 263 (2012).
- [15] J. Park, A. Pasupathy, J. Goldsmith, C. Chang, Y. Yaish, J. Petta, M. Rinkoski, J. Sethna, H. Abruña y P. McEuen, Nat. London **417**, 722 (2002).

- [16] Y. Tokura, W. van der Wiel, T. Obata y S. Tarucha, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047202 (2006).
- [17] M. Björk, C. Thelander, A. Hansen, L. Jensen, M. Larsson, L. Wallenberg y L. Samuelson, *Nano Lett.* **4**, 1621 (2004).
- [18] D Klein, P. McEuen, J.Katari, R. Ross y A. Alivisatos, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2574 (1996).
- [19] J. Petta y D. Ralph, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 266801 (2001).
- [20] J. von Delft y D. Ralph, *Phys. Rep.* **345**, 61 (2001).
- [21] S. de Franceschi, L. Kouwenhoven, C. Schönenberger y W. Wernsdorfer, *Nat. Nanotec.* **5**, 703 (2010).
- [22] S. Guéron, M. Deshmukh, E. Myers y D. Ralph, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4148 (1999).
- [23] L. Kouwenhoven, C. Marcus, P. McEuen, S. Tarucha, R. Westervelt y N. Wingreen, en *Mesoscopic Electron Transport*, Vol. **345** of NATO Advanced Studies Institute, Series E: Applied Sciences, p. 16.
- [24] L. Kouwenhoven, D. Austing y S. Tarucha, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 701 (2001).
- [25] B. Joyce, P. Kelires, A. Naumovets y D. Vvedensky, en *Quantum Dots: Fundamentals, Applications, and Frontiers*, Vol. **190** de II. Mathematics, Physics and Chemistry, Springer, NATO Science Series, (2003).
- [26] R. Ashoori, *Nat.* **379**, 413 (1996).
- [27] L. Kouwenhoven y C. Marcus, *Phys. World* June, (1998).
- [28] D. Stepanenko y G. Burkard, *Phys. Rev. B* **75**, 085324 (2007).
- [29] M. Bylicki, W. Jaskólski, *Phys. Rev. B* **60**, 23 (1999).
- [30] F. Pont, O. Osenda, J. Toloza y P. Serra, *Phys.Rev. A* **81**, 042518 (2010), arXiv:1003.0468.
- [31] D.P. DiVincenzo, *Fortschr. Phys.* **48**, 771 (2000).

# Capítulo 2

## Marco teórico y métodos para caracterizar estados resonantes

Las resonancias son algunos de los fenómenos más sorprendentes de la naturaleza. Están asociadas con estados meta-estables de un sistema que tiene la energía suficiente para convertirse en dos o más subsistemas. Estos sistemas pueden ser núcleos, átomos, moléculas, sólidos, materiales y condensados nano-estructurados. Los sistemas cuya dinámica es controlada por los fenómenos de resonancia pueden ser tan pequeños como protonio (el átomo que consiste en un protón y un anti-protón) o un átomo de helio, o tan grande como una proteína. Estudiarlas significa querer entender, y en el mejor de los casos, *controlar* el comportamiento de sistemas cuánticos.

En este capítulo se describirá qué son los estados resonantes, en cuáles estamos interesados y de manera muy resumida, cuáles son los métodos para poder estudiar sistemas que tienen estados resonantes.

### 2.1. Marco teórico general de estados ligados, resonantes y no localizados

En física clásica se consideran estados ligados y no ligados y esa clasificación es independiente del tiempo del sistema. Un estado ligado en mecánica cuántica está intrínsecamente relacionado con la noción de tiempo, debido a que las partículas que componen el sistema deben permanecer localizadas siempre. También se encuentran los estados de partícula libre que son representados por funciones no localizadas. Estas pueden ser modeladas, al momento de atravesar un potencial, con un conjunto de ondas planas o un paquete de ondas.

Existen estados cuánticos que permanecen confinados un tiempo finito después del cual se deslocalizan. El tiempo de localización es básicamente el tiempo que tarda la partícula en atravesar la barrera de potencial que la mantenía confinada, y es comúnmente denominada *vida media*. Estos estados intermedios, que permanecen localizados por un tiempo finito, son las resonancias. La dependencia temporal los convierte en sistemas

complejos de analizar.

Es importante resaltar que existen sistemas cuánticos que no poseen estados ligados a pesar de presentar un potencial que clásicamente localice partículas. En problemas de unidimensionales para  $V < 0$  (donde  $V$  es el potencial) y un determinado ancho del pozo, siempre existe un estado ligado. En el siguiente capítulo vamos a tratar un punto cuántico con simetría cilíndrica en presencia de un campo magnético constante y analizaremos qué parámetros del sistema nos permiten asegurar que los estados se localizan o deslocalizan.

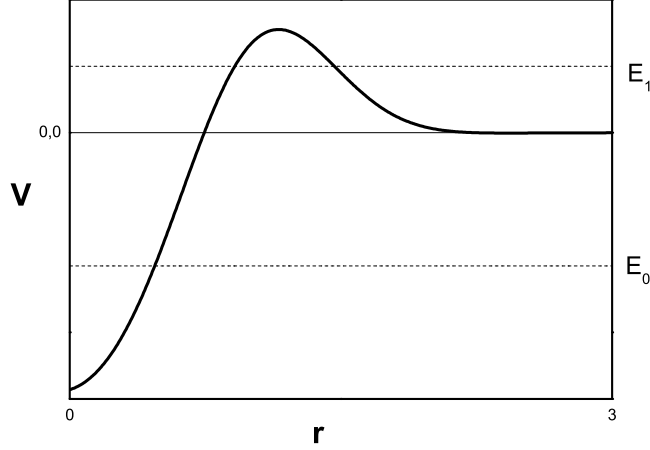
## 2.2. Resonancias

En sistemas cuánticos se conocen dos tipos de resonancias las de forma y las de Bohr-Feshbach. Las resonancias de forma, como su nombre lo indica, se presentan a causa de la forma del potencial el cual puede tener barreras que mantienen a la partícula temporalmente dentro de una región limitada del espacio. Las resonancias de Bohr-Feshbach se presentan en problemas de muchos cuerpos y se deben a la interacción entre las partículas. Un potencial que muestra resonancias de forma es el considerado por Gamow [1] y por Gurney y Condon [2] para explicar algunos aspectos de la emisión de partículas alfa por núcleo. Estos trabajos constituyeron la primera aplicación exitosa de la mecánica cuántica acerca del núcleo logrando explicar la regla experimental de Geiger-Nuttall. La ley de Geiger-Nuttall expresa que la vida media de un estado resonante es inversamente proporcional al cuadrado de su energía cinética, es decir, a medida que la energía de resonancia se acerca al umbral aumenta su vida media. El potencial que describe el decaimiento  $\alpha$  de un núcleo radiactivo se encuentra ilustrado en la Figura 2.1, donde  $r$  es la distancia entre la partícula  $\alpha$  y el núcleo, y en donde  $E_0$  y  $E_1$  representan las energías ligada y resonante, respectivamente. El decaimiento  $\alpha$  tiene origen puramente cuántico y desaparece cuando se lo lleva al límite clásico  $\hbar \rightarrow 0$ . Las resonancias de Feshbach por otra parte, pueden ser obtenidas a partir de cálculos clásicos, es decir, siguen manifestándose aunque  $\hbar = 0$ . El ejemplo básico de las resonancias de Feshbach es que dos partículas, o más, que colisionan con un cierto valor de energía pueden asociarse resonantemente para formar un estado ligado.

Los tiempos de vida media de los estados resonantes pueden variar de unos pocos segundos a millones de años (por ejemplo, el tiempo de decaimiento del isótopo de Thorium  $^{238}\text{U}$  es de  $4,5 \cdot 10^9$  años), y están directamente relacionados con el tipo de potencial que modela el problema. Por ejemplo el tiempo característico de decaimiento del núcleo está relacionado con el tiempo que demora la partícula  $\alpha$  en atravesar la barrera de potencial.

Desde un punto de vista más formal llamaremos resonancias a ciertos estados cuánticos de un sistema que, aunque no son estados ligados, se mantienen localizados en una región del espacio un tiempo finito después del cual el sistema puede describirse como dos o más sistemas por separado. Una forma de caracterizar a las resonancias es a partir de su relación con los polos de la matriz dispersión.





**Figura 2.1:** La figura muestra un potencial efectivo que modela el proceso de decaimiento  $\alpha$ . La energía de resonancia  $E_1$  se encuentra entre la energía del estado ligado  $E_0$  y el umbral de confinamiento.

Dado un potencial radial  $v(r)$  de corto alcance,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda v(r)$  el cual vamos a suponer por simplicidad que tiende asintóticamente a cero cuando su coordenada  $r$  tiende a infinito, hay estados no localizados descritos por [3]:

$$\phi(r \rightarrow \infty) = A(k)e^{-ikr} + B(k)e^{+ikr} \simeq e^{-ikr} + S(k)e^{+ikr}. \quad (2.1)$$

La matriz  $S$  se define como el cociente entre la amplitud de la onda plana saliente y la onda entrante. Esta matriz tiene polos en dos casos:

1. Cuando la amplitud de ondas salientes,  $B(k)$ , tiene polos. Los cuales son llamados *falsos* porque no están asociados con el fenómeno de resonancia. Los *falsos* polos son independientes del parámetro de intensidad del potencial,  $\lambda$ , y existe aún cuando  $\lambda$  tiende a cero [3, 4].
2. Cuando la amplitud de onda entrante,  $A(k)$ , se anula. Cuando estos polos están concentrados en el eje imaginario positivo de  $k$  ellos están asociados a estados ligados. Los polos que están embebidos en el cuarto cuadrante, es decir,  $Re(k) > 0$ ,  $Im(k) < 0$ , están asociados con fenómenos de resonancia.

También existen polos sobre la parte negativa del eje imaginario, los cuáles corresponden a estados anti-ligados o virtuales. Para ver un trabajo muy completo en una dimensión de la transición entre estados ligados a resonantes y aparición de estados virtuales se puede consultar la referencia [5] y para cálculos cuasi-analíticos las referencias [6, 7].

La componente imaginaria de energía del estado resonante le da al mismo su carácter dinámico, el estado debe deslocalizarse después de un tiempo. Entonces estos estados cumplen

$$H\phi^{res} = E_{res}\phi^{res}, \quad E_{res} = E_r - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (2.2)$$

donde  $\phi^{res}$  y  $E_{res}$  son la función de onda y la energía del estado resonante,  $E_r$  es la parte real de la energía  $E_{res}$  y  $\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$  es el ancho de la resonancia,  $\tau$  es el tiempo de vida media del estado resonante. Sin embargo, sabemos que los autovalores de un operador hermitiano, como el Hamiltoniano, son reales. La hermiticidad en el caso unidimensional se reduce a cumplir

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\hat{\mathcal{H}}g(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\hat{\mathcal{H}}^*g(x)dx \quad (2.3)$$

para todo par de funciones  $f(x)$  y  $g(x)$  en el dominio de aplicación. Ahora si se realiza una integración por partes uno puede ver que la ecuación anterior se satisface si:

$$g(x) \left| \frac{df(x)}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} - f(x) \left| \frac{dg(x)}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (2.4)$$

Las propiedades de un operador hermitiano dependen entonces de las condiciones de contorno de  $f(x)$  and  $g(x)$ , por ejemplo si  $f(x)$  y  $g(x)$  están en el espacio de Hilbert, entonces  $f(\pm\infty) = 0$ ,  $g(\pm\infty) = 0$ . En el caso más general la ecuación (2.4) se satisface si  $f(x)$  y  $g(x)$  están acotadas. Pero cuando estas funciones divergen exponencialmente como  $\phi^{res}$  entonces el operador  $\hat{\mathcal{H}}$  no es hermitiano y por lo tanto puede tener autovalores complejos. Este hecho es el responsable de que las resonancias sean complejas de analizar ya que la mayoría de los métodos para determinar el espectro y las auto-energías del Hamiltoniano se basan en la hermiticidad de este operador.

## 2.3. Tratamiento de estados resonantes

Excepto para los estados ligados, todos los otros polos de la matriz  $S$ , están asociados con funciones de onda que divergen exponencialmente, las cuales por definición no pertenecen al espacio de mecánica cuántica hermitiana convencional. Existen muchas formas de resolver un problema en donde hay resonancias, ya sea desde la mecánica cuántica hermitiana o desde un formalismo alternativo basado en mecánica cuántica no hermitiana. Pero dependiendo del problema a veces es más conveniente enfrentarlo con un formalismo o con el otro.

### 2.3.1. Cálculos mecánico-cuánticos de resonancias en el formalismo Hermitiano

En el ámbito de la mecánica cuántica hermitiana la probabilidad de encontrar una partícula descrita en algún lugar del espacio es uno. Como las funciones de onda que

describen a las resonancias no son normalizables hace que el tratamiento de estados con una vida media finita sea difícil. En este marco el fenómeno de resonancia no es un concepto bien definido. Sin embargo es posible realizar cálculos para encontrar las energías de la resonancia y sus tiempos de vida correspondientes.

Entre las formas de estudiar las resonancias podemos nombrar: resonancias como estados metaestables, como polos de la matriz  $S$ , obtenidas del espectro de la densidad de estados, de autofunciones asintóticas del continuo, del corrimiento de fase, de la longitud de dispersión, de cálculos de estabilización, de polos reales y complejos de la matriz de dispersión a partir del cálculo de propagación de un paquete de ondas, entre otros. Cada uno de estos métodos se encuentran detallados con ejemplos en la referencia [7]. La descripción se limitará al método que hace uso de cálculos de estabilización debido a que se utilizará como herramienta para obtener conclusiones sobre el sistema en el capítulo 3 y porque se utilizará el método variacional (ver Apéndice A) para caracterizar el sistema y la estabilización es un paso necesario para poder emplearlo.

### 2.3.1.1. Resonancias en el espectro variacional de Rayleigh-Ritz

Un método conveniente para encontrar las energías de los estados de resonancia es llevar a cabo un cálculo de estabilización. Este método se basa en la alta densidad de estados en el continuo alrededor de la energía de resonancia. El procedimiento es bastante simple, los niveles de energía variacionales de un hamiltoniano determinado se calculan en función de un parámetro  $\eta$  que se encuentra en las funciones de prueba. Cuando este parámetro se varía de forma continua los niveles de energía cambian, pero son estables en torno a las energías de resonancia. Existen muchos trabajos basados en la búsqueda de resonancias asociados a métodos aproximados en donde se restringe el dominio del sistema al espacio de Hilbert, destacamos [8] y [10]. En ellos se implementa el método variacional de Rayleigh-Ritz y se analiza si existen o no resonancias de forma. En términos de las energías variacionales,  $E_n(\eta)$ , obtenida como una función del parámetro  $\eta$ , el fenómeno de resonancia se manifiesta por *cruces evitados o avoided crossings* entre soluciones variacionales adyacentes  $E_n(\eta)$  y  $E_{n+1}(\eta)$ .

Las funciones de prueba cumplen un rol importante en este método. El espectro continuo puede ser discretizado usando una condición de borde determinada para el cálculo de los espectros de energía. Por ejemplo podemos confinar el problema dentro de una caja de longitud  $L$  y las funciones de prueba deben cumplir que se anulan en los bordes de tal manera que  $\psi_{res}(x = L) = 0$ . Variar  $L$  afectará al espectro de energía de nuestro hamiltoniano reduciendo las energías discretas a medida que  $L$  se incrementa. De manera más general el confinamiento puede realizarse usando funciones de cuadrado integrable, en donde la región de confinamiento está determinado por el valor de  $\eta$ . Si las soluciones estacionarias del continuo de la ecuación Schrödinger independiente del tiempo, que están asociadas con el fenómeno de resonancia, están más localizadas en el espacio de coordenadas. Entonces se verán menos afectadas por el cambio de  $\eta$  y por lo tanto el estado de resonancia será más estrecho (es decir, tendrá un menor valor de  $\Gamma$ ). Por otro lado, las funciones del continuo que no están asociadas a estados resonantes deben estar fuertemente

afectadas por el cambio en el parámetro  $\eta$  debido a su comportamiento oscilatorio.

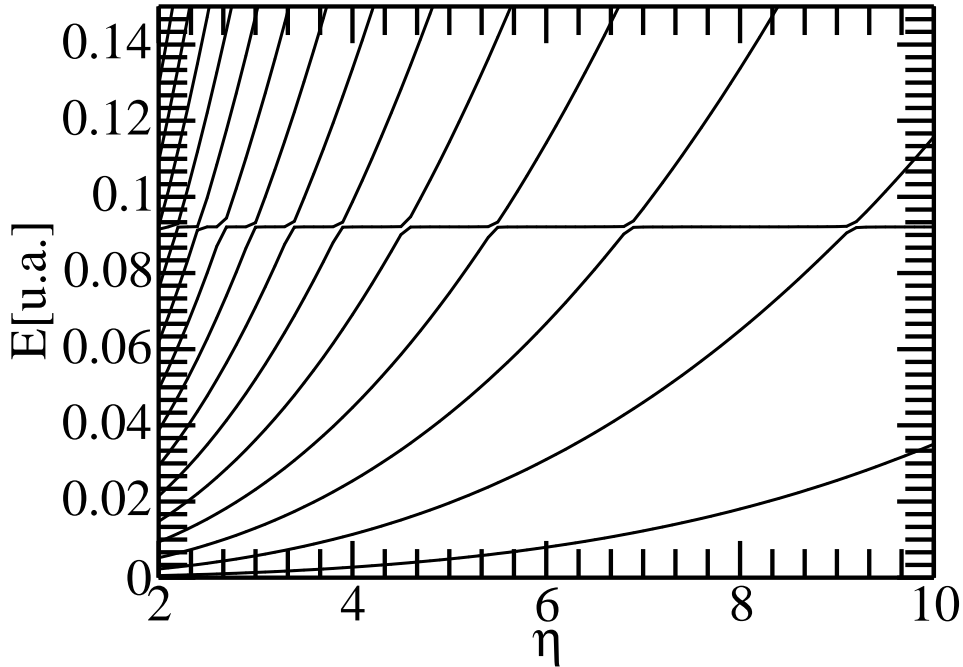
Para ejemplificar la idea de estabilización consideraremos un sistema que se utilizó en mi trabajo final [9]. Se tiene un problema que considera una sola partícula que tiene una resonancia. El potencial consiste en un pozo con profundidad  $a$  (por debajo del cero de energía) en el origen y una barrera de alto  $b$ .

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - ae^{-\alpha r} + be^{-\beta r}. \quad (2.5)$$

Se utilizó el método variacional de Rayleigh-Ritz para obtener el espectro. Se utilizaron 50 funciones de prueba de la forma

$$\phi_n(\eta r) = \frac{\eta e^{-\frac{\eta r}{2}} \mathcal{L}_n^{(1)}}{\sqrt{n+1}} \quad (2.6)$$

donde  $\eta$  es el parámetro variacional no lineal que utilizaremos para estabilizar,  $\mathcal{L}_n^{(t)}$  es el polinomio asociado de Laguerre de grado  $n$  y  $t$  es el parámetro que determina los coeficientes del polinomio, en este caso  $t = 1$ .



**Figura 2.2:** En esta figura se observa un gráfico típico de estabilización. Se utilizó el método de Rayleigh-Ritz para obtenerlo. Se muestra energía en unidades atómica vs. parámetro variacional no-lineal  $\eta$ . Los parámetros que se usaron fueron  $a = -8$ [u.a.] (profundidad del pozo) y  $b = 5$ [u.a.] (altura de la barrera), con 50 funciones de prueba. Se puede apreciar que para  $E \sim 0,99$ [u.a.] tenemos una resonancia.

La figura 2.2 muestra el espectro aproximado encontrado usando el método variacional en una región de energías correspondiente al continuo. En la figura se aprecia que hay un intervalo de energía donde los autovalores variacionales son estables, es decir prácticamente independientes de  $\eta$ . En dicho intervalo se encuentra la parte real de la energía de la resonancia  $E \sim 0,99[u.a.]$ . Observando el gráfico de estabilización podemos estimar qué tan estrecha es la resonancia (es decir qué tan largo es el tiempo de vida o que tan chico es el valor de  $\Gamma$ ). Si el valor de la energía de resonancia entre un cruce evitado y otro varía mucho quiere decir que el valor de  $\Gamma$  es muy grande, por lo tanto la resonancia es ancha y el tiempo de vida es chico. En la figura 2.2 la energía de resonancia varía muy poco, en este caso la resonancia es estrecha y se puede observar la presencia de la resonancia en el espectro. En otras palabras que si la resonancia es muy ancha es posible que no se la detecte por el método de estabilización.

Cederbaum y Maier [8] propusieron obtener la energía de resonancia a partir del espectro de estabilización que muestra los cruces evitados. La propuesta es que la parte real de la energía de la resonancia  $E_r$  es

$$E_r = \frac{E_{n+1} + E_n}{2}, \quad (2.7)$$

$$\Gamma = \frac{1}{2}\pi\rho(E_n)(\Delta E_n)^2, \quad (2.8)$$

donde  $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$  y  $\rho(E_n)$  es la densidad de estados con energía  $E_n$ .

La ecuación (2.8) se deduce fácilmente de la regla de oro de Fermi, donde los niveles interactuantes son  $E_n$  y  $E_{n+1}$ . Uno de ellos representa el estado del continuo mientras que el otro es un estado metaestable que se deslocaliza en un tiempo  $\tau = \frac{1}{\Gamma}$ . El valor de  $\Delta E$  es el mismo que el de la interacción entre dos niveles debido a un Hamiltoniano sin interacción. La densidad de estados  $\rho(E)$  corresponde al sistema sin resonancias, es decir, es aproximadamente la densidad del continuo. Se puede tomar la densidad como [11]:

$$\rho(E_n) = \frac{2}{E_{n+2} - E_{n-1}}. \quad (2.9)$$

De más está decir que el valor de la energía de la resonancia calculada con este método sólo debe ser considerada una estimación, ya que las aproximaciones son bastante burdas. Para poder obtener resultados más fiables es imprescindible utilizar otro método.

### 2.3.1.2. Encontrando la parte real de la energía de una resonancia usando los estados variacionales

En el siguiente capítulo se explicará cómo encontrar la parte real de la energía de la resonancia usando las autofunciones resultantes del método de Rayleigh-Ritz. Además se puede determinar a partir de qué valor el estado pasa de estar deslocalizado a estar localizado. Para ello se utilizará la probabilidad de localización y la fidelidad.

### 2.3.2. A partir de un formalismo de mecánica cuántica no hermitiana

El formalismo de la mecánica cuántica (Hermitiana) está basado en el requerimiento de que todas las propiedades observables de naturaleza dinámica están asociadas con autovalores reales de operadores hermitianos. En esta subsección nos limitaremos a explicar el formalismo de la mecánica cuántica no hermitiana, lo suficiente como para poder usarlo en nuestro problema en el capítulo siguiente.

Es importante destacar que no hay transformación (que haya sido publicada) que nos permita hacer un mapa entre los resultados que se obtienen usando el formalismo de la mecánica cuántica hermitiana convencional y los obtenidos a partir de la mecánica cuántica no-hermitiana. Sin embargo, el estudio de un sistema tiene que dar los mismos resultados físicos utilizando cualquiera de los dos. A pesar de ello, a veces, es muy difícil tratar un problema a partir de los formalismos mientras que con el otro se torna más simple. Hay muchos problemas en donde la mecánica cuántica no-hermitiana tiene ventajas sobre la estándar [7] (pág. 1-2).

Llamemos  $T$  a la transformación que se realiza a la función de onda de una resonancia para relajar su divergencia exponencial. Entonces, a partir de la ecuación de Schrödinger se tiene

$$H_T \psi_T = E \psi_T, \quad (2.10)$$

donde  $H_T = THT^{-1}$  y  $\psi_T = T\psi$ , tal que la asíntota de  $\psi_T$  vaya a cero cuando  $r \rightarrow \infty$ .

Entre transformaciones de este tipo podemos mencionar la de Zel'dovich, de escaleo complejo, de escaleo exterior y escaleo exterior *smooth*. Cada una de ellas se encuentra explicada en [7] y se aplican en situaciones diferentes, pero cada una de ellas lleva a las funciones de onda a ser de cuadrado integrable. En las dos siguientes sub-secciones vamos a explicar la transformación de escaleo complejo y la de escaleo exterior.

#### 2.3.2.1. Transformación de escaleo complejo

La forma de modificar la ecuación de Schrödinger es a partir de una transformación de *similaridad*:

$$(\hat{T} \hat{H} \hat{T}^{-1})(\hat{T} \phi^{res}) = \left( E_r - i \frac{\Gamma}{2} \right) (\hat{T} \phi^{res}) \quad (2.11)$$

y lo que esencialmente busca es:

$$\hat{T} \phi^{res} \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad r \rightarrow \infty. \quad (2.12)$$

Con lo cual  $\hat{T} \phi^{res}$  pertenece al espacio de Hilbert mientras que  $\phi^{res}$  no. Las transformaciones de similaridad no son únicas y dependen de las particularidades del problema. Es posible que se deba implementar una transformación diferente para cada potencial de forma que cumpla con la ecuación (2.12), ver referencias [12] and [13].

El operador de similaridad más usado es el siguiente:

$$\hat{T} = e^{\gamma r \frac{\partial}{\partial r}}, \quad (2.13)$$

cuyo efecto sobre una función analítica  $f(r)$  es:

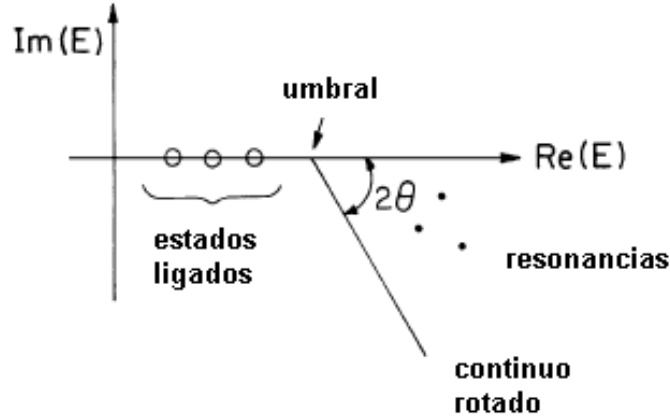
$$\hat{T}f(r) = f(re^\gamma). \quad (2.14)$$

luego de aplicar esta transformación se extiende el parámetro  $\gamma$  al plano complejo, es decir,  $\gamma \rightarrow i\theta$ , en donde  $\theta > 0$  y  $\theta \in \Re$ .

En resumen, el escaleo complejo o rotación compleja nos provee de un nuevo problema de autovalores, el cual puede escribirse como

$$H(\theta)\psi(\theta) = E_\theta\psi(\theta). \quad (2.15)$$

Los autovalores correspondientes a estados ligados del Hamiltoniano sin rotar también son autovalores de  $H(\theta)$ , independientemente del valor de  $\theta$ . Las resonancias corresponden a autovalores complejos de  $H(\theta)$  que son independientes de  $\theta$  y con  $Re(E) > 0$ . Por otro lado, el espectro continuo del problema sin rotar pasa a formar un “continuo rotado”, es decir que si se grafica la parte imaginaria de los autovalores *vs* la parte real, el continuo rotado forma un ángulo de  $2\theta$  con el eje real, ver Figura (2.3). Cabe destacar que la



**Figura 2.3:** En esta figura se muestran los posibles autovalores del Hamiltoniano  $H(\theta)$ . Los estados ligados son autovalores aislados del Hamiltoniano al igual que las resonancias. Las resonancias tienen la  $Im(E) < 0$ . El umbral es el valor a partir del cual comienza el espectro continuo. Los estados continuo son rotados un ángulo  $2\theta$  con respecto al eje real. La posición de las resonancias, al igual que la posición de los estados ligados son independiente de  $\theta$ . Gráfico extraído de la referencia [7].

transformación (2.11) no es unitaria y modifica el Hamiltoniano, sin embargo estas modificaciones favorecen el objetivo del escaleo complejo. Para poder explicar qué es lo que realiza la transformación de *similaridad* consideremos la forma asintótica de la función de una resonancia [12] :

$$\begin{aligned} \phi^{res}(r \rightarrow \infty) &= B(k_n)e^{i|k_n|exp(-i\varphi_n)r} \\ &= B(k_n)e^{ia_nr}e^{+b_nr} \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde:

$$a_n = \frac{(2\mu)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \left( E_r^2 + \frac{\Gamma_n^2}{2} \right)^{\frac{1}{4}} \cos(\varphi_n), \quad (2.17)$$

$$b_n = a_n \tan(E_r), \quad (2.18)$$

$$\varphi_n = \arctan \left( \frac{\Gamma_n}{2E_r} \right) \quad (2.19)$$

Si le aplicamos la transformación de similaridad obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{T}}\phi^{res}(r \rightarrow \infty) &= B(k_n)e^{i|k_n|\exp(i(\theta-\varphi_n))r} \\ &= B(k_n)e^{i\alpha_n r} e^{-\beta_n r}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

en donde

$$\alpha_n = a_n(\cos \theta - \tan \varphi_n \sin \theta), \quad (2.21)$$

$$\beta_n = a_n(\sin \theta - \tan \varphi_n \cos \theta). \quad (2.22)$$

Se puede ver inmediatamente de la ecuación (2.20) que si se elige un  $\theta \geq \theta_c$  el factor exponencial de  $\beta_n$  se vuelve positivo y la función de resonancia escaleada se convierte en una función de cuadrado integrable. En particular en este ejemplo el valor de  $\theta_c$  está dado por [15],

$$\theta_c = \varphi_n \quad (2.23)$$

y el valor de  $\beta_n$  es cero. Entonces el escaleo complejo tiene la ventaja de asociar el fenómeno de resonancia con una parte del espectro discreto del Hamiltoniano escaleado. Desde el punto de vista de Moiseyev en [12], el escaleo complejo debe ser visto como un fenómeno de “compresión” de la información de la evolución de un estado resonante de infinito a una pequeña parte del espacio bien definida.

Los estados resonantes y los ligados están asociados a la parte discreta del Hamiltoniano escaleado y no se ven modificados por la elección del ángulo  $\theta$  (sin embargo existe un límite para este ángulo, el cual será discutido más adelante). El continuo, por el contrario, depende del valor del ángulo rotacional  $\theta$ . De acuerdo con el teorema de Balslev-Combes los estados correspondientes al continuo son rotados un ángulo  $2\theta$  con respecto al eje positivo de los reales, como se observa en la figura (2.3).

Es fácil comprobar este teorema para potenciales de corto alcance

$$\phi^{res}(r \rightarrow \infty) = A(k)e^{-ikr} + B(k)e^{+ikr}, \quad E = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (2.24)$$

Al escalear el Hamiltoniano la ecuación (2.24) se convierte en:

$$\hat{\mathcal{T}}\phi^{res}(r \rightarrow \infty) = A(k)e^{-ike^{i\theta}r} + B(k)e^{+ike^{i\theta}r}. \quad (2.25)$$

De la ecuación (2.25) se puede ver para los valores reales de  $k$ , es decir, para los valores reales de la energía,  $\phi^{(res)}$  diverge cuando  $r \rightarrow \infty$  y  $\theta < \pi$ , ya que la parte real del exponente se vuelve positiva:

$$\Re(-ike^{i\theta}) = k \sin(\theta) > 0. \quad (2.26)$$



Las ecuaciones no divergen si  $k$  toma valores complejos:

$$k = |k|e^{-i\zeta}, \quad (2.27)$$

reemplazando en la ecuación (2.24) resulta:

$$E(\theta) = |E|e^{-2i\theta}, \quad (2.28)$$

de esta ecuación se puede justificar la rotación en  $2\theta$  del continuo con respecto al eje real.

Hasta ahora se explicó cómo es la teoría analítica del método de rotación compleja. A continuación se verá como se lo modifica para aplicarlos a problemas cuya solución es desconocida.

### 2.3.2.2. Rotación compleja en el espectro de Rayleigh-Ritz

La forma más usual de emplear la rotación compleja es modificando el método de Rayleigh-Ritz para aplicarlo al Hamiltoniano escaleado. Estas modificaciones consisten esencialmente en permitir el trabajo con álgebra compleja. Una vez resuelto el problema el análisis que se va a realizar será equivalente al que se hacía en el caso analítico. Se puede obtener un gráfico con el continuo rotado un ángulo que es aproximadamente  $2\theta$  en donde los estados ligados y resonantes no se modifican para diferentes valores del ángulo, con lo cual tenemos una excelente forma de detección de resonancias.

Con respecto a los valores que puede tomar  $\theta$  recordemos que, teóricamente, no puede ser mayor que  $\pi$ . Sin embargo los problemas numéricos empiezan para valores del ángulo mucho menores. Por otra parte el teorema de Balsev-Combes [15] asegura que los estados ligados conservan su energía real luego de aplicar la transformación de similaridad, siempre y cuando el ángulo  $\theta$  sea menor que un  $\theta_{max}$  que depende del potencial. La dependencia de la energía de resonancia aproximada con el valor de  $\theta$  es también notable, es por ello que es importante analizar las trayectorias de los valores aproximados de las partes reales e imaginarias de la energía de la resonancia en función del parámetro  $\theta$ , cuyo tratamiento se resume a continuación.

### 2.3.2.3. Trayectorias en función de $\theta$

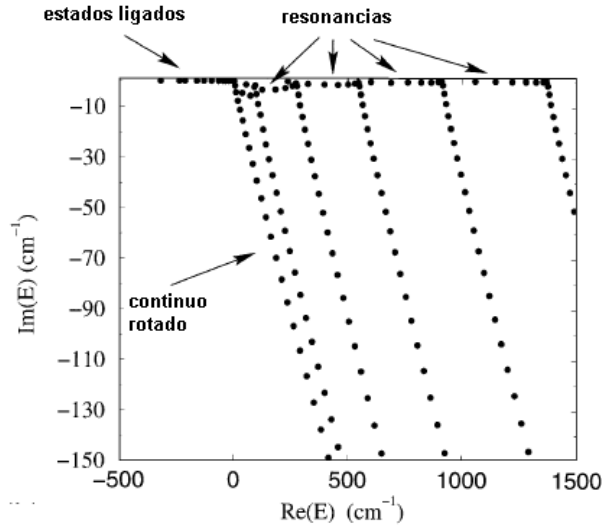
Moiseyev y colaboradores [16] propusieron que la solución estacionaria en donde  $\frac{dE}{d\theta} = 0$  para algún  $\theta = \theta_{opt}$  es el valor óptimo para la energía de la resonancia y está asociada a una derivada nula en el gráfico de trayectorias de  $\theta$ . En esta sección explicaremos sucintamente en que se basa la prueba.

En la vecindad de un punto estacionario de energía compleja,  $E$ , se puede expandir en potencias de  $(\eta - \eta_{opt})$  [17] (expansión de Puiseux), donde  $\eta = e^{i\theta}$ . Para los primeros dos términos tenemos

$$E = E_0 + a(\eta - \eta_{opt})^\mu + \dots \quad (2.29)$$

$$\eta = e^{i\theta} = \alpha e^{i\theta_R}, \quad (2.30)$$

$$\eta_{opt} = e^{i\theta_{opt}} = \alpha_{opt} e^{i\theta_R^{(0)}}, \quad (2.31)$$



**Figura 2.4:** Espectro aproximado que se obtiene utilizando el método de Rayleigh-Ritz. Los autovalores correspondientes a los estados ligados y a las resonancias se encuentran “aislados” del continuo rotado. El continuo se separa en varios conjuntos de puntos que forman un ángulo  $2\theta$  con el eje real. Los distintos conjuntos obedecen a que el sistema puede presentar varios umbrales. Las resonancias se identifican con los autovalores cuya posición cambia suavemente con el ángulo de rotación, mientras que el continuo siempre forma un ángulo  $2\theta$  con el eje real. Figura extraída de la referencia [7]

en donde:

$$\theta = \theta_R + i\theta_I, \quad \theta_{opt} = \theta_R^{(0)} + i\theta_I^{(0)}, \quad (2.32)$$

$$\alpha = e^{-\theta_I}, \quad \alpha_{opt} = e^{-\theta_I^{(0)}}, \quad (2.33)$$

y donde  $\mu$  es un número positivo racional. Para un  $\eta$  lo suficientemente cerca de  $\eta_{opt}$  a lo largo de la trayectoria de  $\theta$ , podemos suponer que:

$$\eta = \alpha_{opt} e^{i\theta_R}, \quad (2.34)$$

y por lo tanto podemos escribir:

$$\eta - \eta_{opt} = i\eta_{opt}x, \quad (2.35)$$

con  $x = \theta_R - \theta_R^{(0)}$ . Consideremos el caso en que  $x \geq 0$  (es decir, nos acercamos al punto de derivada nula por arriba), de esta manera tenemos:

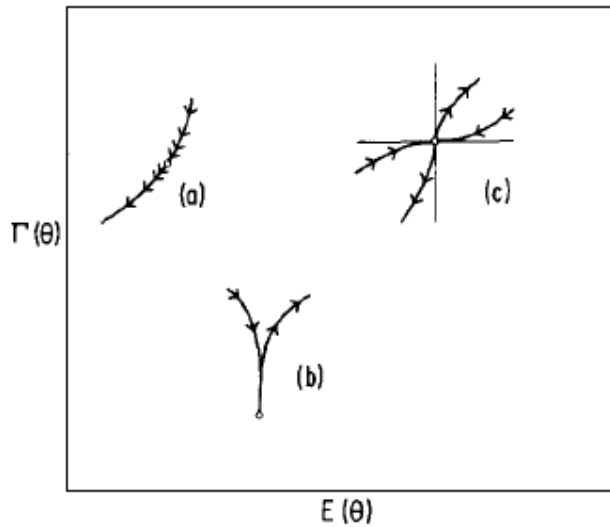
$$E_+ = E_0 + a(i\eta_{opt})^\mu |x|^\mu + \dots, \quad (2.36)$$

mientras que para  $x \leq 0$  (aproximando por debajo del punto con derivada nula):

$$x = - |x| = |x| e^{i\pi} \quad (2.37)$$

entonces:

$$E_- = E_0 + a(i\eta_{opt})^\mu |x|^\mu e^{i\pi\mu} + \dots \quad (2.38)$$



**Figura 2.5:** Ancho de la resonancia,  $\Gamma(\theta)$ , en función de la parte real de la energía del estado resonante,  $E(\theta)$ , donde  $\theta$  es el ángulo de rotación de la transformación. Se muestran posibles trayectorias de un autovalor aproximado asociado a una resonancia cuando se varía el ángulo  $\theta$ . El valor más preciso se considera aquel que “estabiliza” la trayectoria. a) Es una trayectoria en la que las energías de las resonancias empiezan a acercarse cada vez más a la anterior a medida que aumenta  $\theta$ , hasta que empiezan a alejarse, el punto en el que se realiza ese cambio es el que se corresponde con el  $\theta_{opt}$ . En b) el  $\theta_{opt}$  se obtiene para el ángulo en donde la pendiente es nula. c) Muestra que hay dos trayectorias y se cruzan,  $\theta_{opt}$  es el ángulo asociado al punto de cruce. Figura extraída de la referencia [7].

Se puede ver que existe un punto con derivada nula entre dos ramas  $E_+$  y  $E_-$  en un punto estacionario:  $\theta = \theta_{opt}$  con un pico de ángulo  $\pi\mu$ . Dependiendo del valor de  $\mu$  se puede encontrar diferentes casos. Una curva suave (ángulo  $\pi$ ) se observará como un punto estacionario cuando  $\mu$  es un entero impar. Un ejemplo de este tipo se puede ver en la figura 2.5 trayectoria a, donde se observa que la trayectoria  $\theta_R$  se ralentiza cerca del punto estacionario aunque no hay punto con derivada nula. Hay que recordar, sin embargo, que las trayectorias de  $\theta$  para  $\eta$  no óptimo también son suaves. Un pico con ángulo nulo será observado como un punto estacionario cuando  $\mu$  sea un entero par. Este caso está representado esquemáticamente en la figura 2.5 b y es el caso más común [12]. Por

último, ocurre un caso interesante cuando  $\mu = \frac{n}{m} > 1$ , donde  $n$  y  $m$  son coprimos, entonces hay un pico que no tiene ángulo nulo ni  $\pi$ . Una fracción de  $\pi$  es la intersección de por lo menos  $m$  autovalores de la matriz compleja del Hamiltoniano en el punto estacionario  $\theta = \theta_{opt}$ , ver trayectoria  $c$  de la figura 2.5.

Un método eficiente para modificar la divergencia de las funciones de onda de las resonancias y convertirlas en funciones de cuadrado integrable es a partir de la rotación de coordenadas, así la divergencia ocurre en el plano complejo. Esta transformación le agrega una fase compleja a la coordenada en donde se produce la divergencia, por ejemplo  $x \rightarrow xe^{i\theta}$  así que si se realiza en la tres coordenadas  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}e^{i\theta}$ . De una manera más general se puede elegir en qué lugar del espacio se realizará el escaleo, de acuerdo a una consideración numérica o física, es decir  $\vec{r} \rightarrow (\vec{r} - \vec{r}_0)e^{i\theta} + \vec{r}_0$ .

### 2.3.2.4. Rotación exterior compleja

La aplicación de la técnica de escaleo complejo encuentra serias dificultades numéricas cuando el potencial del Hamiltoniano no admite dilatación analítica, es decir que al aplicar el escaleo aparecen polos o regiones de no-analiticidad que impidan tratar el problema. Los ejemplos más simples de este tipo de potenciales son los pozos rectangulares a trozos y corresponden potencial que analizaremos en el capítulo siguiente. La rotación exterior compleja consiste en redefinir la transformación de *similaridad* en la región ( y en la coordenada) donde el potencial no es de *dilatación analítica*. Vamos a ejemplificar este técnica en el caso unidimensional, pero eventualmente se puede extender a más dimensiones.

Sea  $V(x)$  el potencial que no es de *dilatación analítico* en la región  $x \leq x_0$ . Entonces la transformación que tenemos que realizar es la siguiente  $x' = F(x)$ , tal que

$$x' = F(x) = \begin{cases} x & \text{si } x \leq x_0, \\ (x - x_0)e^{i\theta} + x_0 & \text{si } x \geq x_0 \end{cases}, \quad (2.39)$$

con

$$f(x) = \frac{dx}{dx'} = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq x_0, \\ e^{-i\theta} & \text{si } x \geq x_0 \end{cases} \quad (2.40)$$

Ejemplificando, si el Hamiltoniano que tenemos es:

$$H_\theta = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} + V(x'), \quad (2.41)$$

transformamos las coordenadas

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx'} &= \frac{dx}{dx'} \frac{d}{dx} = f(x) \frac{d}{dx}, \text{ entonces} \\ \frac{d^2}{dx'^2} &= \frac{d}{dx'} \left( \frac{d}{dx'} \right) = f(x) \frac{d}{dx} \left( f(x) \frac{d}{dx} \right) \\ &= f(x) \frac{d[f(x)]}{dx} \frac{d}{dx} + [f(x)]^2 \frac{d^2}{dx^2}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

De esta manera

$$\frac{d^2}{dx'^2} = [f(x)]^2 \frac{d^2}{dx^2} + f(x) (e^{-i\theta} - 1) \delta(x - x_0) \frac{d}{dx}, \quad (2.43)$$

donde

$$\frac{d[f(x)]}{dx} = (e^{-i\theta} - 1) \delta(x - x_0). \quad (2.44)$$

Finalmente el Hamiltoniano transformado es

$$H_\theta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ f(x)^2 \frac{d^2}{dx^2} + f(x) (e^{-i\theta} - 1) \delta(x - x_0) \frac{d}{dx} \right] + V(F(x)). \quad (2.45)$$

Notemos que al realizar esta transformación se agrega un término extra al Hamiltoniano, una derivada primera.



# Bibliografía

- [1] G. Gamow, Z. Physik. **51**, 204 (1928).
- [2] R. Gurney y E. Condon, Phys. Rev., **76** 749,(1929).
- [3] J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. Dover Publications, 2006.
- [4] H. J. Korsch, R. Möhlenkamp y H. D. Mayer, J. Phys. **B 17**, 2955 (1984).
- [5] H. M. Nussenzveig, Nucl, Phys. **11**, 499 (1959).
- [6] R. Zavín y N. Moiseyev, J. Phys. **37**, 4619 (2004).
- [7] N. Moiseyev *Non-Hermitian Quantum Mechanics*, Cambridge University (2011).
- [8] C. H. Maier, L. S. Cederbaum and W. Domcke, J. Phys. Rep. B, **13**, 119 (1980).
- [9] A. Y. Ramos, O. Osenda, *Estados ligados y resonancias en Quantum Dots de una partícula con campo magnético externo*. Tesis. Famaf-UNC-Argentina.
- [10] S. Kar and Y. K. Ho, J. Phys. B **37**, 3177 (2004).
- [11] F. M. Pont. Sistemas de muchos cuerpos en un entorno del umbral del continuo. Tesis. Famaf-UNC-Argentina.
- [12] N Moiseyev, Phys. Rep.,**302**, 212 (1998).
- [13] N. Moiseyev and J. O. Hirschfelder, J. Chem. Phys. **88**, 1063 (1988).
- [14] Y. Sajejev and N. Moiseyev, Phys. Rev. B **78**, 075316 (2008).
- [15] E. Balslev, J. M. Combes, Comm. Math. Phys. **22**, 280 (1971).
- [16] N. Moiseyev, S. Friedland , P. Certain. Cups,  $\theta$  trayectories, and complex virial theorem, J. Chem. Phys. **74**, 4739 (1981).
- [17] N. Moiseyev and S. Friedland, Phys. Rev. A **22**, 618 (1980).





# Capítulo 3

## Estados resonantes en puntos cuánticos con campo magnético constante

### 3.1. Introducción

La disponibilidad de dispositivos cuánticos con una longitud característica de sólo unos pocos nanómetros permite la implementación de una serie de montajes experimentales que ponen a prueba los fundamentos de la mecánica cuántica.

La implementación de los puntos cuánticos generó un escenario ideal para estudiar las transiciones entre estados confinados eléctricamente y niveles magnéticos de tipo Landau [1] ya que en sistemas atómicos y moleculares los valores de campo empleados deben ser varios órdenes de magnitud mayores. Se realizaron numerosos trabajos teóricos y experimentales para explicar el efecto del potencial de confinamiento sobre el espectro observado [2, 3].

En este capítulo se estudiará la influencia de un campo magnético externo constante y uniforme sobre el espectro de un punto cuántico de una partícula. Debido a la presencia del campo el problema tiene simetría axial, alrededor de la dirección en la cual se encuentra el campo magnético (siempre y cuando el potencial de confinamiento lo permita). Sin pérdida de generalidad usaremos a lo largo del trabajo que el campo puede escribirse como  $\vec{B} = B\hat{k}$ , donde  $\hat{k}$  es el versor en la dirección  $z$ . El problema de una partícula libre en un campo magnético uniforme y constante ha sido estudiado ampliamente y da lugar a los niveles de Landau. Estos niveles han sido utilizados para estudiar el problema del confinamiento de partículas en potenciales armónicos bi-dimensionales [4, 5].

Para obtener el espectro del problema se utilizará el método de Rayleigh-Ritz. Este método emplea una base completa de autofunciones para expandir el espacio de Hilbert involucrado en nuestro problema. La base puede o no ser ortogonal, dependiendo de la conveniencia del caso. Para llevar el problema al plano numérico se trunca la base de expansión a un tamaño finito  $N$  y se obtienen los elementos de matriz del Hamiltoniano.

A partir de los autovalores y autovectores de la matriz se obtienen las aproximaciones para la energía y la función de onda de Hamiltoniano.

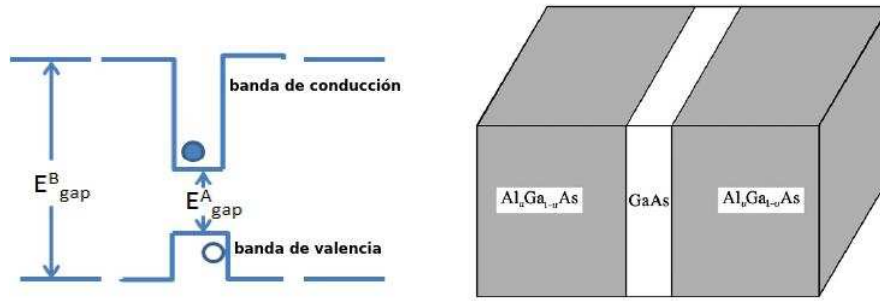
Cuando se trata de campos magnéticos aplicados, la mayoría de los estudios teóricos sobre los puntos cuánticos se centran en los estados fuertemente localizados, logrados muchas veces usando potenciales que siempre confinan, como el potencial armónico tridimensional o paredes impenetrables [2, 6]. La presencia de un campo magnético constante, de todos modos, es equivalente a un potencial armónico de dos dimensiones en el plano ortogonal a la dirección del campo. Hay menos ejemplos de estudios en los cuales los potenciales son finitos, en particular aquellos cuyas formas o características del potencial permiten la presencia de estados de resonancia [10, ?]. En este sentido hay muchas razones para estudiar los potenciales finitos, desde situaciones de transporte de carga hasta el efecto de los estados de resonancia en los puntos cuánticos luminiscentes. Bylicki y Jaskólski [10] analizaron el confinamiento de resonancias de forma a través de la aplicación de un campo magnético externo. Ellos consideraron un punto cuántico esférico de un electrón y con estructura de pozos de potencial. En este capítulo, consideramos un problema estrechamente relacionado con el propósito de alcanzar una mejor comprensión de la transición de un estado de resonancia a uno confinado.

Como se ha mencionado anteriormente, un campo magnético constante induce un potencial armónico de dos dimensiones que se opone a la aparición de resonancias en el plano ortogonal al campo, es decir, la pérdida de partículas puede tener lugar *sólo* en la dirección del campo, cerrando el número de canales de decaimiento que estarían disponibles en ausencia del campo. Se considera un modelo de punto cuántico con simetría cilíndrica cuyo eje tiene la misma dirección que el campo magnético en la aproximación de masa efectiva. En esta aproximación las interacciones de muchos cuerpos del electrón se reducen a un (simple) potencial de confinamiento, y todos los parámetros del Hamiltoniano, masas, constantes dieléctricas y así sucesivamente se toman como iguales a los parámetros del *bulk*.

El confinamiento de electrones en estructuras semiconductoras puede producirse, básicamente, mediante dos mecanismos. El primero consiste en la aplicación de potenciales eléctricos mediante electrodos metálicos adheridos a la superficie de un semiconductor. El segundo explota el hecho de que diferentes materiales tienen estructuras de bandas distintas, en este caso un electrón que se encuentra en un nivel de energía permitido en un material no puede acceder a la región ocupada por otro material si dicho nivel de energía no está permitido en el mismo.

Dediquemos un momento a pensar cómo se generan los pozos cuánticos del segundo tipo experimentalmente. Mediante crecimiento epitaxial se fabrica una secuencia de capas ultrafinas de materiales semiconductores de composición variable. Dos semiconductores diferentes con distintos gaps entre las bandas de valencia y de conducción, ver figura 3.1, se pueden unir para formar una estructura de interés. La discontinuidad, ya sea en la banda de conducción o en la de valencia, se puede utilizar para formar un pozo de potencial. Por ejemplo, si una capa delgada de un material de gap pequeño  $A$  se intercala entre dos capas de un material con un gap mayor  $B$ , forman un doble unión heterogénea. La profundidad del pozo del potencial que experimenta un electrón que se encuentra en la

banda de conducción del material  $A$  es igual a la diferencia de energía entre los fondos de las bandas de conducción de  $A$  y  $B$ . Capas semiconductoras adicionales pueden ser incluidas en la heteroestructura, por ejemplo un pozo asimétrico puede estar formado por la inclusión de una aleación entre los materiales  $A$  y  $B$ .



**Figura 3.1:** En el panel de la izquierda se muestra un esquema en donde se encuentran las bandas de conducción y de valencia. En un punto cuántico semiconductor una diferencia de potencial saca un electrón de la banda de valencia y lo lleva a la banda de conducción, en ese caso hablamos de un punto cuántico de un electrón. En el panel de la derecha el pozo de potencial puede formarse a partir de dos materiales semiconductores de diferentes valores de gaps entre la banda de valencia y la de conducción.

Los diferentes materiales y la geometría con la que se hace crecer las capas permite fabricar estructuras muy diversas conocidas como por ejemplo los puntos cuánticos. En particular, se han fabricado estructuras con varios pozos y barreras de potencial.

A pesar de la aparente simplicidad del modelo, el cálculo de los estados de resonancia de un electrón atrapado en un pozo de potencial y con un campo magnético externo aplicado, está lejos de ser trivial. En particular para intensidades de campo pequeñas los niveles de Landau están muy próximos entre sí, esto dificulta el análisis numérico del problema. Los métodos numéricos usados para detectar resonancias son particularmente sensibles a la presencia de distintos thresholds de continuo. Como veremos más adelante, cada nivel de Landau juega ese rol. Para obtener la energía y el ancho de los estados de resonancia empleamos el método de escaleo complejo (complex scaling) [4] y otros basados en la aproximación variacional de cuadrado integrable para la función de onda. Se analizarán los estados confinados y de resonancia de puntos cuánticos de dos electrones [10]. Por otra parte, usaremos la fidelidad de los autoestados variacionales para encontrar detectar los estados de la resonancia, este método fué utilizado por Federico Pont y colaboradores en [14] En este trabajo utilizamos la fidelidad para estudiar el confinamiento de una resonancia y mostrar que puede ser detectado por un cambio brusco en el comportamiento de la fidelidad. Esta característica es consistente con el comportamiento observado en la fidelidad cuando el sistema experimenta una transición de fase cuántica (en modelos de muchos cuerpos), o en sistemas que se encuentran cerca del umbral de ionización o de una resonancia. Recientemente, la aplicación de los conceptos de la teoría de la

información cuántica, como la fidelidad o el entrelazamiento, ha sido muy fructífera para analizar estados ligados y de resonancia en algunos sistemas de pocos cuerpos como puntos cuánticos de dos electrones [43, 16] o sistemas tipo He de dos electrones [18, 22].

En este capítulo estudiaremos el espectro de energías de un punto cuántico cilíndrico con un electrón. En particular nos interesa analizar el comportamiento del estado resonante de menor energía ante la presencia de un campo magnético externo constante. Este campo magnético es aplicado a lo largo del eje de simetría del cilindro. Se obtiene la energía del estado resonante a partir del método de rotación exterior compleja y la parte real de la energía de resonancia haciendo uso de los métodos fidelidad y la probabilidad de localización del estado en el pozo de potencial. Se comparan los métodos y se estudia la estabilidad de los mismos. La localización del estado resonante se logra interpretar en términos de los niveles de Landau y la probabilidad de localización de la resonancia.

## 3.2. Modelo

El potencial de confinamiento del punto cuántico está dado por una función a trozos,

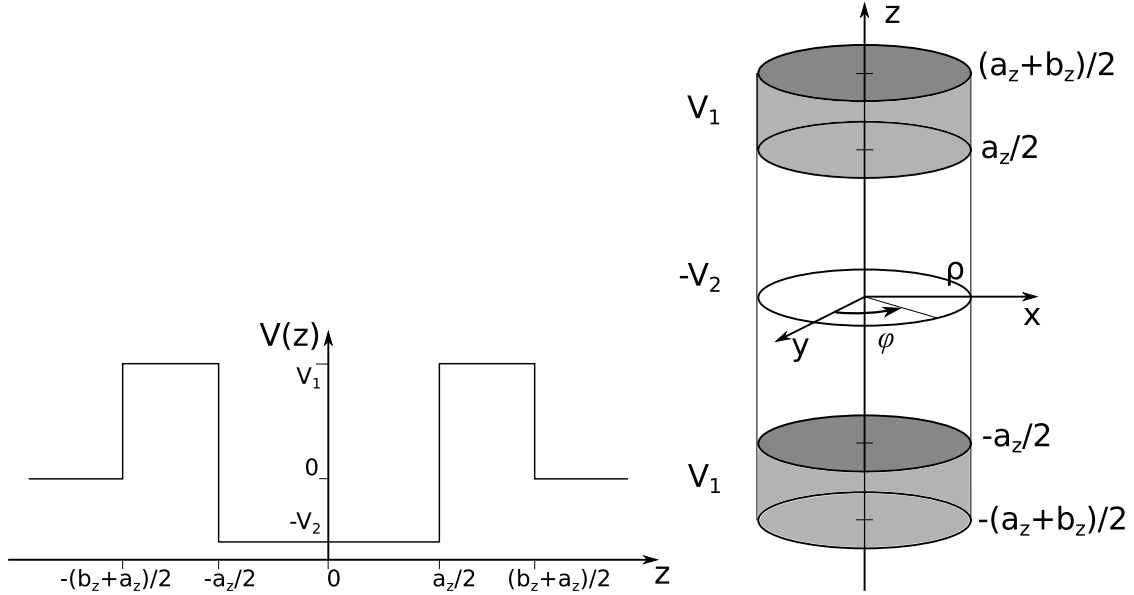
$$V(\rho, z) = \begin{cases} V_1, & \rho < a_\rho, \frac{a_z}{2} < |z| < \frac{a_z+b_z}{2} \\ -V_2, & \rho < a_\rho, |z| < \frac{a_z}{2} \\ 0, & \rho \geq a_\rho, |z| \geq \frac{a_z+b_z}{2} \end{cases} \quad (3.1)$$

El potencial es un pozo cilíndrico alineado con el eje  $z$  de radio  $a_\rho$  y largo  $a_z$  cuya profundidad es  $V_2$ . Tiene dos barreras de potencial, una por encima del cilindro y la otra por debajo que se muestran como dos discos grises oscuros en el panel derecho de la figura 3.2. El alto de los discos es  $\frac{b_z}{2}$ , separado una distancia  $\frac{a_z}{2}$  del cilindro. La altura de la barrera es  $V_1$ . Se puede ver el perfil del potencial que depende de  $z$  en el panel izquierdo. Los valores de los parámetros asociados al potencial,  $a_z$ ,  $b_z$ ,  $a_\rho$ ,  $V_1$  y  $V_2$ , son elegidos de tal forma que exista un estado resonante.

El Hamiltoniano que describe al sistema por ahora está dado por

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\rho, z), \quad (3.2)$$

donde  $\mu$  es la masa efectiva del electrón en el material semiconductor. La ecuación está escrita en unidades atómicas.



**Figura 3.2:** En el panel izquierda se muestra el perfil del potencial que depende de  $z$ , mientras que en el panel derecho se muestra una representación del potencial en tres dimensiones. Las barreras del perfil del panel izquierdo se representan como discos en el potencial tridimensional del panel derecho.

En presencia del campo magnético  $\mathbf{B} = B \hat{k}$  el momento angular  $L_z$  es una cantidad conservada así que sus autovalores son buenos números cuánticos. Trabajamos con momento angular nulo, con lo cual el Hamiltoniano resultante es el siguiente hay un nuevo término que debe ser incorporado, así el Hamiltoniano es [10]:

$$H = H_0 + \frac{B^2}{8\mu} \rho^2. \quad (3.3)$$

El espectro discreto y los estados resonantes de este modelo se pueden obtener en forma aproximada usando funciones variacionales de cuadrado integrable  $\Psi_j^v$  [14, 19, 20, 21]. Si  $\Psi_j$  son las autofunciones exactas del Hamiltoniano, las aproximaciones variacionales (ver apéndice A) están dadas por

$$\Psi_j \simeq \Psi_j^v = \sum_{i=1}^N c_i^{(j)} \Phi_i, \quad c_i^{(j)} = (\mathbf{c}^{(j)})_i, \quad j = 1, \dots, N, \quad (3.4)$$

donde las funciones  $\Phi_i$  deben ser elegidas de manera que conserven las simetrías del sistema, estas funciones forman una base donde  $N$  es la cantidad de funciones de prueba y  $c_i^{(j)}$  son los parámetros variacionales del método de Rayleigh-Ritz.

La base de funciones de prueba que elegimos están de acuerdo con la simetría cilíndrica del sistema. En particular elegimos

$$\Phi_i(\rho, z) = \psi_n(\eta\rho)\phi_i(\nu z), \quad (3.5)$$

donde

$$\psi_n(\eta\rho) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \eta e^{-\eta\rho/2} L_n^{(1)}(\eta\rho), \quad (3.6)$$

y

$$\phi_t(\nu z) = \sqrt{\frac{\nu}{2}} e^{-\nu|z|/2} L_t^{(0)}(\nu|z|), \quad (3.7)$$

$\eta$  y  $\nu$  son parámetros variacionales no-lineales,  $L_n^{(1)}$  es el polinomio asociado de Laguerre de orden  $n$  y tipo 1 y  $L_t^{(0)}$  es el polinomio de Laguerre de grado  $t$ . Los parámetros variacionales no-lineales se suelen elegir de manera de obtener la mejor cota para el estado fundamental (estado ligado). En este sistema no contamos con un estado ligado. Como la resonancia se encuentra inmersa en el continuo queremos parámetros variacionales que hagan que la cantidad de autovalores que representan el continuo sea razonablemente grande en su entorno. En trabajos anteriores [19, 14] se sugieren valores pequeños para estos parámetros. Recordemos que en la sección 2.3 vimos que para parámetro no lineal pequeño las funciones de la base variacional son muy extendidas y resultan, por lo tanto, una buena aproximación para el continuo. En particular en este trabajo usamos  $\eta = \nu = 0,01$ . Sea  $N_\rho$  la cantidad de funciones de prueba en la dirección radial y  $N_z$  la cantidad de funciones de prueba en la dirección  $z$ . Por lo tanto  $N = N_\rho N_z$ .

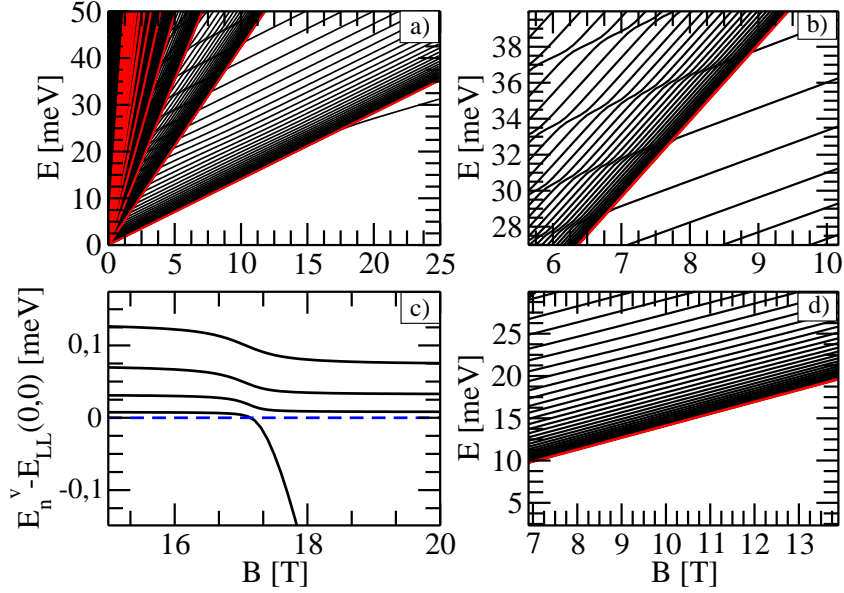
Los elementos de matriz de la energía cinética, el potencial de confinamiento y asociados al campo magnético se muestran en el apéndice B. Con todos los elementos de matriz calculados el problema de autovalores y autovectores que tenemos que resolver es

$$\tilde{\mathbf{H}}\mathbf{c}^{(j)} = E_j^v \mathbf{c}^{(j)}, \quad (3.8)$$

donde los elementos de matriz de  $\tilde{\mathbf{H}}$  están dados por

$$\tilde{\mathbf{H}}_{n,t,s,m} = \langle \psi_n \phi_t | H | \psi_s \phi_m \rangle \quad (3.9)$$

Los puntos cuánticos auto-ensamblados pueden construirse con una gran variedad de materiales, aquí consideramos los mismos materiales utilizados por Bylicki [22], lo que nos permite comparar cuantitativamente con los resultados obtenidos para un sistema similar pero con simetría esférica. Más específicamente, para la realización del punto cuántico consideramos una estructura construida en capas de  $Ga_x In_{1-x} As$  y  $Al_x In_{1-x} As$  con proporciones ( $x$ ) de átomos de  $Ga$  y  $Al$  en  $InAs$  [11, 12, 13] elegidas adecuadamente. Los valores que consideramos son  $a_z = a_\rho = 7[nm]$ ,  $b_z = 2,5[nm]$ ,  $V_1 = 0,37[eV]$ ,  $V_2 = 0,11[eV]$  y  $\mu = 0,041m_0$ . Sin presencia de campo magnético, el valor de la parte real de la energía del estado resonante de menor energía es aproximadamente  $20[meV]$ .



**Figura 3.3:** a) En este panel se muestra el espectro variacional y los niveles de Landau exactos (NL) en [meV] en función de la intensidad del campo magnético  $B$  en [T]. Las curvas negras corresponden al espectro obtenido con el método variacional y las rojas a los niveles NLs. b) En este panel se muestra la zona alrededor del segundo NL, se puede ver como los niveles que cruzan por encima del segundo NL tienen varios cruces evitados. c) Este panel muestra la diferencia entre los primeros cuatro autovalores variacionales  $E_n^v$  y el primer NL, es decir  $E_{NL}(0,0)$  en función de  $B$ . Cuando la diferencia es menor que cero,  $E_1^v$  cruza el primer NL, cuando  $E_1 < E_{NL}(0,0)$  el estado se localiza, eso coincide con el cambio de pendiente del estado fundamental que se observa en a). d) Autovalores sobre el primer NL. El gráfico muestra como los autoestados son, básicamente paralelos al primer NL y se acumulan sobre él.

La figura 3.3 muestra los autovalores variacionales obtenidos y los niveles de Landau (NL) exactos en función de la intensidad del campo magnético  $B$ . El mismo se obtuvo con  $N = 2500$  funciones de prueba,  $N_\rho = 50$  y  $N_z = 50$ . Como se puede observar, los autovalores variacionales están agrupados en sets que están delimitados por los NLs. Los niveles de Landau en función de  $B$ , se obtienen de  $E_{NL}(M, n) = \frac{B}{\mu}(|M| + n + 1/2)$ , donde  $M$  es el momento angular azimutal y  $n = 0, 1, 2, \dots$ . En nuestro caso  $M = 0$ , entonces  $E_{NL}(0, n) = \frac{B}{\mu}(n + 1/2)$ . Un par de niveles de Landau delimita una región del plano  $(B, E)$ , en esta zona los autovalores son paralelos al menor NL, excepto por la aparición de cruces evitados, como se observa en la figura 3.3(a). Los autovalores se acumulan sobre los niveles de Landau. Esta característica es similar a la acumulación de los autovalores observadas sobre el umbral del continuo (ver por ejemplo [19]). Cuando el campo magnético es aplicado, cada nivel de Landau actúa como si fuese un umbral de continuo. En el capítulo anterior vimos que una de las formas de observar la presencia de una resonancia es cuando hay cruces evitados en el espectro del continuo. Este caso

es diferente porque no estamos estabilizando, sino que para cada valor de  $B$  el valor de la energía resonancia va cambiando. En el plano definido entre el segundo y tercer NL (y los planos subsiguientes) pareciera que cada uno de los valores de energía son aparentes resonancias. Sin embargo lo que representan el cambio del número cuántico,  $n$ , que representa el sistema. Pero el único umbral de continuo es el determinado por el primer NL.

Otra característica sobresaliente del espectro es que para un valor de campo lo suficientemente grande (en este caso aproximadamente  $17,5[T]$ ) hay un autovalor con energía menor que el primer NL. Desde el punto de vista físico, el origen de estos estados puede ser entendido a partir de la figura 3.4. En la misma se muestra el campo magnético en función del radio del NL de menor energía y el punto naranja tiene como abscisa el valor del potencial del pozo del punto cuántico y como ordenada el valor de campo en el que el estado se localiza. La expresión para el radio del menor nivel de Landau es

$$\rho_{NL}(N = 0) = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (3.10)$$

Para valores intermedios de la intensidad del campo magnético la función de onda del electrón es similar a la función de onda de un oscilador armónico en el plano  $(\rho, \phi)$  multiplicada por una función de onda plana en la dirección  $z$ . La extensión espacial de la función de onda en el plano es aproximadamente equivalente al radio del NL, que es más grande que el radio en el plano del punto cuántico.

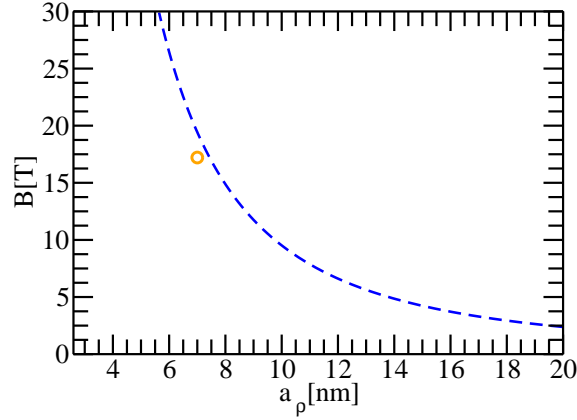
Cuando la intensidad del campo magnético aumenta el radio del NL de menor energía disminuye hasta que el tamaño del radio del NL es similar al del punto cuántico. Para esos parámetros el estado se localiza. Si observamos la figura 3.3 de derecha a izquierda vemos que tenemos un estado ligado y que luego se deslocaliza, pero cuando ingresa en el continuo no presenta cruces evitados. Si recordamos el método de estabilización del capítulo anterior esto indica que la resonancia es muy ancha (es decir que el valor de  $\Gamma$  es muy grande) o lo que es equivalente su tiempo de vida es muy corto o que el valor de  $\Gamma$  se incrementa rápidamente con la variación de  $B$ .

Como se verá más adelante, el mecanismo de localización puede ser cuantificado e influye fuertemente en el comportamiento de los estados de resonancia cuya energía se encuentra cerca del punto de localización. Este mecanismo es el responsable de que el estado se convierta en un estado ligado para un campo magnético lo suficientemente grande.

### 3.3. Detectando los estados de resonancia usando rotación exterior compleja

El cálculo de la energía y el ancho de los estados resonantes se puede realizar de diversas formas. En particular utilizamos la rotación exterior compleja. En nuestro caso como el campo magnético  $B \neq 0$ , el escaleo complejo se debe realizar solamente en la dirección  $z$ .





**Figura 3.4:** La curva en línea entrecortada azul corresponde al campo magnético en función del radio del menor nivel de Landau. El punto naranja indica el valor aproximado del campo magnético en el cuál se produce la localización del sistema y en la abscisa el ancho del pozo  $a_\rho = 7[\text{nm}]$ . Esta información fué obtenida a partir del gráfico c) de la figura 3.3.

Un campo magnético constante en la dirección  $z$  es mapeable a un oscilador armónico en las direcciones  $x$  e  $y$ , es decir el potencial en el plano sólo admite estados ligados así que el estado solamente puede deslocalizarse en la dirección  $z$ . Como el potencial es constante a trozos, tenemos que utilizar el escaleo exterior complejo (ver capítulo 2). El *exterior* en este caso se refiere a las regiones donde el potencial es cero. Por lo tanto la transformación que realizamos es

$$z \mapsto \begin{cases} z' & \text{si } |z| \leq \frac{a_z + b_z}{2}, \\ e^{i\theta} z' & \text{si } |z| \geq \frac{a_z + b_z}{2}, \end{cases} \quad (3.11)$$

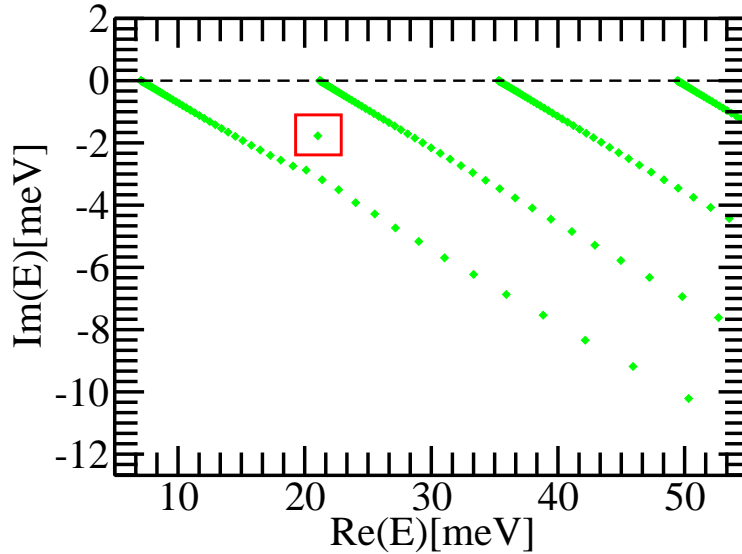
donde  $z$  es la coordenada que va a ser escaleada y  $\theta$  es el ángulo de rotación. El escaleo complejo consiste en transformar los estados resonantes en estados normalizables (con una norma diferente), los cuales se pueden analizar con aproximación variacional. Es decir, la energía y ancho del estado resonante se pueden obtener en forma aproximada como autovalores aislados complejos de un Hamiltoniano complejo finito. Si  $H(\theta)$  es el Hamiltoniano escaleado entonces puede escribirse como el problema variacional complejo de autovalores

$$\tilde{\mathbf{H}}(\theta) \mathbf{d}^{(j)} = E_j^v(\theta) \mathbf{d}^{(j)}, \quad (3.12)$$

donde las entradas de la matriz  $\tilde{\mathbf{H}}(\theta)$  están dadas por

$$\tilde{\mathbf{H}}_{n,t,s,m}(\theta) = \langle \psi_n \phi_t | H(\theta) | \psi_s \phi_m \rangle. \quad (3.13)$$

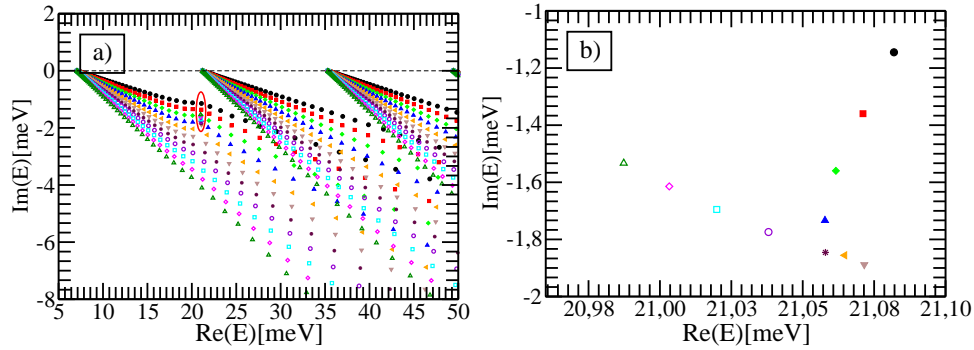
Otra ventaja del método de escaleo complejo es la similaridad entre los elementos de matriz de la ecuación (3.13) y los calculados en (3.9). En varios casos, los elementos de matriz sólo deben ser multiplicados por una constante, aunque en otros hay que obtenerlos nuevamente (ver Apéndice B).



**Figura 3.5:** Parte imaginaria vs parte real de los autovalores de la matriz obtenida luego de la transformación de similitud. Se realizó una rotación de  $\theta = 0,12$  a campo fijo  $B = 5 [T]$ . Cada recta está asociada a los continuos que están determinados por los Niveles de Landau (NL). El punto que se encuentra en el recuadro rojo es el que corresponde a la energía de la resonancia. Al cambiar el valor de la rotación del continuo la posición de este punto debería modificarse muy poco. Para elegir el valor óptimo de  $\theta$ ,  $\theta_{opt}$  hay que ampliar la zona en donde se encuentran estos puntos para diferentes ángulos de rotación, como se muestra en la figura 3.6(b).

La figura 3.5 muestra el espectro complejo obtenido cuando la rotación compleja es realizada de acuerdo a la ecuación (3.12), para  $B = 5 [T]$  y  $\theta = 0,12$ . En principio debería verse una sola recta, pero como vimos en el espectro de la figura 3.3, hay varias. Cada una de las rectas está relacionada con los niveles de Landau (NL), en este caso se observan los primeros cuatro NL. Las rectas corresponden al espectro del continuo el cual forma un ángulo de  $2\theta$  con respecto al eje real. El punto recuadrado en rojo es el que corresponde a la energía del estado resonante y al variar el valor de  $\theta$  este punto debería modificar muy poco su posición. Como se explicó en el capítulo anterior la forma de elegir el valor de ángulo óptimo,  $\theta_{opt}$ , es graficando los puntos asociados a las energías de la resonancia para diferentes valores de  $\theta$ . El valor estacionario se obtendrá para un  $\theta_{opt}$  tal que  $\frac{dE}{d\theta} = 0$ . Las posibles trayectorias que pueden realizar los puntos asociados a las resonancias se ejemplifican en la figura 2.5.

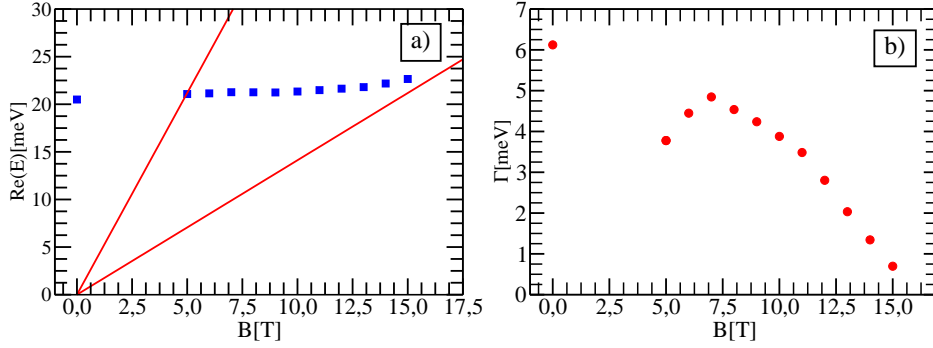
La figura 3.6(a) muestra el espectro complejo para diferentes valores de  $\theta$  a intensidad de campo constante, también a campo  $B = 5 [T]$ . Cada conjunto de puntos de un mismo color en la figura 3.6(a), corresponde a un valor fijo de  $\theta$ , notemos que el espectro de la figura 3.5 que se realiza para  $\theta = 0,12$  se encuentra integrado en este gráfico. Para  $B \neq 0$  los datos para diferentes valores de  $\theta$  forman un abanico de datos, es decir sets de líneas con un origen común en el eje real. Cada uno de estos abanicos puede ser asociado a un



**Figura 3.6:** a) La parte imaginaria vs la parte real de los autovalores de la matriz obtenida luego de la transformación de similaridad. Todos los autovalores fueron calculados para  $B = 5 [T]$  y diferentes ángulos de rotación. Cada manojito de datos tiene valores de ángulo de  $\theta = 0,10$  (puntos negros rellenos),  $\theta = 0,11$  (cuadrados rojos rellenos),  $\theta = 0,12$  (diamantes verdes rellenos), siguiendo así hasta  $\theta = 0,20$  (triángulos verdes sin relleno), cada recta se corresponde con un ángulo diferente y están ordenadas de menor a mayor valor del ángulo. Los tres abanicos de datos están relacionados con los tres primeros NL. Para este valor de campo los dos primeros abanicos se mezclan aproximadamente cuando  $Re(E(\theta)) = 27 [meV]$ . Para  $B < 5 T$ , los abanicos se mezclan antes y se complica determinar la posición de la resonancia. b) Trayectoria  $\theta$  de los autovalores variacionales de la resonancia. Es una ampliación de la zona en donde se acumulan los puntos en (a) y se encuentra encerrada por una elipse de contorno rojo, alrededor de  $Re(E(\theta)) = 21 [meV]$  aproximadamente.

solo NL, por ejemplo el abanico que se encuentra más a la izquierda en la figura 3.6a se corresponde con el primer NL, el abanico central al segundo NL y el que se encuentra a la derecha se corresponde con el tercer NL. Otra vez esta estructura se le puede atribuir al rol que cada NL cumple como *umbral del continuo*. Efectivamente las distancias entre los orígenes de cada abanico, sobre el eje real, es exactamente igual a la distancia entre los niveles de Landau a la intensidad de campo considerado. Cuando la intensidad del campo disminuye, los datos de los diferentes abanicos empiezan a solaparse haciendo más difícil distinguir los autovalores correspondiente a la resonancia.

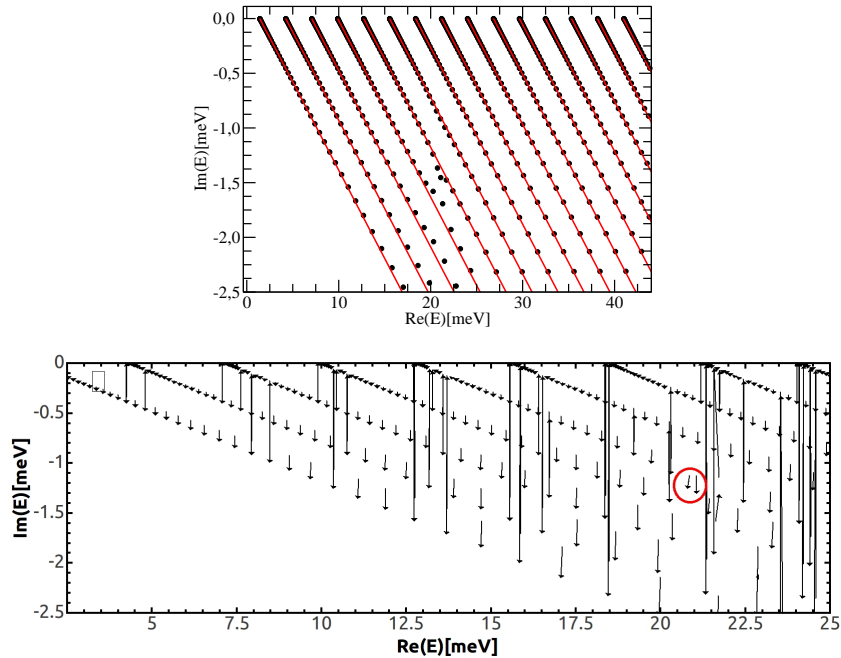
La figura 3.6(b) muestra la trayectoria asociada al autovalor de la resonancia, formada por diferentes valores de  $\theta$ , es una ampliación de la figura 3.6(a) en la zona en donde se encuentran los puntos que casi no cambian con la rotación. Para obtener el valor óptimo de  $Re(E)$  y  $Im(E)$  precisamos la trayectoria. La mejor aproximación corresponde a los puntos estacionarios de la trayectoria. Es decir que para campo  $B = 5 [T]$ , el gráfico que se muestra en la figura 3.6(b), sólo nos quedamos con el triángulo marrón claro correspondiente a  $\theta = 0,16$ . Este procedimiento se realiza para campo desde  $5 [T]$  a  $15 [T]$  y para  $B = 0$  (para ese valor se realizó el método de rotación exterior compleja en las tres dimensiones). La figura 3.7 muestra el comportamiento de la energía y ancho de la resonancia de menor energía como función de la intensidad del campo magnético. Se puede



**Figura 3.7:** a) Parte real de la energía del estado resonante en función de la intensidad del campo magnético. La curva de cuadrados azules se corresponde con las energías de la resonancia y las dos líneas sólidas se corresponden con los dos niveles más bajos de energía de los Niveles de Landau. El valor de  $B = 0$  fué obtenido realizando la rotación compleja en las coordenadas  $\rho$  y  $z$ . b) El ancho de la resonancia vs el campo magnético. Cuando el campo magnético incrementa su valor, el ancho de la resonancia tiende a cero, es decir, se localiza.

ver que el ancho de la resonancia tiende a cero cuando la intensidad del campo magnético incrementa su valor, es decir, podemos intuir que con un valor de la intensidad del campo lo suficientemente grande, el estado resonante se va a localizar. El método de rotación exterior compleja funciona bastante bien para valores intermedios del campo magnético. Para  $B \leq 5[T]$  o  $B \geq 16[T]$ , la convergencia del método es cuestionable. Como explicamos anteriormente, para valores chicos de campo magnético, los abanicos de datos empiezan a solaparse. Como se observa en la figura 3.7 esto coincide con el hecho de que para  $B \approx 5 [T]$  la parte real de la energía de la resonancia es del orden de la energía del segundo NL para este valor ese campo. En esta región los autovalores aproximados que entran en el primer NL se mezclan con los autovalores que quedan entre el primer y segundo NL. Por otro lado, cuando la intensidad del campo es lo suficientemente alta, el radio asociado a los niveles de Landau coincide aproximadamente con el radio del pozo del punto cuántico (como se explicó en la sección anterior) de manera que el estado empieza a localizarse. Es posible obtener los valores de las energías y los anchos de la resonancia para  $B \leq 5T$  modificando el método de búsqueda de los autovalores que corresponden aproximadamente a la resonancia. La figura 3.8 muestra los autovalores complejos aproximados para campo  $B = 1T$  y  $\theta = 0,08$ . Es posible aproximar los autovalores del continuo obtenidos a partir de la rotación compleja, los cuales se encuentran rotados un ángulo  $\theta$ , con  $E_{NL} + \tan(2\theta)E_n$ , porque sabemos que los espectros del continuo forman una línea recta en el plano complejo que forma un ángulo  $2\theta$  con el eje real y que  $E_n$  es el autovalor variacional. Estas rectas se muestran en rojo en la figura 3.8a. Esta aproximación es bastante buena, excepto cerca de la resonancia. Además asumimos que, dado un autovalor complejo  $E_\nu(\theta)$  no debería cambiar mucho si se cambia  $\theta$ , decimos que:

$$|E_\nu(\theta + \delta\theta) - E_\nu(\theta)| \leq \delta\theta |E_\nu(\theta)|, \quad (3.14)$$



**Figura 3.8:** Las figuras ejemplifican la forma de obtener las energías y anchos de la resonancia para  $B \leq 5$  [T]. a) En puntos negros se observa el escaleo complejo para  $B = 1$  [T] y  $\theta = 0,08$ . Se hace uso de que el escaleo complejo rota  $2\theta$  el continuo y que cada mancha de la figura 3.7(a) está relacionado con los NL. En rojo se muestra la recta que se define a partir de los datos anteriores. b) Se muestra en flechas cómo cambian los estados de  $\theta = 0,06$  a  $\theta = 0,07$  a campo  $B = 3$  [T], como los estados forman rectas, las flechas encerradas en círculo rojo son las que se corresponden a estados resonantes. por otra parte se puede entender qué puntos pertenecen a qué abanico de datos a partir de la ecuación (3.14).

donde  $\delta\theta$  es lo suficientemente pequeño. Aplicando estos criterios, es posible descartar puntos que van de un abanico a otro (ver figura 3.8b). Se muestran dos valores de  $\theta$ , se distingue cuál pertenece a cada abanico por la recta que describimos antes, las flechas unen puntos que van desde una recta de  $\theta = 0,06$  a  $\theta = 0,07$ , así que las que no coinciden con las rectas y no son excesivamente largas (criterio de la ecuación (3.14)) son las energías de la resonancia. Los resultados se muestran en la figura 3.11 en donde se comparan con los obtenidos con otros métodos. Los gráficos de trayectorias para  $B < 5$  [T] así como el gráfico del ancho de la resonancia en función del campo, se muestran en el apéndice C.

### 3.4. Detectando los estados de resonancia usando la probabilidad de localización

El confinamiento de la resonancia para un campo lo suficientemente grande es una consecuencia de la fuerte localización experimentada por la función de onda. Por lo tanto es razonable tratar de seguir la resonancia en el espectro haciendo uso de la localización. Para cuantificar la localización de una autofunción aproximada  $\Psi_j^v$ , calculamos la probabilidad de que el electrón esté localizado en el pozo de potencial,

$$P_j = \int_{-\frac{a_z}{2}}^{\frac{a_z}{2}} \int_0^{a_\rho} |\Psi_j^v(\rho, z)|^2 d\rho dz, \quad (3.15)$$

donde  $P_j$  es la probabilidad asociada a la localización de  $\Psi_j^v$ .

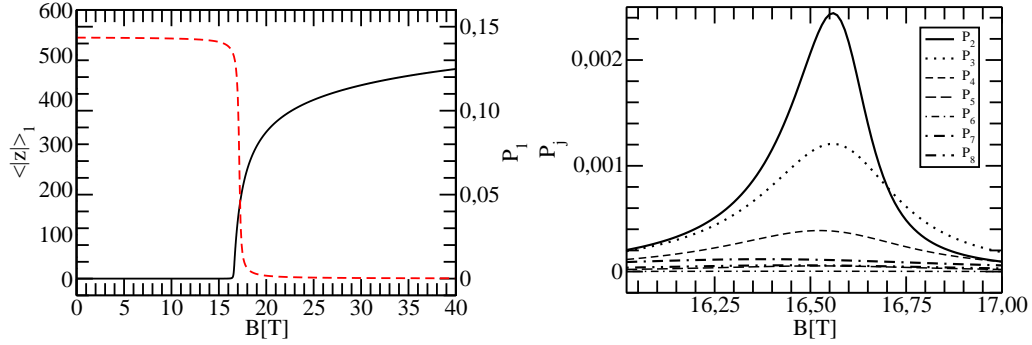
La figura 3.9(a) muestra la probabilidad  $P_1$  como función de la intensidad del campo magnético para el menor autovalor variacional (línea negras continua), mientras que la figura 3.9(b) muestra la probabilidad  $P_j$  para  $j = 2, 3, \dots, 8$ . Las figuras se muestran en diferentes paneles porque tienen escalas diferentes.

Vale la pena mencionar que a pesar de los autovalores variacionales cerca de la localización no mostraron cambios repentinos, excepto el más bajo cuando se separa del primer NL. Por el contrario la probabilidad de localización en el pozo sufre un cambio de comportamiento apreciable para un gran número de autovalores. Como se muestra en la figura 3.11, la probabilidad de localización permite seguir la resonancia desde el umbral de localización hasta  $B \approx 5 [T]$ .

Para valores del campo magnético  $B < 16[T]$ , la probabilidad de localización es tal que  $P_1 \lesssim 10^{-3}$  y es una función suave del campo magnético. El comportamiento cambia abruptamente cerca de  $B \sim 17[T]$  y la probabilidad de localización empieza a aumentar, ver figura 3.9(a). Queda claro que este comportamiento no es compatible con una función de onda extendida. Como las funciones variacionales con las que se estudia el espectro son funciones de cuadrado integrable, el valor de la probabilidad de localización es siempre finita y distinta de cero, en la región del continuo y lejos de una resonancia, las autofunciones deberían parecerse a una onda plana, es decir, deberían estar extendidas en una región espacial cilíndrica con un radio  $R \sim 1/\eta$  y longitud  $L \sim 1/\nu$ , donde  $\eta$  y  $\nu$  son parámetros variacionales no lineales. Por esta razón en la región del continuo y lejos de una resonancia, se puede estimar la probabilidad de localización como  $P_1 \sim a_z a_\rho \eta \nu \sim 10^{-3}$ . La localización de  $\Psi_1^v$  puede analizarse también utilizando el valor esperado

$$\langle |z| \rangle_1 = \int_{-\frac{a_z}{2}}^{\frac{a_z}{2}} \int_0^{a_\rho} |\Psi_1^v(\rho, z)|^2 |z| d\rho dz, \quad (3.16)$$

donde  $|z|$  es el valor absoluto de  $z$ . Consistentemente con el comportamiento observado en la probabilidad de localización, el valor de expectación de  $\langle |z| \rangle_1$  es mucho más grande para  $B < 17[T]$  y su valor cae dos órdenes de magnitud para  $B > 17[T]$ , ver figura 3.9(a). Concluimos que la función de onda del menor autovalor variacional queda confinado dado



**Figura 3.9:** La probabilidad de localización vs la intensidad del campo magnético. El panel izquierdo muestra  $P_1$  (en línea continua negra), es decir, la probabilidad correspondiente al menor autovalor variacional, con escalas de valores en el eje derecho, y  $\langle |z| \rangle_1$  [nm] (en línea entrecortada roja), con escala de valores en el eje izquierdo. Para campos magnéticos lo suficientemente pequeños los autoestados variacionales se extienden sobre una región mucho más grande que la longitudes características del punto cuántico. Cuando  $B \gtrsim 17$  [T] los autoestados comienzan a localizarse, como muestra el repentino incremento de  $P_1$ . En el panel derecho de arriba hacia abajo se muestran,  $P_2$  (línea continua),  $P_3$  (línea punteada), ...,  $P_8$ . La probabilidad de localización muestra picos cuando los autovalores correspondientes cruzan cerca de una resonancia.

que  $\langle |z| \rangle_1 \sim 540$  [nm] para  $B = 0$  y cae a  $\langle |z| \rangle_1 \sim 3$  [nm] para  $B \sim 18$  T. Sumado a que  $\langle |z| \rangle_1 \sim 3$  [nm] es consistente con la dimensión longitudinal del punto cuántico. Además en la figura 3.3a se muestra que el menor autovalor se aísla del continuo para  $B > 17$  T.

El escenario presentado anteriormente nos lleva a la siguiente conclusión, la resonancia por encima del primer NL se produce por la “colisión” del estado ligado, que corresponde al autovalor más bajo, con el continuo por encima del primer NL. Los cruces evitados originados por esta colisión pueden ser claramente apreciados en la figura 3.3 (c), y refuerza la interpretación de que el confinamiento de la resonancia se produce cuando un estado ligado aparece, para un campo magnético lo suficientemente grande. En este sentido, el estado de la resonancia se comporta como una resonancia de forma y el potencial radial que produce el campo magnético es el que cambia esa forma. Finalmente, cuando el autovalor más bajo está ligado y aislado, el ancho de resonancia es cero, lo que explica el confinamiento de la resonancia para valores campo lo suficientemente grandes.

El comportamiento de las probabilidades de localización  $P_j$ , con  $j > 1$  es bastante diferente. Dichas  $P_j$  no son funciones monótonamente crecientes de  $B$  a diferencia de  $P_1$ , en su lugar ellas muestran un máximo más o menos pronunciado para algún valor de  $B$ , ver figura 3.9(b). La altura del máximo de un dado  $P_j$  depende de la intensidad con que el autovalor  $j$  experimentó el cruce evitado. Si es alta, los máximos son más altos y si es suave conducen a máximos más bajos.

Interpretamos que el pico en una determinada probabilidad de localización aparece cuando el autovalor correspondiente es una aproximación razonable de la energía de la

resonancia en ese valor particular de  $B$ . En otras palabras,  $E_{res}(B_j^{pico}) \approx E_j^v(B_j^{pico})$ , donde  $B_j^{pico}$  es el valor del campo magnético donde  $P_j$  alcanza su máximo. El  $E_j^v(B_j^{pico})$  permite encontrar el valor de la energía de la resonancia hasta el segundo NL. Por encima del segundo NL el espectro muestra una región de múltiples continuos, generando múltiples cruces evitados debido a la interacción de *dos continuos*. Este método ya no puede distinguir los cruces evitados que causa la resonancia en esta región. Los  $E_j^v(B_j^{pico})$  se muestran en la figura 3.12, en el que se comparan con las energías de resonancia obtenidas utilizando los otros métodos.

### 3.5. Detectando los estados de resonancia usando fidelidad

Para un estado cuántico puro  $\psi$ , que depende de un parámetro  $\lambda$ , una medición de cuánto cambia este estado cuando cambia el parámetro está dado por la fidelidad  $\mathcal{F}$

$$\mathcal{F}_{\Delta\lambda}(\lambda) = |\langle \psi(\lambda - \Delta\lambda), \psi(\lambda + \Delta\lambda) \rangle|^2, \quad (3.17)$$

donde  $\Delta\lambda$  es una pequeña variación del parámetro.

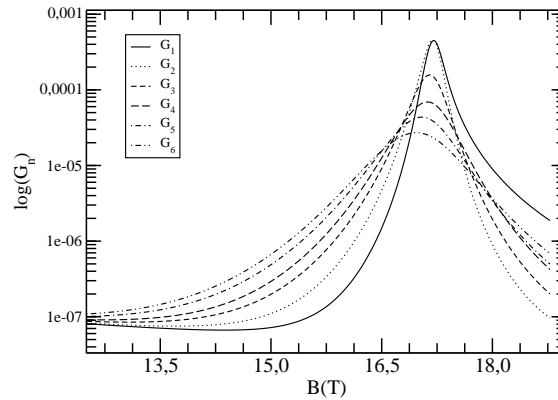
La fidelidad ha sido ampliamente usada para caracterizar las propiedades analíticas de estados cuánticos, cerca de transiciones de fase cuánticas, en modelos de cadenas de espín [25] o estados ligados y resonantes en modelos atómicos o en puntos cuánticos [14]. En puntos cuánticos de dos electrones se ha mostrado que la fidelidad de los autoestados variacionales detecta estados resonantes y permite calcular sus energías en forma aproximada [14]. Para lograrlo la fidelidad de los autestados debería ser calculada como función de un parámetro externo que cambia el sistema de estados ligados a no-ligados. En este trabajo, este parámetro es la intensidad del campo magnético.

De la ecuación (3.17) se deduce que la mayoría de las veces  $\mathcal{F}_{\Delta\lambda} \approx 1$ , excepto para casos especiales. Por otra parte la fidelidad debería tender a cero si el sistema experimenta un cambio repentino [25]. Por esta razón es conveniente estudiar la función

$$\mathcal{G}_n(\lambda) = 1 - |\langle \Psi_n^v(\lambda - \Delta\lambda), \Psi_n^v(\lambda + \Delta\lambda) \rangle|^2. \quad (3.18)$$

La figura 3.10 muestra el comportamiento de la función  $\mathcal{G}_n$  para  $n = 1, 2, \dots, 6$ , como función de la intensidad del campo magnético. Cada curva tiene un pico más o menos bien definido para un dado valor de campo magnético  $B_n$ . Los valores de  $E_n^v(B_n)$ , es decir los valores de los autovalores variacionales evaluadas en el punto en donde los picos de  $\mathcal{G}_n$  alcanzan su máximo valor, dan una buena aproximación para la energía de resonancia al punto  $B_n$ . Como se señala en la referencia [14] la fidelidad no nos permite obtener la energía de resonancia para todos los valores del campo magnético, sin embargo este método nos provee de otra herramienta para analizar los estados resonantes. El método de la fidelidad trabaja bien cuando el ancho de la resonancia no es muy grande. Por lo tanto esperamos que funcione bien cerca del punto de localización.





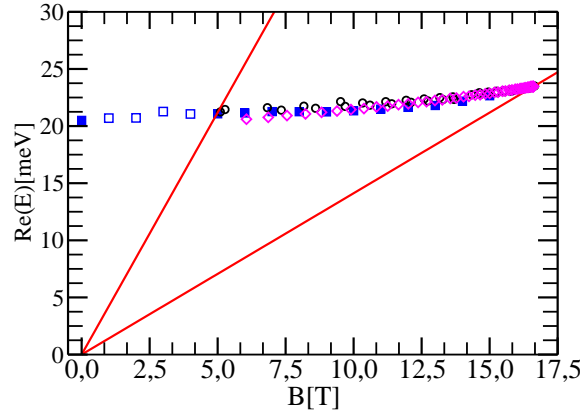
**Figura 3.10:** La función  $\mathcal{G}_n$  vs la intensidad del campo magnético. La figura muestra la función de las primeras seis autofunciones variacionales,  $\mathcal{G}_1$  (en línea continua),  $\mathcal{G}_2$  (en línea punteada),  $\mathcal{G}_3$  (línea entrecortada), ...,  $\mathcal{G}_6$  (en doble punto y línea). El punto donde las curvas alcanzan su máximo es claramente apreciable.  $B_n$  se determina por el valor de la abscisa en el cual se encuentra el pico.

Resumimos los resultados obtenidos con los diferentes métodos en la figura 3.11. Esta figura muestra la energía del estado resonante como función de la intensidad del campo magnético. Cabe mencionar que cuando la fidelidad y la localización se utilizan para  $B \leq 5[T]$ , no se pueden identificar los picos, ya que en esta zona los estados entran en el segundo continuo. Este problema es similar al que presentaba la rotación exterior compleja, sin embargo este último caso fue solucionado y sus resultados se muestran en esta figura en cuadrados azules.

De la figura 3.11 es bastante claro que tanto el método de localización y la fidelidad son capaces de seguir la resonancia desde el punto de localización hasta el segundo NL. De todos modos, hay que tener cierto cuidado en este punto. El método de rotación compleja está ligado a un procedimiento de estabilización que, cuando se utiliza correctamente, da una idea acerca de la precisión de los resultados obtenidos. Esto no es cierto para el método que hace uso de la fidelidad. La mejor forma para estabilizar los resultados obtenidos a partir de la fidelidad implica tomar el mayor tamaño de base posible,  $N$ , en donde  $N_z = N_\rho$ . De lo contrario, la convergencia de los datos obtenidos a partir de este método, no es uniforme. La figura 3.12 muestra el comportamiento de la energía de resonancia obtenida siguiendo el método de la Fidelidad con diferentes tamaños de base. Vale la pena mencionar que las energías de resonancia obtenidas con  $N = 900$  y  $N = 3600$  difieren en menos de 5%.

### 3.6. Localización de la resonancia

Buscamos saber cómo es el comportamiento del sistema cuando el ancho del pozo del punto cuántico varía. Por esta razón a partir de la fidelidad y de la localización calculamos



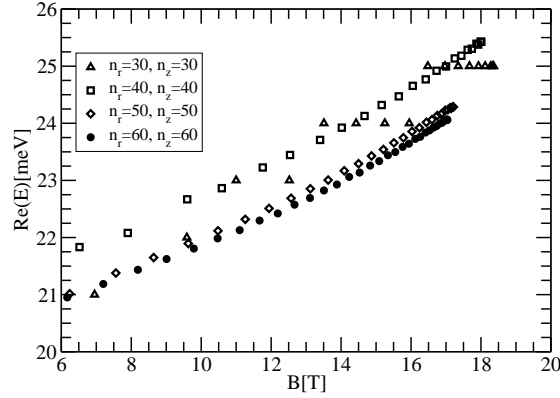
**Figura 3.11:** La parte real de energía de la resonancia calculada usando los tres métodos explicados a lo largo de este capítulo: rotación exterior compleja (cuadrados azules rellenos), localización (círculos negros no rellenos) y fidelidad (diamantes magenta no rellenos). La energía de los estados resonantes que se encuentran por encima del segundo NL pueden obtenerse usando una versión modificada de la rotación exterior compleja ver figura 3.8(a) y (b), los mismos se muestran en cuadrados azules vacíos.

los valores de los campos críticos a partir de los cuales el estado se localiza. Llamemos  $B_p(a_\rho)$  a campos críticos obtenidos a partir de la probabilidad y  $B_{\mathcal{F}}(a_\rho)$  a los obtenidos con la fidelidad. En la figura 3.13 se muestran  $B_p(a_\rho)$  y  $B_{\mathcal{F}}(a_\rho)$  como función ancho del pozo del punto cuántico, lo cuales por cierto, dan resultados coincidentes. También se muestra en ese gráfico el radio del menor NL en función de  $B$ .

### 3.7. Discusiones

El campo magnético externo impide el escape del electrón en el plano  $(\rho, \phi)$ , por esa razón el potencial de ligadura del punto cuántico consiste en un pozo de potencial y dos barreras, ambos en la dirección  $z$ , para asegurar la presencia de estados resonantes (con valores de la profundidad del pozo y altura de la barrera que permitan la existencia de un estado resonante). En este sentido, el problema tiene varias longitudes características, el radio de punto cuántico, los radios de los niveles de Landau y la longitud de los puntos cuánticos alrededor del eje  $z$ . Las longitudes que entran en juego para el conjunto de parámetros de este trabajo, son el radio del punto cuántico y el menor radio del NL. La profundidad del pozo y otros parámetros del punto cuántico son elegidos para asegurar que para  $B = 0$  no haya estados ligados.

La probabilidad de localización es capaz de seguir a la resonancia hasta el segundo NL. Por encima del segundo NL los autovalores tienen demasiados cruces evitados, debido a los “múltiples continuos” que interactúan en esta región del espectro, lo que hace que este método no sea capaz de seguir a la resonancia. Por la misma razón la fidelidad puede seguir a la resonancia hasta el segundo NL.

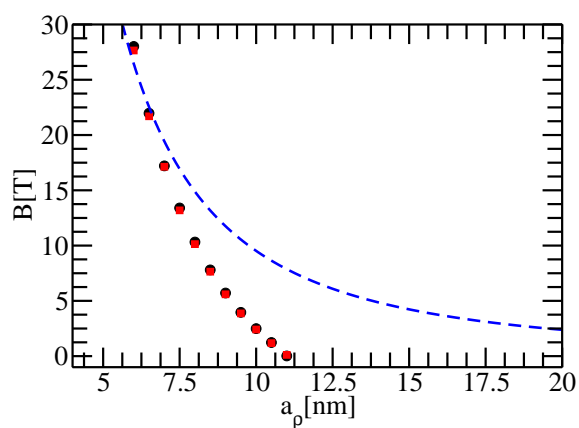


**Figura 3.12:**  $E_n(B_n)$  vs la intensidad del campo magnético. La figura muestra los datos obtenidos usando diferentes tamaños de base,  $N = 30 \times 30$ , triángulos no rellenos;  $N = 40 \times 40$ , cuadrados no rellenos;  $N = 50 \times 50$ , diamantes no rellenos; y  $N = 60 \times 60$ , puntos rellenos.

Finalmente, ambos campos críticos,  $B_p(a_\rho)$  y  $B_{\mathcal{F}}(a_\rho)$ , muestran claramente dos regímenes, para radios pequeños del punto cuántico los cuales son menores que radio del menor NL, en esta región ambos son proporcionales a  $1/a_\rho^2$ . Para radios del punto cuántico lo suficientemente grandes se muestra un comportamiento distinto, los radios en este caso son proporcionales a  $(\alpha - \beta a_\rho)^2$ , donde  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes.

Nuestro sistema claramente se encuentra en la zona intermedia, como fue indicado anteriormente. Es por ello que se observa tanta riqueza de comportamientos en el espectro, en donde ambos tamaños característicos, radio de punto cuántico y radio del NL tienen mucha importancia y dependiendo del valor del campo magnético importa un valor característico o el otro.

Los puntos cuánticos auto-ensamblados, como el considerado en este capítulo, no tienen en general un mecanismo de carga preciso como lo tienen los puntos cuánticos bidimensionales que confinan electrones regulando la diferencia de potencial de los electrodos que los conforman. Los puntos cuánticos auto-ensamblados se cargan, cuando admiten un estado ligado, promoviendo electrones de la banda de valencia a la de conducción. Lo cual se produce irradiando el punto cuántico con un campo de radio frecuencia. El *binding* de resonancias permite fijar un electrón a cada punto cuántico controladamente, lo que provee un mecanismo de iniciado bastante confiable.



**Figura 3.13:** Los campos críticos  $B_p(a_p)$  y  $B_{\mathcal{F}}(a_p)$  vs el radio del punto cuántico. La campo crítico obtenido con la probabilidad de localización (cuadrados rojos rellenos) y el obtenido con la fidelidad (puntos negros rellenos) son mostrados para varios valores de radios del punto cuántico. La línea entrecortada es la intensidad del campo magnético en función de la curva correspondiente al radio del menor NL. Queda claro que cuando los radios del punto cuántico son chicos la localización se realiza cuando la función de onda cilíndrica se introduce en el pozo del punto cuántico. Para radios grandes del punto cuántico la localización es dominada por el pozo de potencial y no por el campo magnético.

# Bibliografía

- [1] Ch. Sikorski y U. Merkt, Phys. Rev. Lett. **62** 2164 (1989).
- [2] S. Reimann y M. Manninen, Rev. Mod. Phys. **74**, 1283 (2002).
- [3] L. Kouwenhoven, D. Austing y S. Tarucha, Rep. Prog. Phys. **64**, 701 (2001).
- [4] N. Moiseyev, Phys. Rep. **302** 211 (1998).
- [5] P. Schattschneider, Th. Schachinger, M. Stöger-Pollach, S. Löffler, A. Steiger-Thirsfeld, K. Bliokh y F.Nori. Nat. Comm. **5**, 4586 (2014).
- [6] C. Ellenberger, T. Ihn, C. Yannouleas, U. Landman, K. Ensslin, D. Driscoll y A. Gossard, Phys. Rev. Lett. **96**, 126806 (2006).
- [7] D. Loss y D. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [8] R. Takahashi, K. Kono, S. Tarucha y K. Ono, Phys. Rev. Lett. **107**, 026602 (2011).
- [9] M. Bylicki, J. Phys.:Conf. Ser. **104** 012022, (2008).
- [10] M. Bylicki y W. Jaskólski, Phys. Rev. B **60** 15924, (1999).
- [11] J. Porto, J. Sanchez-Dehesa, L. Cury, A. Nagaret y J. Portal, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 887 (1994).
- [12] M. Bylicki, W. Jaskólski y R. Oszwaldowski, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 6393 (1996).
- [13] W. Jaskólski y M. Bylicki, Vacuum **48**, 235 (1997).
- [14] F. Pont , O. Osenda, J. Toloza y P. Serra Phys. Rev. A **81**, 042518 (2010).
- [15] R. Nazmitdinov , N. Simonović, A. Plastino y A. Chizhov *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** 205503 (2012).
- [16] S. Abdullah, J. Coe e I. DâAmico, Phys. Rev. B **80**, 235302 (2009).
- [17] O. Osenda y P. Serra, Phys. Rev. A **75**, 042331 (2007).

- [18] A. Majtey, A. Plastino y J. Dehesa, *J. Phys. A* **45**, 115309 (2012).
- [19] A. Ferrón, O. Osenda y P. Serra, *Phys. Rev. A* **79**, 032509 (2009).
- [20] M. Bylicki, W. Jaskólski, A. Stachów J. Diaz, *Phys. Rev. B* **72** 075434 (2005).
- [21] A. T. Kruppa y K. Arai, *Phys. Rev. A* **59**, 3556 (1999).
- [22] M. Bylicki, *J. Phys.: Conf. Ser.* **104** 012022 (2008).
- [23] Y. Sajeev , V. Vysotskiy, L. Cederbaum y N. Moiseyev, *J. Chem. Phys.* **131**, 211102 (2009).
- [24] V. Mandelshtam, T. Ravuri y H. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1932 (1993).
- [25] P. Zanardi y N. Paunković, *Phys. Rev. E* **74** 031123 (2006).

# Capítulo 4

## Propiedades espectrales de un modelo de qubit híbrido

### 4.1. Introducción

Los qubits semiconductores son unas de las mayores promesas para implementar el procesamiento de información cuántica y computación cuántica. Existen diferentes tipos de qubits, los qubits de carga, de espín, basados en excitones y los qubits híbridos [1, 2]. Con el avance de la tecnología se desarrollaron sofisticadas técnicas que ayudan a mejorar el desempeño y la escalabilidad [6] de estos qubits, como la integración [3] y la litografía [4].

Por otra parte, entre las desventajas de utilizar este tipo de sistemas se encuentra la dificultad de aislar el sistema microscópico (por ejemplo, el electrón, su espín o el estado de espín de algunos electrones) de la matriz semiconductor en la cual se encuentra embebido. La inevitable interacción entre el sistema microscópico y su ambiente produce una pérdida de coherencia del estado cuántico. Afortunadamente, los principales mecanismos que producen la decoherencia son bien conocidos y se han desarrollado estrategias que permiten disminuir el tiempo de operación en los sistemas y aumentar su tiempo de coherencia [7]. Se caracterizará algunos sistemas que son utilizados como qubits semiconductores y se detallará cuáles son los problemas asociados a cada tipo de qubit y el mecanismo de decoherencia más relevante. Luego se introducirá el concepto de qubit híbrido, el cuál implica una mejora respecto a los tiempos de operación y es el sistema que se estudiará en este capítulo.

Un qubit de carga es uno en el que la información es almacenada en los grados de libertad espaciales de uno o varios electrones [8, 1]. El principal mecanismo de decoherencia en este caso es debido al acoplamiento entre el electrón y los fonones térmicos presentes en el semiconductor. Un qubit de carga basado en un doble punto cuántico ofrece un muy buen control del sistema pero sus tiempos de coherencia son cortos, rondan los pocos nanosegundos [10]. Se han hecho numerosos estudios experimentales de la decoherencia en este tipo de sistemas como la relajación de la carga en un sistema de  $Si/SiGe$  [11] o de

relajación simultánea de espín-carga en *AsGa* [12]. Como la información es guardada en los grados de libertad espaciales, las compuertas cuánticas que actúan sobre el qubit se valen del fuerte acoplamiento que hay entre el campo externo aplicado (por ejemplo un campo de radiofrecuencia) y la carga del electrón y por lo tanto sus tiempos de operación dependen de dicho parámetro. La intensidad del acoplamiento está determinada por la extensión espacial de la función de onda del electrón, este hecho impulsó el estudio del qubit basado en un excitón, en el cual el acoplamiento es más pequeño que en el caso electrónico [13, 14, 15]. El par agujero-electrón (excitón) se genera en un semiconductor cuando un electrón de la banda de valencia es promovido a la banda de conducción, pero su acoplamiento con los fonones térmicos depende de la diferencia entre los estados electrónicos y los del agujero [16]. Por lo tanto es razonable emplear qubits de carga, basados en estados de partículas que poseen cargas de valores opuestos, ya que se atenúan los efectos de decoherencia inducida por los fonones, permitiendo tiempos de operación que rondan los picosegundos.

El espín de un electrón atrapado en un punto cuántico fue una de las primeras propuestas realizadas en el marco de la computación cuántica. Un qubit de espín es una implementación en la cual la información es almacenada en el momento angular intrínseco de una o más partículas (típicamente dos). Desde la propuesta original de DiVincenzo y Loss [17] de utilizar el espín de un electrón atrapado en un punto cuántico (QD), como qubit se han sumado numerosas variantes con el fin de eliminar alguno (o varios) de los problemas asociados a su implementación. Por ejemplo, se extendió la idea al usar dos electrones [18, 19] o tres [20, 21]. Los mecanismos de decoherencia son esencialmente debidos al acoplamiento entre los espines electrónicos y los espines nucleares de los átomos del semiconductor. Muchos de estos avances fueron realizados gracias al desarrollo en el área de Resonancia Magnética Nuclear (RMN), desde las técnicas de secuencia de pulsos [22, 23, 24] hasta las técnicas de supresión de ruido dinámico [25, 26], llegando a tiempos de coherencia que rondan los microsegundos. Algunos de los más espectaculares avances han sido logrados al intentar lidiar con los mecanismos de decoherencia usando qubits basados en quantum dots embebidos en muestras de Silicio ultra puro [27, 28, 29]. A pesar de los largos tiempos de coherencia que se pueden obtener, los qubits de espín tienen dificultades en la integración y la interacción con otros qubits, porque su diseño se volvió cada vez más complicado. Otra complicación relevante tiene que ver con la baja intensidad del acoplamiento entre el espín y los campos magnéticos externos aplicados ya que provocan que los tiempos de operación sean excesivamente largos, lo cual deja que los mecanismos de decoherencia perturben el estado de interés.

Un qubit híbrido de carga-espín almacena la información en el espín electrónico pero las operaciones de compuertas son realizadas mediante campos eléctricos acoplados a la carga del electrón. Estos sistemas logran una buena relación entre los tiempos de operación y los de coherencia, tomando los mejores aspectos de los qubits arriba descritos. Por supuesto hay varios tipos de qubits híbridos, para más información ver por ejemplo las citas [31, 32]. En particular, una década atrás, Tokura y colaboradores [33] propusieron un qubit híbrido de carga-espín, el cual muestra tiempos largos de coherencia y tiempos cortos de operación, el cual mejora cuando el gap de energía entre los estados de qubit están en el rango de los



$\mu\text{eV}$ . El modelo propuesto consiste de un nano-cable que confinaba a un electrón en una dimensión, un oscilador armónico o caja infinita y un par de campos magnéticos, uno a lo largo del nano-cable y el otro (gradiente) en sentido perpendicular. En la última parte del trabajo se amplió el modelo a dos qubits basados en dos quantum dots en serie [34] para poder implementar una compuerta cuántica. El propósito fue implementar resonancia de espín de un electrón en quantum dots.

En este capítulo se estudiarán las propiedades espectrales de un qubit híbrido inspirado en el modelo propuesto por Tokura [33], pero haciendo menos restrictivos algunos requerimientos de confinamiento, en particular, el modelo a considerar no será unidimensional sino bidimensional con lo que el momento angular orbital (o parte de él) jugará un rol no trivial. En el modelo bidimensional el electrón se encuentra confinado en un plano (para fijar ideas digamos que es el plano  $z - y$ ). El confinamiento en la dirección  $z$  se modelará con un potencial cuártico (equivalente a un doble pozo de potencial). Además, aplicados sobre el electrón hay dos campos magnéticos ortogonales entre sí. A lo largo de la dirección de confinamiento  $z$  el campo magnético es uniforme y constante, mientras que en la dirección perpendicular al plano  $y - z$  se aplica un campo con un gradiente no-nulo, de forma tal que el campo apunta en direcciones opuestas en cada pozo del potencial cuártico.

Empezaremos detallando algunas peculiaridades importantes del trabajo de Tokura [33]. Suponer un modelo unidimensional simplifica el estudio del mismo, aunque lograr un confinamiento unidimensional es sumamente complicado para sistemas microscópicos. En cambio, en films delgados de *AsGa*, que se pueden fabricar usando tecnología actual. Para entender mejor cual es el rol de cada término que se agrega al Hamiltoniano se procede incorporando paulatinamente distintos términos. Los modelos que estudiamos son

- un modelo unidimensional análogo al de Tokura,
- un modelo bidimensional que permite tener un potencial de confinamiento de doble pozo simétrico o no,
- un modelo bidimensional con confinamiento en la dirección  $y$ , pero provista por un potencial suave, con energías y longitudes características similares a las ya presentes en el modelo anterior.

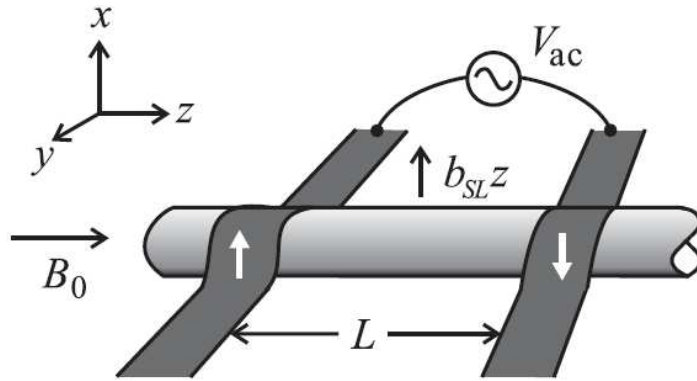
Todos estos modelos serán considerados con valores compatibles con las constantes macroscópicas adecuadas a un material específico, y campos dentro del rango de los valores propuestos por Tokura.

El conocimiento del espectro de los sistemas nos permite “navegar” entre sus diferentes parámetros y encontrar estados iniciales determinados. En particular, como se trabajará con puntos cuánticos de un electrón, se busca dos estados suficientemente separados del resto del espectro para poder definir un qubit con ellos. Se espera que teniendo un buen estado inicial del sistema, la evolución temporal, a partir de un pulso eléctrico, sea controlable.

## 4.2. Modelo unidimensional de Tokura

Tokura y colaboradores [33], propusieron un modelo de qubit híbrido, el cuál tendría tiempos de operación cortos y de coherencia largos. Se presenta a continuación los rasgos principales del modelo ya que son instructivos y permiten comprender la fenomenología que se espera.

En dicho trabajo Tokura y colaboradores propusieron un qubit a partir de un hilo semiconductor unidimensional. Se muestra un esquema del qubit en donde el hilo se encuentra en la dirección  $z$  en la figura 4.1. El hilo, en una implementación experimental, podría ser un nanotubo de carbono o un nanocable semi-conductor. Este semiconductor se encontraría limitado por electrodos ferromagnéticos que determinan un punto cuántico y a partir de los cuales se genera un gradiente de campo magnético transversal  $b_{sl}$  en las coordenadas  $x$  e  $y$ . Otra forma de generar ese gradiente transversal de campo magnético propuesto es mediante una inhomogeneidad estática en la polarización del espín nuclear.



**Figura 4.1:** Modelo de un punto cuántico unidimensional en un campo transversal Zeeman. En gris oscuro se muestran los electrodos ferromagnéticos los cuales son colocados en la dirección  $x$ , uno en sentido positivo y otro en el sentido contrario, creando así una variación en el campo magnético  $b_{sl}$ . Al sistema se le aplica un campo magnético uniforme  $B_0$  en la dirección  $z$ . El espín del punto cuántico es controlado mediante la aplicación de un voltaje oscilante  $V_{ac}$  entre los dos electrodos. Figura extraída de la referencia [33].

Al sistema se le aplica también un campo magnético constante  $B_0$  en la dirección  $z$  como se muestra en la figura 4.1. El campo magnético resultante es de la forma  $\mathbf{B} = (b_{sl}z, 0, B_0 + b_{sl}x)$ . Como este sistema está fuertemente confinado en las direcciones  $x$  e  $y$  se puede eliminar el término  $b_{sl}x$  y los términos de los campos magnéticos que afectan esas coordenadas, mientras que el término asociado a  $z^4$  es despreciable. Por lo tanto el

campo resultante termina siendo:  $\mathbf{B} = (b_{sl} z, 0, B_0)$ . El Hamiltoniano resultante es:

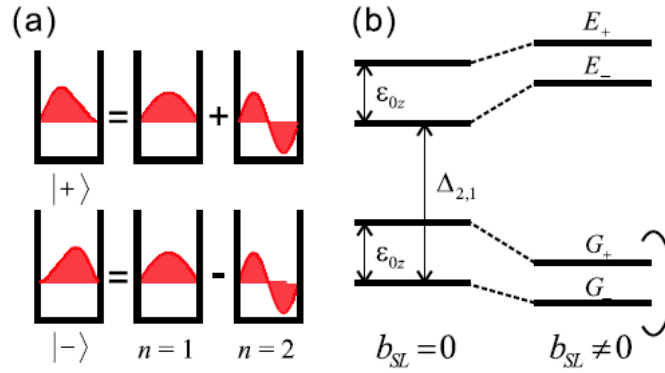
$$H = H_{00} + H_{0s}, \quad \text{con} \quad (4.1)$$

$$H_{00} = \frac{p_z^2}{2m} + V(z) - g\mu_B B_0 S_z \quad (4.2)$$

$$H_{0s} = -g\mu_B b_{sl} z S_x, \quad (4.3)$$

donde  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr,  $S_z$  es la proyección del espín del electrón en la coordenada  $z$ ,  $S_x$  es la proyección del espín del electrón en la coordenada  $x$ ,  $g$  es el factor efectivo de Landé y  $V(z)$  es el potencial de confinamiento del punto cuántico, cuya longitud característica es  $L$ . Este trabajo se modela una caja de potencial con barrera infinitas y de longitud  $L$  o un potencial armónico  $V(z) = \frac{m\omega_0^2}{2} z^2$ .

El Hamiltoniano  $H_{00}$  tiene solución exacta. Sus autoenergías son:  $\varepsilon_{n\sigma} = E_n - \frac{1}{2}\varepsilon_{0z}\sigma$  con  $\varepsilon_{0z} = |g\mu_B B_0|$  y sus autofunciones son:  $\langle z|n, \sigma\rangle = \xi_\sigma \phi_n(z)$ , donde  $n = 1, 2, \dots$ ,  $\sigma = \pm 1$  y  $\xi_\sigma$  es el espinor.



**Figura 4.2:** a) Representación esquemática de cómo la oscilación espacial entre las funciones de onda y  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  implican hibridación de múltiples estados. b) Espectro del punto cuántico con dos niveles orbitales de energía separados una distancia  $\Delta_{2,1}$  y energía Zeeman constante  $\varepsilon_{0z}$  con y sin gradiente  $b_{sl}$ . Los niveles más bajos constituyen el qubit:  $G_+$  y  $G_-$ . Figura extraída de la referencia [33].

Considerando que la energía Zeeman  $\varepsilon_{0z}$  es más pequeña que la separación entre los niveles orbitales  $\Delta_{n,m} = \varepsilon_{n\sigma} - \varepsilon_{m\sigma}$  y usando teoría de perturbaciones para el Hamiltoniano  $H_{0s}$  se obtiene una aproximación al gap de energía entre el estado fundamental y el primer excitado:

$$\varepsilon_z = G_+ - G_- \sim \varepsilon_{0z} \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{M_{1,2}^2}{\Delta_{2,1}^2 - \varepsilon_{0z}^2} \right], \quad (4.4)$$

donde  $M_{1,2}$  es un coeficiente resultante la corrección de la perturbación a segundo orden del término asociado a  $H_{0s}$ .

De esta manera se puede reducir el sistema a uno de dos niveles, formado por los estados  $|G_\pm\rangle$  (qubit). Existe un factor llamado factor de Calidad  $Q$ , que nos da una

pauta de si el sistema es viable para ser implementado en computación cuántica, el cual describiremos inmediatamente después de definir algunas cantidades que son necesarias para su cálculo. Para aumentar el valor de este factor de calidad, se aplica un voltaje oscilante al electrón, en lugar de campos magnéticos oscilantes. Como el sistema ya fue reducido a uno de dos niveles, se considera la perturbación dependiente del tiempo  $H_1(t) = eV_{ac}(t)\frac{z}{L}$ , donde  $V_{ac} = V_0 f(t)$ .  $H_1(t)$  es una función impar de  $z$  que es independiente del espín. Por lo tanto los elementos diferentes de cero se encuentran fuera de la diagonal  $\langle G_\sigma | H_1 | G_{-\sigma} \rangle \simeq (C_{1\sigma}^{(1)} + C_{1-\sigma}^{(1)})eV(t)Y_{2,1} \equiv \frac{1}{2}\varepsilon_x f(t)$ , donde  $|G_\sigma\rangle = C_\sigma^{(0)}|1, \sigma\rangle + \sum_{l>0} C_{l\sigma}^{(1)}|2l, -\sigma\rangle + \sum_{n>0} C_{n\sigma}^{(2)}|2n+1, \sigma\rangle$  es la autofunción de  $H$  corregida hasta segundo orden,  $C_{p,\sigma}^{(j)}$  son los coeficientes de corrección a orden  $j$  y  $p$  es el parámetro sobre el que va la suma que resulta del método perturbativo, excepto para el orden cero que no sólo depende de  $\sigma$ . El valor  $Y_{2,1}$  es el producto interno espacial en la dirección  $z$  y se define  $Y_{m,n} = \int dz \phi(z)_m^* \frac{z}{L} \phi_n(z)$ . La expresión que se obtiene para el Hamiltoniano efectivo es

$$H_e = \frac{1}{2}\varepsilon_z \sigma_z + \frac{1}{2}\varepsilon_x f(t)\sigma_x, \quad (4.5)$$

el cual es equivalente al que se obtendría usando campos magnéticos oscilantes [35]. Para una perturbación sinusoidal:  $f(t) = \cos(\omega t)$ , donde  $\hbar\omega = \varepsilon_z$  se determina la frecuencia de resonancia. Para esa frecuencia el tiempo requerido para realizar una operación (es decir para ir desde  $|G_+\rangle \rightarrow |G_-\rangle$ ) es:

$$\tau_\pi = \frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_x}. \quad (4.6)$$

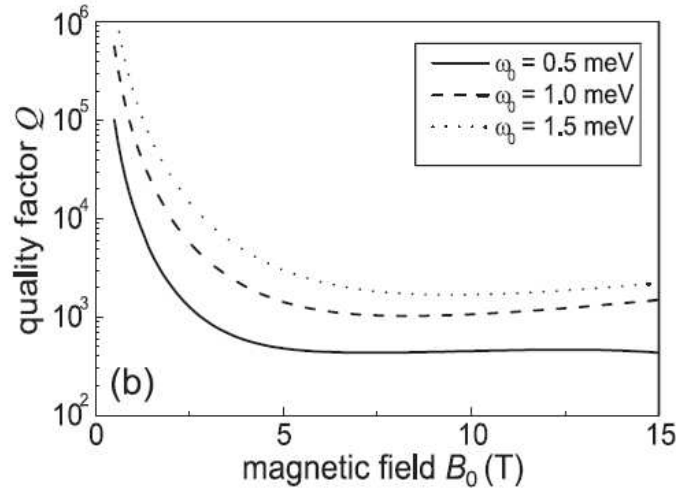
La coherencia del espín se ve afectada por los procesos de relajación orbital. En las energías relevantes en este sistema se encuentra que el mecanismo de relajación dominante es la dispersión de fonones acústicos. Por lo tanto se modela el Hamiltoniano de dispersión electrón-fonón y se estiman el tiempo de relajación  $T_1$  y de coherencia  $T_2$ , para una definición más precisa ver la referencia [35].

El límite superior para el factor de calidad  $Q$  de operación de un qubit está caracterizado por la razón entre  $2T_1$  y el tiempo  $\tau_\pi$ :

$$Q \sim \frac{2\Delta_{2,1}\tau_p(\varepsilon_z)}{\pi\hbar} \frac{eV_0}{|E_{sl}|} \left(1 - \frac{\varepsilon_{0z}^2}{\Delta_{2,1}^2}\right), \quad (4.7)$$

con  $E_{sl} = -q\mu_B b_{sl}L$  y  $\tau_p(\varepsilon_z)$  es el tiempo de relajación definido en analogía a la regla de oro de Fermi para la transición del nivel 2 al 1 con una transferencia de energía  $\varepsilon_z$ . Notemos que el factor de calidad depende de la amplitud de modulación del voltaje  $V_0$ , del campo magnético constante  $B_0$  (a partir de  $\varepsilon_{0z}$ ) y del potencial de confinamiento,  $L$ , del dot (el cual en el caso que el potencial es un oscilador armónico es:  $L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ ).

En la figura 4.2 se puede ver el factor de calidad  $Q$  en función del campo magnético  $B_0$  en Tesla, el cual puede ser obtenido con  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$  con un material ferromagnético [36],  $V_0 = 10[\mu V]$  [37, 38] y con  $t_\pi \sim 400[ns]$  (si  $\hbar\omega_0 = 1[meV]$ ). Notemos que para valores chicos del campo magnético  $B_0$  el factor de calidad es alto, superior a  $10^4$ , el cual viabiliza la implementación de computación cuántica [39] en este qubit.



**Figura 4.3:** Factor de Calidad  $Q$  en función del campo magnético  $B_0$  para una operación de qubit. Se muestran tres valores de confinamiento del oscilador armónico, para  $\hbar\omega_0 = 0,5[meV]$  en línea continua,  $\hbar\omega_0 = 1,0[meV]$  en línea entrecortada y  $\hbar\omega_0 = 1,5[meV]$  en línea punteada. Figura extraída de la referencia ??.

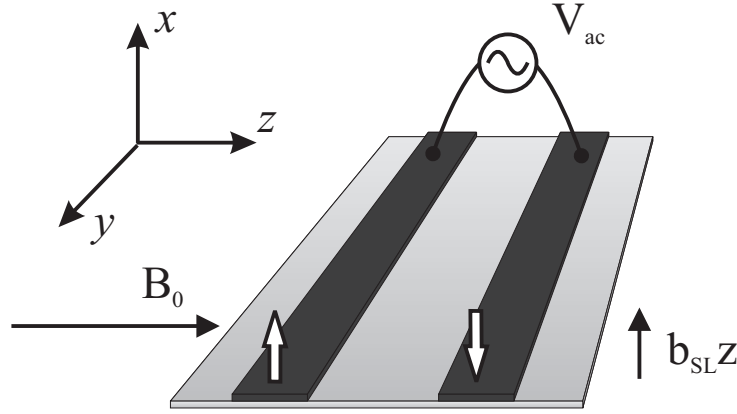
### 4.3. Propuesta de modelo bidimensional

El confinamiento unidimensional propuesto por Tokura tiene un doble objetivo. Por un lado permite despreciar las contribuciones debidas a las otras coordenadas espaciales  $y$ , y, en consecuencia, el Hamiltoniano considerado no incluye ningún término relacionado con el momento angular orbital. Por otro lado, a pesar de la dependencia espacial de uno de los campos magnéticos aplicados al punto cuántico, los términos del momento angular de espín pueden tratarse fácilmente, la base de estados de qubit son siempre auto-estados del momento angular de espín en la dirección  $\hat{x}$ . Por supuesto, en el caso de que el confinamiento no es estrictamente unidimensional, esto no puede darse por sentado.

En esta sección se analiza un sistema muy similar, el cual permite incluir una serie de características que un modelo unidimensional no puede. Lo extendemos proponiendo un sistema bidimensional. Por lo tanto debemos considerar los términos espaciales del Hamiltoniano asociados al campo magnético constante ( $B_0$ ) y al campo gradiente ( $b_{sl}$ ). El potencial que se utilizará para confinar al electrón es un doble pozo cuántico asimétrico. La idea es identificar un qubit con los niveles más bajos de energía y se buscará ver si existe algún régimen en donde las dos energías más bajas del espectro se encuentran separadas del resto. De esta manera se puede reducir el sistema a uno de dos niveles. En primer lugar nos enfocaremos en las propiedades espectrales del sistema y analizaremos su estabilidad. En el siguiente capítulo le aplicaremos un voltaje  $V_{ac}$  para poder intercambiar el qubit entre sus estados base.

En la figura 4.4 se muestra, esquemáticamente, los elementos que forman el modelo bidimensional. La superficie representa la región de dos dimensiones, donde el electrón

está confinado. Se aplica un campo magnético constante ( $B_0$ ) en el eje  $z$ , también en esta dirección, el electrón está confinado por un doble pozo de potencial.



**Figura 4.4:** Modelo bidimensional basado en el unidimensional propuesto por Tokura. La dimensión extra se extiende en la dirección  $y$ . Nuevamente en gris oscuro se observan las cintas ferromagnéticas, las cuáles general un gradiente de campo  $b_{sl}$ , en la dirección  $z$  se aplica un campo magnético constante  $B_0$ . Sobre los electrodos se aplica una diferencia de potencial  $V_{ac}$  variable en el tiempo.

En la penúltima sub-sección consideraremos un potencial de confinamiento en la dirección  $y$ . De todas formas el campo  $B_0$  produce un confinamiento en esta dirección, su longitud de confinamiento es más grande que el radio del primer nivel de Landau asociado a un campo magnético de intensidad  $B_0$ . El otro campo magnético que se aplica al sistema tiene un gradiente constante  $b_{sl}$ , o equivalentemente [33] un campo magnético de la forma

$$B_{sl} = (b_{sl} z, 0, b_{sl} x), \quad (4.8)$$

idéntico al que presentado en la sección 4.2 que es generado por las cintas ferromagnéticas representadas por las dos bandas negras paralelas que se encuentran en el eje  $y$ . A pesar de que el sistema descrito anteriormente es bidimensional, el comportamiento físico principal debe ser similar al comportamiento observado en el sistema propuesto por Tokura que explicamos en la sección anterior, es decir cuando el electrón esté en un potencial determinado el momento dipolar magnético debe apuntar en la dirección que minimiza la energía. Como el potencial que tenemos es un doble pozo, para algún rango de parámetros, por ejemplo, el momento dipolar puede apuntar hacia arriba en el pozo de la izquierda y hacia abajo en el pozo de la derecha. Por supuesto, en un sistema de dos dimensiones esto no es equivalente a decir que cuando un electrón está localizado en un pozo de potencial va a ser un autoestado del operador de Pauli  $\sigma_x$ , que es proporcional al momento angular de espín del electrón.

Este último comentario remarca la elegancia de la propuesta hecha por Tokura y colaboradores, ya que el sistema unidimensional que propuso garantiza que los autoestados

del Hamiltoniano son además autoestados de  $\sigma_x$ , simplificando el análisis del espectro, los auto-estados y sus propiedades.

El Hamiltoniano del electrón,  $\mathcal{H}$ , es descrito por la Ecuación de Pauli [40]

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^*} \left[ \vec{\sigma} \cdot \left( -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t) \right) \right]^2 + V(\mathbf{r}), \quad (4.9)$$

donde  $\mathbf{A}$  es el potencial vector,  $\sigma$  son las matrices de Pauli,  $V(\mathbf{r})$  es el potencial de doble pozo asimétrico y  $m^*$  es la masa efectiva del electrón. En este trabajo nosotros usamos la masa efectiva asociada al *AsGa* con  $m^*/m = 0,067$ .

El campo magnético aplicado al punto cuántico está dado por

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1 = (b_{SL}z, 0, B_0 + b_{SL}x), \quad (4.10)$$

en donde  $\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$  y  $\mathbf{B}_1 = (b_{SL}z, 0, b_{SL}x)$ , mientras que los potenciales vector asociados

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \left( 0, \frac{b_{SL}}{2}(x^2 - z^2), 0 \right) \\ \mathbf{A}_0 &= \left( -\frac{B_0}{2}(y, -x, 0), \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

se obtienen usando el gauge simétrico.

Reemplazando las expresiones obtenidas para el potencial vector y los campos magnéticos, ecuaciones (4.10),(4.11), en el Hamiltoniano, ecuación (4.9), y tomando como el potencial de confinamiento

$$V(\mathbf{r}) = V(z) = \frac{m^*\omega_0^2}{8b^2}(z^2 - a^2)^2 - \gamma\frac{\hbar\omega_0}{a}z, \quad (4.12)$$

se puede encontrar que

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(z) + \frac{i\hbar e}{m^*c} \left[ -\frac{B_0}{2}\frac{\partial}{\partial x} + \left( \frac{b_{SL}}{2}(x^2 - z^2) + \frac{B_0}{2}x \right) \frac{\partial}{\partial y} \right] + \\ &+ \frac{e^2}{2m^*c^2} \left[ \frac{B_0^2 y^2}{4} + \frac{b_{SL}^2}{4}(x^2 - z^2)^2 + \frac{b_{SL}B_0}{2}(x^2 - z^2)x + \frac{B_0^2}{4}x^2 \right] \\ &- \frac{\hbar e}{2m^*c} [b_{SL}z\sigma_x + (B_0 + b_{SL}x)\sigma_z]. \end{aligned} \quad (4.13)$$

El potencial de confinamiento, ecuación (4.12), es una generalización del conocido potencial de doble pozo, que tiene los dos pozos centrados, uno en  $a$  y el otro en  $-a$ , donde  $\omega_0$  establece la escala de energía y el parámetro  $b$ , que tiene unidades de longitud, permite el cambio de altura del potencial en  $z = 0$ . El término lineal en la ecuación (4.12) cumple un doble propósito, por una parte permite la posibilidad de que el electrón confinado en el potencial tenga un estado fundamental no degenerado. Por otra parte, permite estudiar que sucede cuando ambos pozos de potencial tienen diferente profundidad. Está claro que la diferencia de profundidad entre los pozos de potencial en sus centros ( $\pm a$ ) está dado

por  $\Delta_{pw} = 2\gamma\hbar\omega_0$ . Si  $\hbar\omega_0$  es del orden de 1 meV y  $\gamma \approx 10^{-1}$ , entonces  $\Delta_{pw}$  es del orden de la diferencia de energía entre los estados bases de qubit para los cuales el sistema ha sido diseñado. Finalmente, notemos que si  $b = a$  y para  $a$  lo suficientemente grande, el estado fundamental de energía del electrón es una fracción de  $\hbar\omega_0$  (cuando están muy separados se puede estimar que esa fracción es  $\frac{\hbar\omega}{4}$ ).

El espectro del Hamiltoniano en la ecuación (4.13), es bastante complicado de calcular porque carece de simetrías y por el acoplamiento entre los grados de libertad del espín. Además, hay varias escalas de longitud y energía que caracterizan el comportamiento físico. Es interesante observar que, usando notación matricial, el Hamiltoniano (4.13) puede escribirse como

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix} + H_1 \otimes \sigma_x + H_2 \otimes \sigma_z \\ &= \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & H_1 \\ H_1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H_2 & 0 \\ 0 & -H_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} H + H_2 & H_1 \\ H_1 & H - H_2 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.14)$$

Entonces, despreciando los términos relacionados a la coordenada  $x$ , introduciendo el escaleo de las variables espaciales  $y' = y/a$ ,  $z' = z/a$  y adimensionalizando respecto a  $\hbar\omega_0$ , obtenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{2d}^{\hbar\omega_0} &= -\frac{\hbar\omega_a}{2\alpha\hbar\omega_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial^2 z'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right] + \frac{\alpha\hbar\omega_0}{8\hbar\omega_a} (z'^2 - 1)^2 - \gamma z' - \\ &- \frac{i\hbar\omega_{sl}}{2\alpha\hbar\omega_0} z'^2 \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{8\alpha(\hbar\omega_a)(\hbar\omega_0)} y'^2 + \frac{(\hbar\omega_{sl})^2}{8\alpha(\hbar\omega_a)(\hbar\omega_0)} z'^4 - \\ &- \frac{\hbar\omega_{sl}}{2\alpha\hbar\omega_0} z' \sigma_x - \frac{\hbar\omega_c}{2\alpha\hbar\omega_0} \sigma_z.\end{aligned}\quad (4.15)$$

donde  $\alpha = m^*/m$ ,  $\omega_c = \frac{eB_0}{2mc}$ , es la frecuencia de Larmor asociada al campo magnético  $B_0$ ,  $\omega_{sl} = \frac{eb_{sl}a}{2mc}$ , es la frecuencia de Larmor del campo magnético  $b_{sl}a$ ,  $\omega_a = \frac{\hbar}{ma^2}$ , y el sufijo  $2d$  indica que es de “dimensión dos”. La frecuencia  $\omega_a$  es introducida para hacer evidente que  $\frac{\mathcal{H}_{2d}}{\hbar\omega_0}$  es efectivamente adimensional.

Los diferentes términos en el Hamiltoniano (4.15) están caracterizados por los cocientes entre cuatro energías:  $\hbar\omega_0$ ,  $\hbar\omega_c$ ,  $\hbar\omega_a$  y  $\hbar\omega_{sl}$ . Generalmente, el rol de  $\omega_a$  se puede entender si recordamos que  $\frac{\hbar\omega_0}{\hbar\omega_a} = \left(\frac{a}{\ell_0}\right)^2$ , donde  $2a$  es la distancia entre los mínimos del potencial cuártico y  $\ell_0$  es la longitud característica de un oscilador armónico cuántico cuya energía es  $\hbar\omega_0/2$ . Si el electrón está bien localizado en un dado pozo de potencial, entonces  $\ell_0 < a$  y  $\frac{\hbar\omega_0}{\hbar\omega_a} > 1$ . En estos casos cuando  $a$  incrementa su valor, los dos pozos del potencial cuártico comienzan a estar cada vez más separados y el espectro consiste en un conjunto de niveles casi degenerados, al menos para valores lo suficientemente pequeños de  $\gamma$ . La situación descrita es tal que los dos términos asociados a los campos magnéticos son relevantes



para producir un par de estados apropiados para ser usados como estados de base de un qubit. En este escenario las energías están ordenadas  $\hbar\omega_0 > \hbar\omega_a$  pero no sabemos en qué lugar se van a encontrar  $\hbar\omega_c$  y  $\hbar\omega_{sl}$ .

### 4.3.1. Implementación del cálculo numérico

El método variacional de Ritz (ver Apéndice A) ha sido usado para obtener aproximaciones de gran precisión del espectro de energías de muchos sistemas diferentes [42, 43, 44].

Para aplicar este método tenemos que elegir un conjunto de funciones de prueba con las simetrías del Hamiltoniano y que tengan en cuenta las distintas escalas de energía y de longitud presentes en el modelo. Del análisis realizado anteriormente, es razonable tomar el conjunto de bases  $\{\chi_{\{i\}}\}_{i=1}^M$ , tal que

$$\chi_{\{i\}} = \Psi_{k,n}^p \beta, \quad (4.16)$$

donde  $k = 1, \dots, L$ ,  $n = 1, \dots, N$ ,  $p = \pm$ ,  $\beta$  es uno de los auto-estados de  $\sigma_z$ ,  $\{i\} \equiv (k, n, p, \beta)$  y

$$\Psi_{k,n}^{\pm}(y, z) = \phi_k(y) \psi_n^{\pm}(z). \quad (4.17)$$

Las funciones en la ecuación (4.17) están dadas por

$$\phi_k(y) = \mathcal{N}_k H_k(\mu y) e^{-\mu^2 y^2 / 2}, \quad (4.18)$$

$$\psi_n^{\pm}(z) = C_n^{\pm} (\psi_n^{+a}(z) \pm \psi_n^{-a}(z)), \quad (4.19)$$

con

$$\psi_n^{\pm a}(z) = \mathcal{N}_n H_n(\eta(z \mp a)) e^{-\eta^2 (z \mp a)^2 / 2}, \quad (4.20)$$

donde  $H_m$  son los polinomios de Hermite, y  $\mathcal{N}_m$  y  $C_n^{\pm}$  son constantes de normalización.

Las funciones de la ecuación (4.19) fueron elegidas como combinación de funciones centradas en cada uno de los pozos del potencial siguiendo la referencia [45].

Está claro que ambos tipos de funciones,  $\phi_k$  y  $\psi_n^{\pm a}$  en las ecuaciones (4.18) y (4.20) son autofunciones del oscilador armónico donde los parámetros variacionales no lineales  $\eta$  y  $\mu$  serán elegidos para minimizar el valor de energía del estado fundamental que se obtiene aplicando el método de Ritz. Mencionemos también que la base de funciones tiene dimensión  $M$  dada por  $M = 4 \cdot L \cdot N$ .

Las diferentes longitudes de escala antes mencionadas sugieren que la base debe tener funciones bien localizadas en cada uno de los dos pozos del potencial cuártico. Las funciones propuestas satisfacen estas condiciones. Para  $a$  suficientemente grande el parámetro variacional no-lineal  $\eta$  debería ser aproximadamente  $1/\ell_0$ , y como las auto-funciones  $\psi_n^{\pm a}$  se encuentran centradas en  $a$  o en  $-a$ , se tiene en cuenta ambas longitudes de escala  $a$  y  $\ell_0$ . Mientras tanto, en la dirección  $y$ , las funciones  $\phi_k$  están centradas en cero. Notemos que el conjunto de funciones de prueba elegido para la dimensión  $z$  no es ortonormal, por lo tanto tendremos que resolver el problema de autovalores generalizado.

Las autofunciones variacionales  $\Xi_j^v$  pueden ser obtenidas de las soluciones del problema de autovalores generalizado

$$\mathbf{H}\mathbf{c}_j = E_j^v \mathbf{S}\mathbf{c}_j, \quad (4.21)$$

donde los elementos de la matriz  $\mathbf{H}$  están dados por la matriz de elementos del Hamiltoniano bidimensional, ecuación (4.15)

$$\mathbf{H}_{ij} = \langle \chi_i | \mathcal{H}_{2d}^{\hbar\omega_0} | \chi_j \rangle, \quad (4.22)$$

y  $\mathbf{S}$  es la matriz de solapamiento, la cual está definida como

$$\mathbf{S}_{ij} = \langle \chi_i | \chi_j \rangle. \quad (4.23)$$

Una vez que los autovalores  $E_j^v$  y autovectores  $\mathbf{c}_j$  son obtenidos, las autofunciones aproximadas están dadas por

$$\Xi_j^v = \sum_i \mathbf{c}_j^i \chi_i, \quad (4.24)$$

donde  $\mathbf{c}_j^i$  es el  $i$ -ésimo elemento del vector columna  $\mathbf{c}_j$ .

Aquí nos enfocaremos en algunas características referidas al procedimiento numérico que se realizó. Para resolver el problema de autovalores generalizado se utilizó el conocido método de Cholesky, ver Apéndice E. Los elementos de matriz fueron calculados exactamente a partir cálculos algebraicos asociados a los operadores creación y aniquilación y de integrales conocidas que se muestran en el Apéndice F. Las expresiones analíticas son evaluadas usando algoritmos en Fortran multiprecisión (MP Fortran) y el problema de autovalores se resolvió con una precisión de 16 cifras significativas. Para diagonalizar el problema se utilizaron las subrutinas de Numerical Recipes: *tqli* y *tred*, con modificaciones que nos permitieran trabajar en cuádruple precisión. La subrutina *tqli* transforma una matriz real simétrica en una matriz tridiagonal y la subrutina *tred2* encuentra autovalores y autovectores de matrices tri-diagonales. Son de las combinaciones más eficientes para encontrar autovalores y autovectores (o sólo autovalores) de una matriz simétrica real. Como el Hamiltoniano asociado tiene términos complejos y las subrutinas utilizadas diagonalizan matrices simétricas reales, por lo tanto convertimos la matriz Hermitiana a una matriz simétrica real (para más detalles ver Apéndice F).

Para empezar con el estudio del comportamiento físico del punto cuántico, recordemos primero que nuestra búsqueda está orientada a encontrar un sistema con un par de estados que pueda ser usados como estados base de un qubit. En particular, la información será almacenada en el espín electrónico, pero como el intercambio entre estos pares de estados será realizado usando un potencial eléctrico, el par de estados debería tener un valor de expectación fácilmente distinguible (idealmente estos deberían ser dos autoestados ortogonales de  $\sigma_x$ ) y estar localizados en diferentes pozos del potencial cuántico. Este análisis sugiere que debemos considerar el espectro y los valores de expectación de los operadores  $\sigma_x$  y  $z$ .

Para entender cómo se comporta este sistema vamos a estudiar primero qué sucede en un sistema unidimensional [33, 45]. Luego analizaremos el sistema bidimensional, veremos

qué pasa si se utiliza un potencial de confinamiento en la dirección  $y$  el cual va a estar dado por un oscilador armónico unidimensional. Finalmente, presentaremos un sistema en el que los criterios de control se cumplen muy bien, pero uno de sus parámetros no es accesible experimentalmente.

### 4.3.2. Modelo unidimensional

Este sistema, que ha sido ampliamente analizado, por ejemplo en [45], va a ser de gran ayuda como “toy model” para entender el comportamiento básico de un qubit híbrido. La configuración es análoga a la que explicamos en la sección 4.18 [33]. Cuando el sistema es bidimensional y es sometido a la presencia de un campo magnético, el Hamiltoniano que modela el sistema tiene un término imaginario que hace más complicado el cálculo numérico. Cambiar diferentes parámetros ya no es tan fácil porque el programa de diagonalización demora más tiempo en terminar y si deseamos cambiar el valor de algún parámetro se debe realizar una estabilización para determinar los valores óptimos de los parámetros variacionales no-lineales asociados a la dimensión  $z$  y a la  $y$ . En cambio en el modelo unidimensional tenemos un sólo parámetro no lineal y la cantidad de funciones de prueba es menor.

#### 4.3.2.1. Detalle numérico

El Hamiltoniano que describe al sistema completo es:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{1d}^{\hbar\omega_0} &= -\frac{\hbar\omega_a}{2\alpha(\hbar\omega_0)} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} + \frac{\alpha(\hbar\omega_0)}{8(\hbar\omega_a)} (z'^2 - 1)^2 - \gamma z' + \frac{(\hbar\omega_{sl})^2}{8\alpha(\hbar\omega_0)(\hbar\omega_a)} z'^4 \\ &- \frac{\hbar\omega_{sl}}{2\alpha(\hbar\omega_0)} \sigma_x z' - \frac{\hbar\omega_c}{2\alpha(\hbar\omega_0)} \sigma_z, \end{aligned} \quad (4.25)$$

Este Hamiltoniano incluye los términos de espín, del campo magnético  $B_0$  y del gradiente transversal  $b_{sl}$ . Las funciones de prueba que vamos a utilizar son las que detallamos anteriormente para el eje  $z$  (combinaciones lineales de funciones centradas en  $a$  y  $-a$ ).

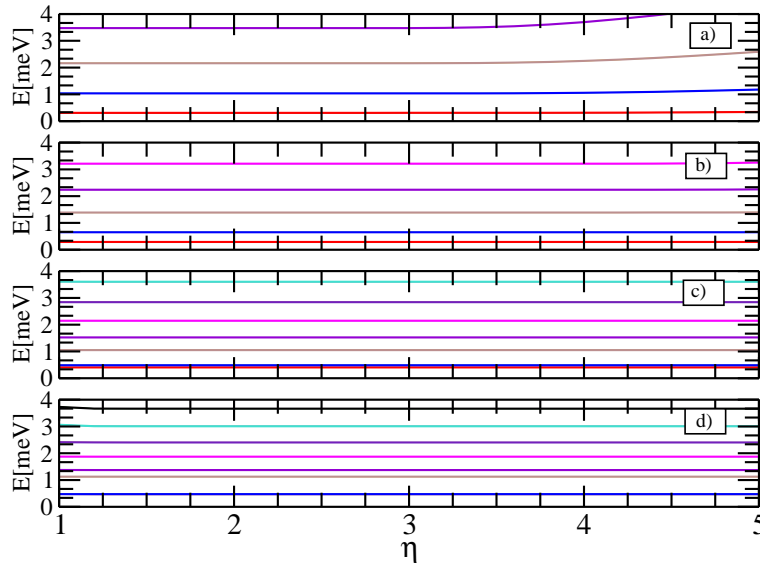
Los valores sobre los que vamos a trabajar son:  $\hbar\omega_0 = 1$  meV,  $\alpha = 0,067$  (correspondiente al *AsGa*, como dijimos antes) y un tamaño de base de  $n_z = 50$  (cincuenta funciones prueba y 100 si se considera el espín). El tamaño de base se eligió considerando un balance entre rapidez en el cálculo numérico y mejores cotas para los niveles de energía del estado fundamental. Los parámetros del sistema son elegidos de manera de poderlos comparar con el sistema de Tokura [33].

#### 4.3.2.2. Sistema sin campo magnético ni asimetría

Vamos a ir agregando los términos del sistema uno por uno para analizar su importancia relativa. Empezamos analizando la estabilidad del sistema en el caso en el que vamos cambiando el valor de  $a$ . Cuando se utiliza el método variacional, es común investigar

cual es la dependencia de los autovalores más bajos con los parámetros variacionales no-lineales. Idealmente, si el tamaño de la base es suficientemente grande, los autovalores deberían ser independientes de los parámetros no-lineales. En ese caso se habla de un problema “bien estabilizado” y el resultado es preciso. En general, suele haber algún valor para los parámetros no-lineales que optimizan el valor del autovalor más chico. El tamaño de la región alrededor de los valores óptimos en la cual el menor autovalor parece independiente de los parámetros no-lineales depende del tamaño de la base, de cuáles son las funciones base, etc. Una región amplia es equivalente a un problema bien estabilizado.

No se considera la presencia de campo magnético constante ni de gradiente de campo magnético, tampoco se considera el término de asimetría. Se puede observar en la figura 4.5 que este sistema es muy estable ante cambios en la separación de los pozos (2a). Para un rango de  $\eta$  en el intervalo (1, 5) el estado fundamental es constante, para  $a = 30$  [nm] con un error relativo menor a  $1 \times 10^{-3}$ , para  $a = 50$  [nm]  $1 \times 10^{-4}$  y para  $a = 80$  y  $100$  [nm] el error relativo es menor a  $1 \times 10^{-5}$ . Entonces es posible elegir el mismo parámetro variacional no lineal en el rango entre  $a = 30$  [nm] hasta  $a = 100$  [nm]. El parámetro que elegimos es  $\eta = 3$ . También se realizó estabilización para el problema con el término asimetría y se encontró el mismo valor de  $\eta$ .

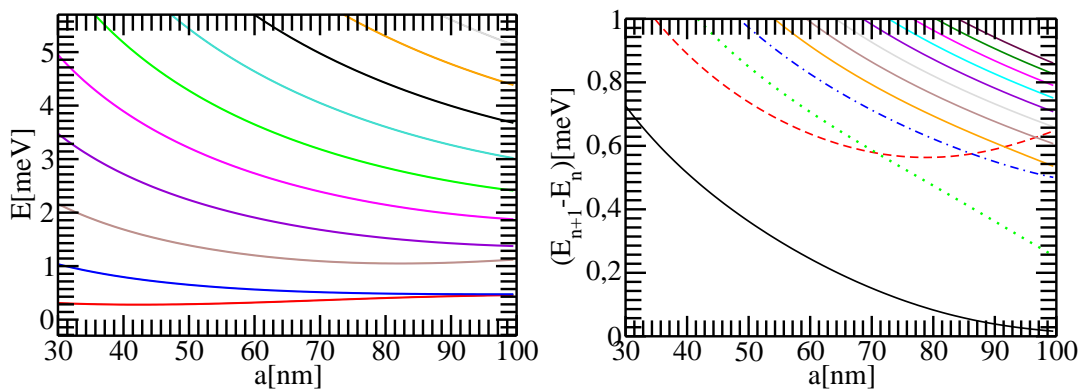


**Figura 4.5:** Los gráficos muestran la estabilidad del sistema unidimensional en función del parámetro variacional no lineal  $\eta$  en ausencia de campos magnéticos y de asimetría en el potencial ( $\gamma = 0$ ). Los parámetros fijados son:  $\hbar\omega_0 = 1$  [meV],  $\alpha = 0,067$ , el tamaño de la base es de  $n_z = 50$ . No consideramos el espín porque el espectro sería el mismo pero con una doble degeneración. En a) el valor de  $a = 30$  [nm], en b)  $a = 50$  [nm], en c)  $a = 80$  [nm] y en d)  $a = 100$  [nm]. Se puede observar que este sistema es bastante estable y es posible elegir el mismo parámetro variacional para los diferentes valores de  $a$ .

Habiendo encontrado el valor óptimo para el parámetro variacional, podemos calcular el espectro de energías en función de  $a$  (la mitad de la separación entre los pozos). Como se observa en figura 4.6 a medida que aumenta el valor de  $a$ , los valores de energías empiezan a acercarse entre ellos, en particular cuando  $a = 100$  [nm] prácticamente no se distinguen entre ellos en esa escala. Este aspecto se explica claramente si pensamos que cuando se alejan más, la altura entre los dos pozos también aumenta y el sistema se comporta como si se trataran de dos pozos individuales, generando estados localizados y propiciando una degeneración entre los estados. En el panel de la derecha se observa que las primeras cuatro diferencias de energía tienen comportamientos totalmente diferentes a los del resto.

Cuando el valor de  $a$  aumenta, la primer diferencia ( $E_1 - E_0$ , en línea continua negra) disminuye exponencialmente, mientras que la segunda ( $E_2 - E_1$ , en línea entrecortada roja) crece hiperbólicamente, a grandes rasgos. Por lo tanto aumentar el valor de la separación entre los pozos favorecería la identificación de un qubit, es decir, haría que los estados que identificaremos como qubit se separen cada vez más del resto del espectro a medida que aumenta el valor de  $a$ .

Consideraremos  $a = 70$  [nm], una separación razonable, para seguir analizando el sistema. Lo que haremos será ir agregando los demás términos del Hamiltoniano para entender un poco más el sistema y después intentar explayar este comportamiento en sistemas un poco más complicados.



**Figura 4.6:** Los gráficos muestran la energía en función de la mitad entre la separación entre los pozos del potencial cuártico. En el gráfico de la izquierda se observa que a medida que aumenta  $a$ , el gap entre los niveles cada vez es menor. En el gráfico de la derecha se puede ver la diferencia entre energías consecutivas. La línea continua negra se observa la diferencia entre el estado fundamental y el primer estado excitado ( $E_1 - E_0$ ), la línea entrecortada muestra:  $E_2 - E_1$ , en línea punteada:  $E_3 - E_2$  y luego las líneas consiguientes muestran el mismo comportamiento físico y crecen consecutivamente en el valor de sus diferencia de energías.

### 4.3.2.3. Sistema con campos magnéticos

Consideraremos en esta sección cual es el efecto de un campo magnético constante  $B_0$ . La única contribución de este campo es mediante la frecuencia de sincrotrón  $\omega_c$  que se encuentra en el término de espín asociado a  $\sigma_z$ . Este término elimina la degeneración del sistema de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\hbar\omega_c}^{\hbar\omega_0} &= \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} - \xi\sigma_z \\
 &= \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\xi & 0 \\ 0 & \xi \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} E_0 - \xi & 0 \\ 0 & E_0 + \xi \end{pmatrix}, \tag{4.26}
 \end{aligned}$$

donde  $\xi = \frac{\hbar\omega_c}{2\alpha(\hbar\omega_0)}$  y  $E_0$  es el valor de las autoenergías del sistema sin campo ni asimetría incluidos.

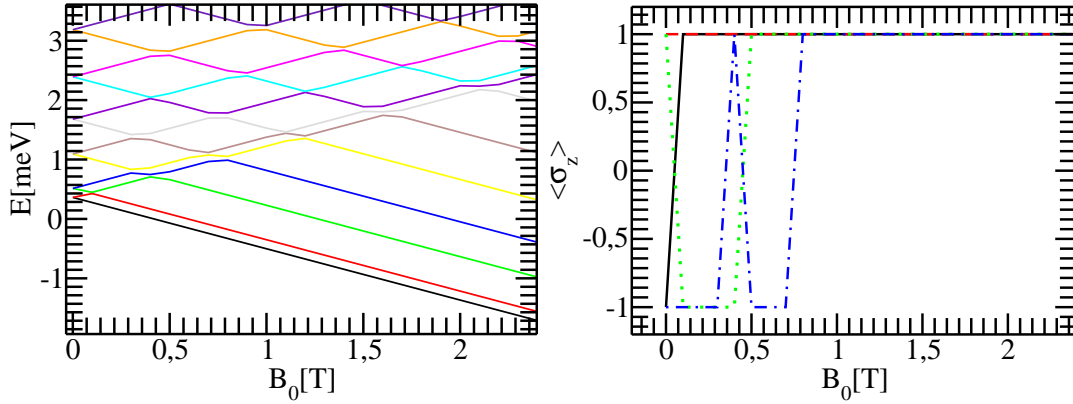
El espectro resultante se puede ver en el panel izquierdo de la figura 4.7, para campo nulo los autovalores son degenerados. Si el campo magnético es no-nulo, los autovalores son funciones lineales del campo, excepto cerca de los cruces evitados o avoided crossings. Comparando los paneles izquierdo y derecho se puede ver que cada cruce evitado en el espectro (panel izquierdo) representa un cambio en la orientación del espín, que es autoestado de  $\sigma_z$  (panel derecho). A campo nulo el estado fundamental y el segundo excitado tienen componente de espín en la dirección  $z$  con autovalor  $-1$ ; y el primer estado excitado y el tercer autovalor  $-1$ . A partir de un determinado valor de  $B_0$ , las energías dependen del campo de manera lineal y los estados pasan a ser autoestados de  $\sigma_z$  con autovalor 1 (al menos los cuatro primeros). Queda claro que como la contribución del campo magnético es sólo en el término de espín, el valor de expectación de  $z/a$  es en promedio cero, ya que el sistema es simétrico.

Un valor razonable que podemos considerar es  $B_0 = 0,5 [T]$  (valor para el cual el modelo de Tokura da un factor de calidad muy bueno). Para este valor los dos primeros estados son auto-estados de  $\sigma_z$  con autovalor 1. Ahora queremos agregar el término del gradiente de campo magnético  $b_{sl}$ , que genera un campo de la forma  $(b_{sl}z, 0, 0)$ . Este término le agrega al Hamiltoniano dos términos. El primero está asociado a  $z'^4$ , tiene una contribución muy pequeña y el segundo es proporcional a  $z'$  y a  $\sigma_x$ . Si analizamos el sistema como una perturbación podemos obtener información relevante a cerca del orden de contribución del segundo término. Los elementos de matriz no-nulos son de la forma

$$\left\langle m, \uparrow \left| -\frac{\hbar\omega_{sl}}{2\alpha(\hbar\omega_0)} z' \right| n, \downarrow \right\rangle, \tag{4.27}$$

además si el potencial es simétrico respecto al eje  $z$ , las funciones son pares o impares, y entonces:

$$\langle m | z' | n \rangle = 0, \text{ si } m = n. \tag{4.28}$$



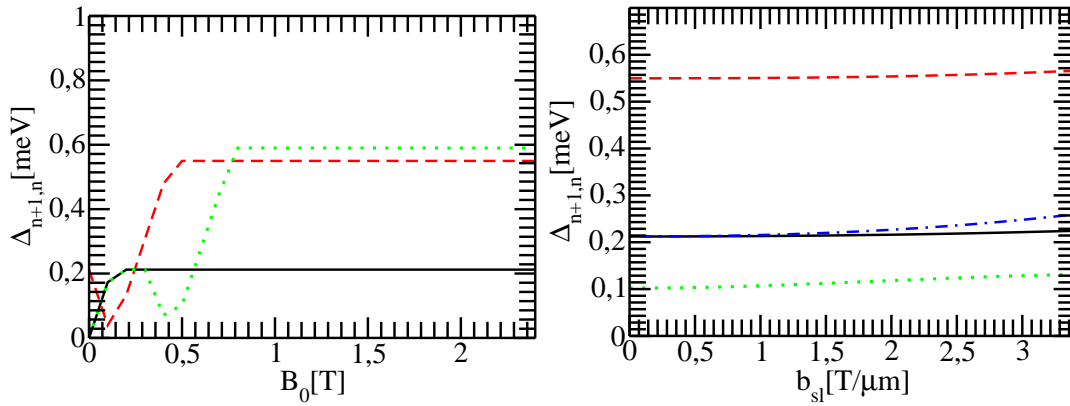
**Figura 4.7:** El gráfico de la izquierda muestra energía en función del campo magnético constante  $B_0$  [T]. Se comprueba la eliminación de la degeneración de las energías y con crecimiento lineal con el valor del campo. Otra característica importante son los cruces evitados de las energías, cada una de ellas se corresponde con un cambio de la orientación de espín de cada auto-valor como se puede comprobar en el gráfico de la derecha que muestra el valor de expectación de  $\sigma_z$  en función de  $B_0$ . En este gráfico se muestra el valor de expectación de los 4 primeros niveles de energía del sistema. En línea negra sólida se muestra el estado fundamental, en rojo entrecortado el primer estado excitado, en verde punteado el segundo estado excitado y en azul de punto y línea es el correspondiente al tercer estado excitado.

De esta manera sabemos que la corrección a la energía de este término es de segundo orden, siempre y cuando el valor de  $b_{sl}$  sea lo suficientemente chico (para usar teoría de perturbaciones). Cuando el potencial es simétrico no se logra apreciar un desdoblamiento de energía (en doble precisión), la energía crece mientras aumenta el valor de  $b_{sl}$ . La figura (D.1), muestra cómo cambia el espectro cuando el potencial es asimétrico. Cuando se agrega un término de asimetría al potencial,  $\gamma = 0,1$ , se aprecia las degeneraciones de los primeros dos pares de energías (en la escala en la que se muestra el gráfico).

Tomando como referencia los valores que propone Tokura, elegimos  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ . El espectro de energías en función de  $B_0$  para  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$  casi no presenta diferencias respecto al panel izquierdo de la figura 4.7, ya que la contribución de  $b_{sl}$  es muy chica, lo mismo ocurre cuando agregamos el término de asimetría  $\gamma$ . A pesar que se cambien los valores de  $B_0$  y  $b_{sl}$  existen propiedades del espectro que nos interesan que se preservan para poder realizar control en el qubit. Por ejemplo la separación de los estados más bajos de energía respecto al resto del espectro (para determinar el qubit), que los estados sean autoestados de  $\sigma_x$  y que tengan diferente autovalor de espín cuando están en un pozo o en el otro (queremos que la función de onda del estado fundamental se encuentre centrada en un pozo y la del estado excitado en el otro pozo y que uno tenga autovalor 1 y el otro  $-1$  respecto a  $\sigma_x$ ).

La figura 4.8 muestra las diferencias entre las energías consecutivas, donde  $\Delta_{n+1,n} = E_{n+1} - E_n$ , en el panel izquierdo respecto a  $B_0$ , para  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$  y en panel derecho

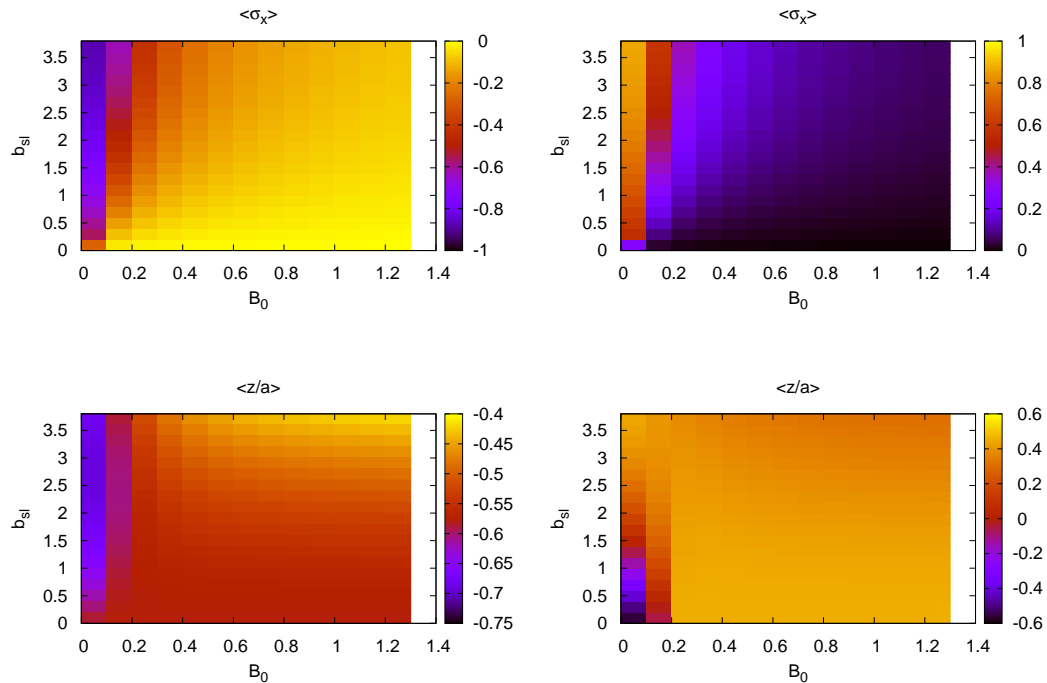
respecto a  $b_{sl}$  para  $B_0 = 0,5 [T]$ , ambos paneles tienen una asimetría de  $\gamma = 0,1$ . En el gráfico del panel izquierdo se ve que a partir de  $B_0 \approx 0,2 [T]$  la separación entre la energía del primer estado excitado y el fundamental se vuelve constante, en alrededor de  $0,2 [meV]$ , Lo mismo sucede para  $\Delta_{2,1}$  a partir de  $B_0 \approx 0,5 [T]$  (alrededor de  $0,57 [meV]$ ) y para  $\Delta_{3,2}$  a partir de  $B_0 \approx 0,7 [T]$  (alrededor de  $0,6 [meV]$ ), es decir que a partir de un campo determinado no se va a poder separar de manera significativa, al estado fundamental del primer excitado ni los dos primeros niveles de energía respecto del resto del espectro. Notemos que cambiar el valor de  $b_{sl}$  modifica muy poco al espectro.



**Figura 4.8:** .En el panel izquierdo se muestran las primeras tres diferencias entre las energías consecutivas ( $\Delta_{n+1,n} = E_{n+1} - E_n$ ) con respecto  $B_0$ , para  $b_{sl} = 1,16 T/\mu m$  y  $\gamma = 0,1$ . Mientras que en el derecho  $\Delta_{n+1,n}$  se muestran las primeras cuatro respecto a  $b_{sl}$ , para  $B_0 = 0,5 T$  y  $\gamma = 0,1$ . En línea negra continua se muestra  $\Delta_{1,0}$ , en roja entrecortada  $\Delta_{2,1}$ , en verde punteada  $\Delta_{3,2}$  y en azul de punto y línea  $\Delta_{4,3}$ .

Además de la separación entre los dos primeros estados del resto del espectro, necesitamos que los dos primeros sean idealmente autoestados de  $\sigma_x$ , uno con espín *up* y el otro con *down* y que se encuentren en pozos distintos. El término de asimetría hace que exista una preferencia con respecto a en qué pozo se va a encontrar localizado el estado fundamental. Veamos cómo se modifican los valores de expectativa de  $\sigma_z$ ,  $\sigma_x$  y  $z/a$  cuando varían  $B_0$  y  $b_{sl}$ . Ahora el valor de expectativa de  $\sigma_x$  y de  $z/a$  no van a ser necesariamente nulos, porque el término de asimetría introduce al Hamiltoniano un término proporcional a  $z$  (sin componente de espín) haciendo posible encontrar funciones pares e impares como aproximación a las soluciones del problema.





**Figura 4.9:** Estos gráficos muestran los valores de expectación en diagrama de colores, en función del campo gradiente  $b_{sl}$  en el eje  $y$  y del campo magnético constante  $B_0$  en el eje  $x$ . En los gráficos de la izquierda se muestran los valores de expectación asociados al estado fundamental y en los de la derecha los del primer estado excitado. Los paneles superiores muestran  $\langle \sigma_x \rangle$  y los inferiores  $\langle z/a \rangle$ . Se puede ver que los estados que buscamos (auto-estados de  $\sigma_x$  y distinto autovalor y en distintos pozos) se obtendrán para valores chicos de  $B_0$ , y que aumentando el valor de  $b_{sl}$  nos acercamos cada vez más a ese objetivo. Con respecto a los valores de expectación de  $z/a$  vemos que la función de onda del estado fundamental siempre está en el pozo izquierdo para todos los valores de  $B_0$  y el del primer excitado en el izquierdo para valores chicos de  $B_0$ , mientras que cuando aumentan  $b_{sl}$  y  $B_0$  se encuentra en el pozo derecho.

En la figura 4.9 se muestra como es el comportamiento de los valores de expectación de  $\sigma_x$  y  $z/a$  para el estado fundamental y el primer estado excitado (el valor de expectación de  $\sigma_z$  se encuentra en el apéndice D). Del panel izquierdo superior notemos cómo el estado fundamental es autoestado de  $\sigma_x$  de autovalor  $-1$  para valores chicos de  $B_0$  (entre  $[0 : 0,1][T]$ ) con valores de  $b_{sl}$  entre  $[0,25 : 3,5][T/\mu m]$  y se espera, haciendo una proyección sobre el gráfico, que mientras aumenta el valor de  $B_0$ , tiene que aumentar  $b_{sl}$  para que siga siendo autoestado. Para el valor de expectación de  $\sigma_x$  del primer estado excitado se observa un comportamiento similar pero con autovalor  $-1$ . Cuando se aumenta el valor de  $B_0$  los estados dejan de ser autoestados de  $\sigma_x$ , se van convirtiendo en auto-estados de  $\sigma_z$ , como es de esperarse (ver apéndice D figura D.2).

Valor de expectación	$E_0$	$E_1$
$\langle \sigma_x \rangle$	-0,08	0,06
$\langle \sigma_z \rangle$	0,99	0,99
$\langle z/a \rangle$	-0,56	0,44

**Cuadro 4.1:** Esta tabla muestra los valores de expectación obtenidos para el sistema con los siguientes parámetros:  $B_0 = 0,5 [T]$ ,  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ ,  $\alpha = 0,067$  y  $a = 70 [nm]$ .

Si observamos los paneles inferiores encontramos que el estado fundamental se encuentra en el pozo izquierdo para los rangos de parámetros que mostramos, mientras que el primer estado excitado se encuentra en el pozo derecho excepto para valores chicos de  $B_0$  y de  $b_{sl}$ . Si tenemos valores chicos de  $B_0$  y chicos de  $b_{sl}$  los estados fundamental y primer excitado son autoestados de  $\sigma_z$  con autovalores 1 y  $-1$  respectivamente y se encuentran en pozo izquierdo, cuando aumentamos el valor de  $b_{sl}$ , los estados se convierten en autoestados de  $\sigma_x$  y el primer estado excitado se pasa al pozo derecho. Para valores grandes de  $B_0$  el valor de expectación de  $\sigma_x$  tiende a cero para ambos estados y se convierten en auto-estados de  $\sigma_z$  con autovalor 1, pero se encuentran en diferentes pozos.

De esta manera podemos concluir que a pesar de que  $b_{sl}$  no contribuye de manera significativa en el aspecto del espectro del sistema, si lo hace cuando se trata que los estados sean autoestados de  $\sigma_x$  y se encuentren en diferentes pozos del potencial.

Para observar explícitamente los valores de expectación con los parámetros que vamos a utilizar en el modelo bidimensional podemos ver las figuras D.3 y D.4. Para los valores con los que venimos tratando hasta el momento ( $B_0 = 0,5 [T]$ ,  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$  y  $a = 70 [nm]$ ), es decir  $\hbar\omega_0 > \hbar\omega_c > \hbar\omega_a > \hbar\omega_{sl}$ , encontramos los valores de expectación aproximados que se muestran en la tabla 4.1. Con los valores que elegidos, los estados no son autoestados de  $\sigma_x$ , sino que lo son de  $\sigma_z$  y no se encuentran centrados en los pozos sino en  $a/2$  o  $-a/2$ .

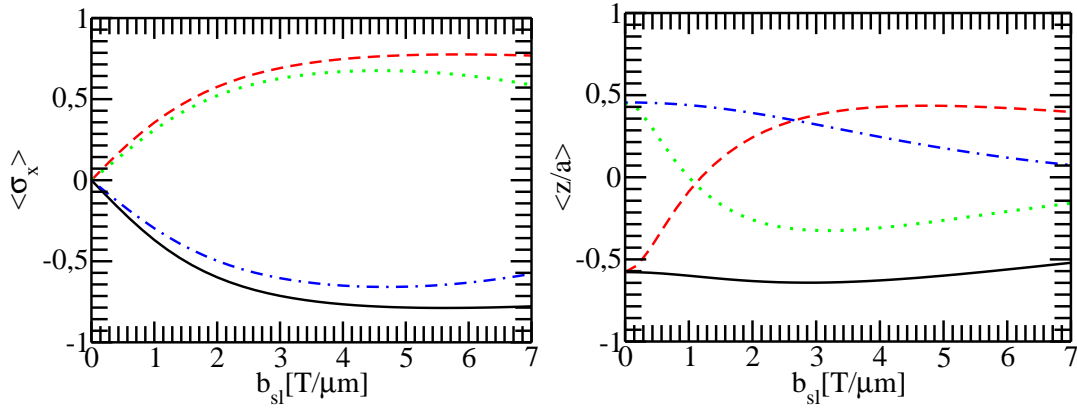
A medida que aumenta el valor de  $b_{sl}$ , aumenta la probabilidad de que los estados fundamental y primer excitado sean autoestados de  $\sigma_x$ , sin embargo se encuentra que el máximo valor que conseguimos es  $\langle \sigma_x \rangle \approx -0,23$  para el estado fundamental (en un rango de  $b_{sl}$  entre  $[0-7][T/\mu m]$ ).

También sabemos que si disminuimos el valor del campo magnético  $B_0$ , mejoran las condiciones para que los estados sean autoestados de  $\sigma_x$ . Considerando  $B_0 = 0,1 [T]$ , obtenemos la figura 4.10. Eligiendo  $b_{sl} = 5 [T/\mu m]$ , es decir,  $\hbar\omega_0 > \hbar\omega_{sl} > \hbar\omega_a > \hbar\omega_c$ , se encontraron los valores de expectación ya mencionados, los resultados aproximados se encuentran en la tabla 4.2.

Los estados son prácticamente autoestados de  $\sigma_x$ , Pero el valor de expectación de  $z/a$  sigue dando aproximadamente  $-1/2$  y  $1/2$  para el estado fundamental y primer excitado respectivamente. A pesar de lograr obtener autoestados de  $\sigma_x$ , no logramos que los estados estén estrictamente centrados en los pozos.

Valor de expectación	$E_0$	$E_1$
$\langle \sigma_x \rangle$	-0,78	0,77
$\langle \sigma_z \rangle$	0,51	0,04
$\langle z/a \rangle$	-0,59	0,43

**Cuadro 4.2:** Esta tabla muestra los valores de expectación obtenidos para el sistema con los siguientes parámetros:  $B_0 = 0,1 [T]$ ,  $b_{sl} = 5 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ ,  $\alpha = 0,067$  y  $a = 70 [nm]$ .



**Figura 4.10:** Valores de expectación en función de  $b_{sl}$  para  $B_0 = 0,1 [T]$  fijo. Se ve como en esta configuración de parámetros los estados son prácticamente autoestados de  $\sigma_x$ , y si elegimos el valor de  $b_{sl}$  apropiado, el estado fundamental y primer excitado se encuentran en pozos separados pero no centrados en ellos.

### 4.3.3. Modelo bidimensional

#### 4.3.3.1. Análisis del sistema

La estabilización de este sistema es más compleja que en el caso del sistema unidimensional. En primer lugar porque se le agrega un parámetro variacional no lineal asociado a la coordenada  $y$ ,  $\nu$ . Cambiar cualquier parámetro del sistema requiere un análisis para saber si se tiene que estabilizar o no.

No analizamos el sistema a campo  $B_0$  nulo porque en ese caso no encontraremos un valor de estabilización para  $\nu$  debido a que el electrón es una partícula libre en la dirección  $y$ . El parámetro que más afecta la estabilización es la separación entre los mínimos del potencial cuártico, por esta razón restringimos el análisis a sólo dos valores razonables del parámetro,  $a = 70 [nm]$  y  $a = 100 [nm]$ .

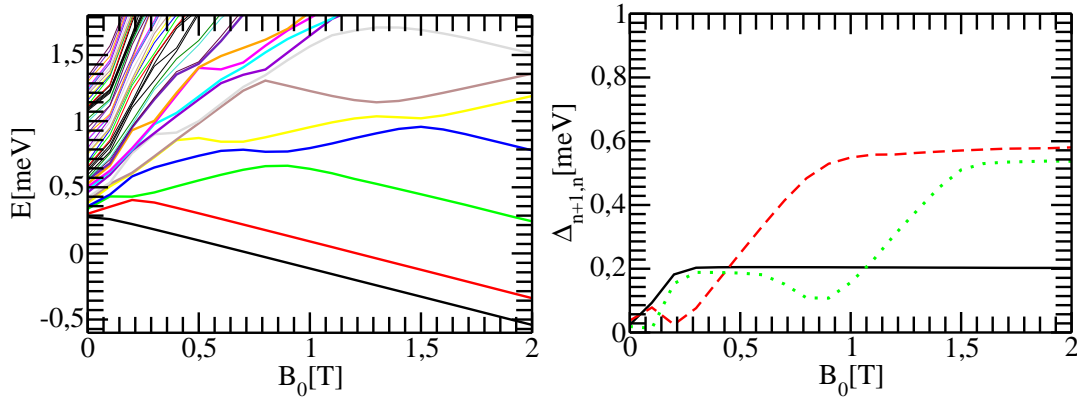
Empecemos viendo como cambia el panorama si tenemos los mismos parámetros que elegimos para el modelo unidimensional ahora que le agregamos un grado de libertad. En la figura (4.11) se puede ver como cambia la energía cuando se varía el valor de  $B_0 [T]$ ,

$b_{sl} [T/\mu m]$	$\langle \sigma_x \rangle$		$\langle \sigma_z \rangle$		$\langle z/a \rangle$	
	$E_0$	$E_1$	$E_0$	$E_1$	$E_0$	$E_1$
1,16	-0,12	0,11	0,99	0,99	-0,80	0,74
3,00	-0,32	0,30	0,93	0,93	-0,82	0,75
5,00	-0,50	0,46	0,85	0,85	-0,84	0,77

**Cuadro 4.3:** Esta tabla muestra los valores de expectación obtenidos para el sistema bidimensional con los siguientes parámetros:  $B_0 = 0,5 [T]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ ,  $\alpha = 0,067$  y  $a = 70 [nm]$ .

para  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $a = 70 [nm]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $\omega_0 = 1 [meV]$  en una base con 18 funciones de prueba en  $z$  y 18 en  $y$  (como consideramos espín y el Hamiltoniano es hermitiano la matriz a diagonalizar es de  $1296 \times 1296$ ).

Observamos que para valores chicos de  $B_0$  se acumulan una gran cantidad de estados, lo cual es razonable porque la partícula está poco ligada en la dirección  $y$ . El espectro presenta una estructura de cruces evitados similar a la del sistema unidimensional. Con respecto a las diferencias entre las energías consecutivas, que se muestran en el panel derecho, para  $B_0$  suficientemente grande las diferencias alcanzan un valor constante. Notemos que a pesar de agregar una dimensión extra y considerar los términos espaciales asociados a los campos magnéticos, los valores constantes a los que llegan  $\Delta_{n+1,n}$ , son básicamente aproximadamente los mismos que para el caso unidimensional.

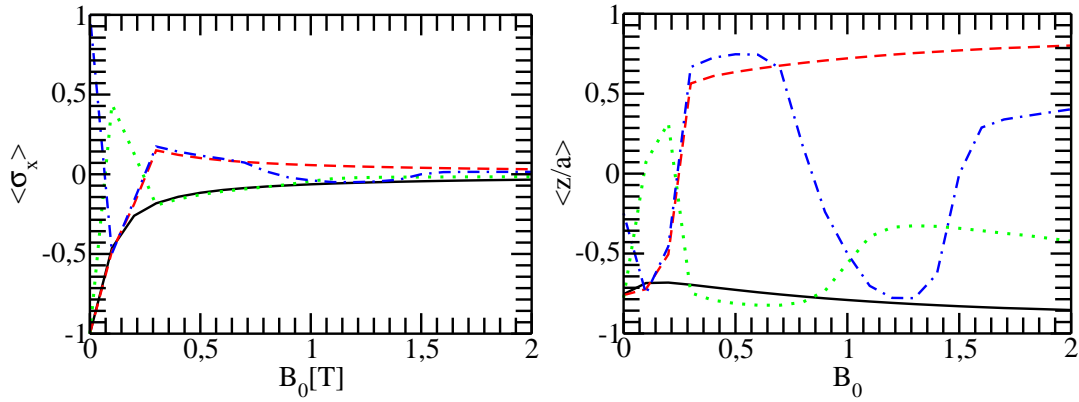


**Figura 4.11:** Energía en  $[meV]$  en función del campo constante  $B_0 [T]$  a  $b_{sl} = 1,16 [meV]$  fijo. En la izquierda se muestra el espectro del sistema mientras que a la derecha se muestran los valores de energías consecutivas. En línea continua negra se encuentra  $\Delta_{1,0}$ , energía del primer estado excitado menos la energía del estado fundamental  $E_0$ , en línea roja entrecortada  $\Delta_{2,1}$  y en verde punteada  $\Delta_{3,2}$ .

Por lo tanto, esperamos un comportamiento similar al que se mostraba en el modelo unidimensional. Calculamos los valores de expectación para los parámetros antes men-

cionados, en la tabla (4.3) se muestran los valores de expectación para tres diferentes valores de  $b_{sl}$ . Queda claro que incluso para el mayor valor de  $b_{sl}$ , los estados no son autoestados de  $\sigma_x$ , pero si se encuentran en pozos distintos.

Para  $B_0 \lesssim 0,3 [T]$  los dos primeros estados tienen valores de expectación de  $\sigma_x$  negativos y pasan a encontrarse en el pozo de la izquierda, como se observa en la figura 4.12. Así que disminuir el valor de  $B_0$  no nos va a ayudar a obtener el estado inicial buscado. Notemos que en el caso de dos dimensiones los cruces evitados mostrados en el espectro están directamente relacionados con el comportamiento de los valores de expectación de  $\sigma_x$  y de  $z/a$ , ya que cada cruce causa un cambio en la orientación de espín en un caso o de ubicación en un pozo en el otro caso.

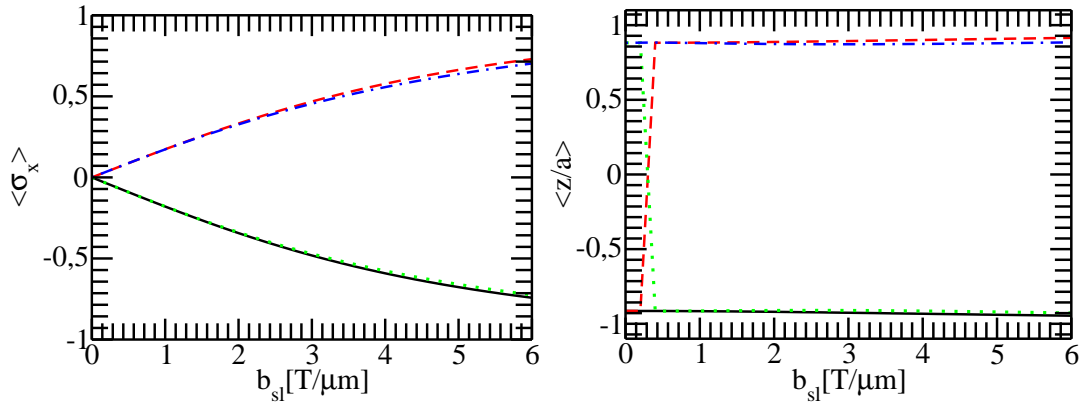


**Figura 4.12:** Se muestran los valores de expectación en función de  $B_0 [T]$  para  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ . En el panel izquierdo se encuentra el valor de expectación de  $\sigma_x$  y en el derecho el de  $z/a$ . En línea negra continua se muestra el estado fundamental, en roja entrecortada el primer estado excitado, en verde punteada el segundo excitado y en azul de punto y línea el tercer excitado.

Con el objetivo de encontrar estados que sean autoestados de  $\sigma_x$ , e incentivados porque ahora los estados si se encuentran en pozos diferentes a partir de valores de  $B_0$  determinados, vamos a considerar una separación más grande entre los pozos. Se considera  $a = 100 [nm]$ , y se obtiene la la figura 4.13, se muestra que el crecimiento de  $\langle \sigma_z \rangle$  en función de  $b_{sl}$  es mayor que el que ocurría con  $a = 70 [nm]$ . También se observa que en este caso cada uno de los estados se encuentra centrado en los mínimos de los pozos. Con lo encontramos un mejor escenario para el estado inicial que buscamos. Elegimos  $b_{sl} = 6 [T/\mu m]$ . Es importante notar que para  $b_{sl} \gtrsim 0,5 [T/\mu m]$  los estados fundamental y segundo excitado se encuentran en el pozo izquierdo, y el primer excitado y el tercero, en el pozo de la derecha. El valor de expectación de  $\sigma_x$  es una función monótonamente creciente en módulo de  $b_{sl}$ . Los valores de los parámetros de energía satisfacen:  $\hbar\omega_0 > \hbar\omega_c > \hbar\omega_a > \hbar\omega_{sl}$ .

Valor de expectación	$E_0$	$E_1$
$\langle \sigma_x \rangle$	-0,75	0,74
$\langle \sigma_z \rangle$	0,65	0,66
$\langle z/a \rangle$	-0,95	0,91

**Cuadro 4.4:** Esta tabla muestra los valores de expectación obtenidos para el sistema con los siguientes parámetros:  $B_0 = 0,5 [T]$ ,  $b_{sl} = 6 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ ,  $\alpha = 0,067$  y  $a = 100 [nm]$ , Los parámetros variacionales no lineales fueron  $\eta = 4$  y  $\nu = 3,5$



**Figura 4.13:** Se muestran los valores de expectación en función de  $b_{sl}$  y  $a = 100 [nm]$ . En el panel izquierdo se encuentra el valor de expectación de  $\sigma_x$  y en el derecho el de  $z/a$ . Para  $b_{sl}$  mayores a  $0,5 [T/\mu m]$  ya se sabe que los estados fundamental y primer excitado se encuentran en pozos diferentes.

#### 4.3.4. Modelo bidimensional confinado en $y$

En esta sub-sección vamos a analizar el comportamiento de un sistema bidimensional que cuenta con campos magnéticos, los mismos que los de la sección anterior, pero que está fuertemente limitado en el eje  $y$ . Lo que vamos a hacer es confinar el eje  $y$  al agregar un oscilador armónico en esa dirección con una frecuencia a la que llamaremos  $\omega_y$ . Este confinamiento puede ser realizado, desde el punto de vista físico, deformando el punto cuántico, el cual de por sí ya presenta deformaciones. Se puede, por ejemplo, agregar un par de electrodos en la dirección  $y$ .

#### 4.3.4.1. Hamiltoniano

Este sistema es modelado por el siguiente Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{2d}^{\hbar\omega_0} = & -\frac{\hbar\omega_a}{2\alpha\hbar\omega_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right] + \frac{\alpha\hbar\omega_0}{8\hbar\omega_a} (z'^2 - 1)^2 - \gamma z' - \\
& - \frac{i\hbar\omega_{sl}}{2\alpha\hbar\omega_0} z'^2 \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{8\alpha(\hbar\omega_a)(\hbar\omega_0)} y'^2 + \frac{(\hbar\omega_{sl})^2}{8\alpha(\hbar\omega_a)(\hbar\omega_0)} z'^4 - \\
& - \frac{\hbar\omega_{sl}}{2\alpha\hbar\omega_0} z' \sigma_x - \frac{\hbar\omega_c}{2\alpha\hbar\omega_0} \sigma_z + \frac{\alpha(\hbar\omega_y)^2}{2(\hbar\omega_0)(\hbar\omega_a)} y'^2, \tag{4.29}
\end{aligned}$$

donde el último término corresponde al confinamiento agregado, cuya energía característica está dada por  $\hbar\omega_y$

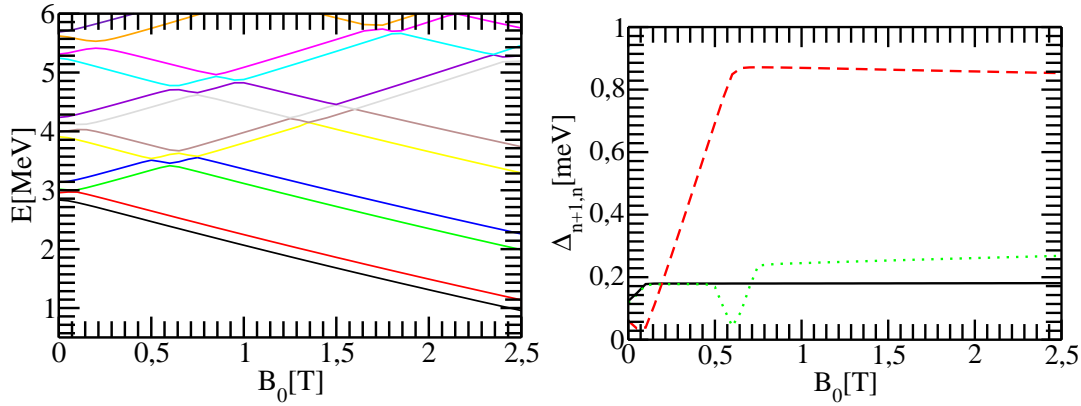
#### 4.3.4.2. Análisis del sistema

Queremos ver cómo varían los resultados cuando modificamos el valor de  $\omega_y$ . Vamos a analizar tres valores de confinamiento  $\omega_y = 1, 5$  y  $10$  [meV], mientras se varía  $B_0$ . Todos se estabilizan con  $\eta = 4$ , los dos primeros con  $\nu = 5$  y el último con  $\nu = 6$  (aclaramos que hay un rango en el que se estabilizan respecto a  $\nu$ , por ejemplo el primero se estabiliza en  $\nu = [2 : 6]$  cuando  $B_0 = [0 : 2,5]$ ). Notemos que en este caso se puede estabilizar cuando el campo externo  $B_0$  es nulo ya que en la dirección  $y$  la partícula ya no está deslocalizada sino que por el contrario tiene un confinamiento generado por el potencial armónico.

Se puede ver en la figura D.8 que cuando aumenta el valor de  $\omega_y$  aumenta el valor de las energías, como se espera. El espectro se parece mucho más al del modelo unidimensional porque en el eje  $y$  el electrón está completamente confinado. La diferencia entre las primeras cuatro energías sucesivas se estabilizan en los siguientes valores  $0,21$  [meV],  $0,86$  [meV] y  $0,26$  [meV].

Este sistema tiene la ventaja que la estabilización del sistema respecto a  $B_0$  se amplía cuando aumenta  $\omega_y$ , como así también la de  $b_{sl}$ .

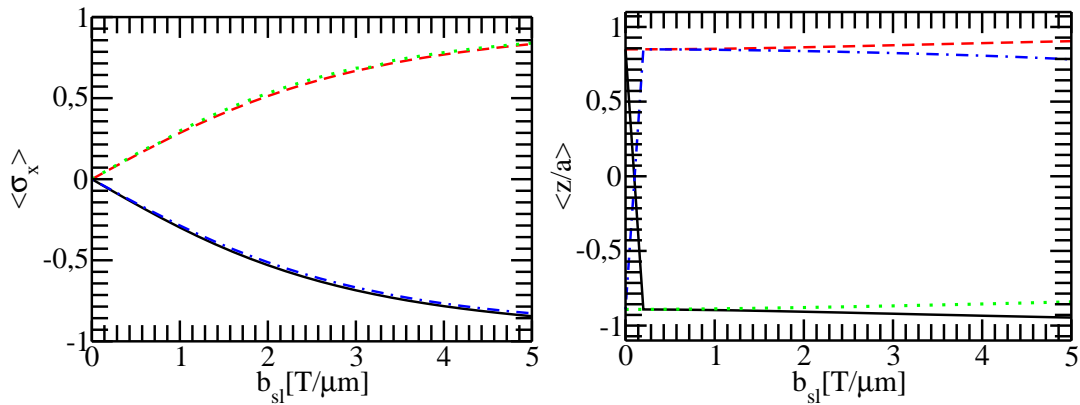
Elegimos dos parámetros que nos parecieron óptimos para este sistema:  $\omega_y = 1$  [meV] y  $B_0 = 0,3$  [T] y  $\omega_y = 5$  [meV] con  $B_0 = 0,2$  [T], ambos con  $b_{sl} = 5$  [T/ $\mu$ m]. No se disminuyó el valor de  $B_0$  asociado a  $\omega_y = 10$  [meV] porque para ese valor de confinamiento los valores de expectación se vuelven inestables, por ejemplo se presentan cruces en el valor de expectación de  $z/a$  que no están relacionados con los cruces evitados en el espectro (como veníamos viendo), está claro que para solucionar el problema hay que aumentar el tamaño de la base. Sin embargo para esos parámetros los primeros dos estados no están muy separados del resto del espectro.



**Figura 4.14:** En el panel izquierdo se muestra la energía en función del campo magnético  $B_0$  para  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $a = 70 [nm]$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$  y  $\omega_y = 5 [meV]$ . En el panel de la derecha se muestra las diferencias entre energías consecutivas, en línea negra continua se muestra  $\Delta_{1,0}$ , en línea entrecortada roja  $\Delta_{2,1}$  y en verde punteada  $\Delta_{3,2}$ . Se puede ver que el efecto del confinamiento en  $y$  disminuye la acumulación de estados para valores pequeños de  $B_0$

$\omega_y [meV]$	$B_0 [T]$	$\langle \sigma_x \rangle$		$\langle \sigma_z \rangle$		$\langle z/a \rangle$	
		$E_0$	$E_1$	$E_0$	$E_1$	$E_0$	$E_1$
1	0,3	-0,69	0,67	0,70	0,69	-0,89	0,84
5	0,2	-0,84	0,83	0,53	0,54	-0,95	0,90

**Cuadro 4.5:** Esta tabla muestra los valores de expectación obtenidos para el sistema bidimensional con dos valores de confinamiento  $\omega_y = 1 [meV]$  y  $\omega_y = 5 [meV]$ , el primero con  $B_0 = 0,3 [T]$  y el segundo con  $B_0 = 0,2 [T]$ . Ambos con  $\gamma = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ ,  $\alpha = 0,067$  y  $a = 70 [nm]$  y  $b_{sl} = 5 [T/\mu m]$ .



**Figura 4.15:** Se muestran los valores de expectación en función de  $b_{sl}$ . Los gráficos de la izquierda se realizaron con  $B_0 = 0,2 [T]$  y  $\omega_y = 5 [meV]$  y los de la derecha a  $B_0 = 0,3 [T]$  y  $\omega_y = 1 [meV]$ .



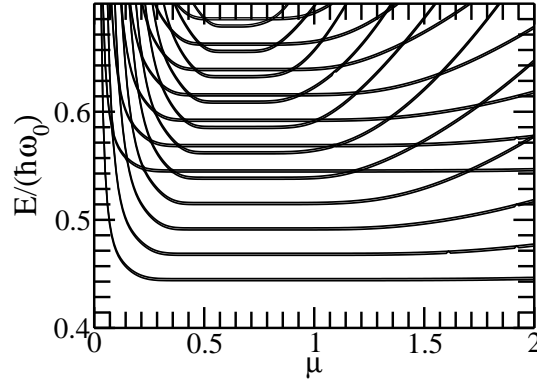
La figura 4.15 muestra los valores de expectación para un confinamiento de  $\omega_y = 5 [meV]$ , cuyos valores consideramos óptimos para el nivel inicial y al cuál vamos a realizarle la dinámica. Tanto para estos parámetros como para  $\omega_y = 1 [meV]$  a  $b_{sl} = 5 [T/\mu m]$  se muestran en la tabla (4.5)

## 4.4. Modelo bidimensional óptimo

A modo ilustrativo vamos a mostrar el caso de un sistema que da excelentes valores para el estado inicial de la dinámica para realizar el control pero que tiene un valor de gradiente de campo que no es el mejor a la hora de realizar experimentos, el cual es  $b_{sl} \approx 66 [T/\mu m]$ . Los valores aceptables de gradientes de campo magnético en este ámbito son menores a  $2 [T/\mu m]$  [33].

Se realiza en un escenario donde las energías están ordenadas de la siguiente manera  $\hbar\omega_0 > \hbar\omega_a > \hbar\omega_c \sim \hbar\omega_{sl}$ , en particular  $b_{sl}a = 2 [T]$ ,  $\hbar\omega_0 = 30 [meV]$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$

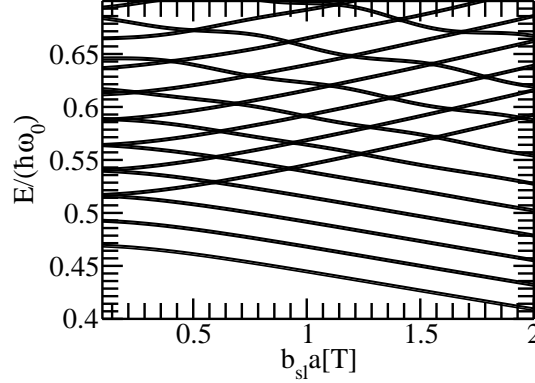
En la figura 4.16 se muestra el espectro calculado con el método de Ritz como función del parámetro variacional no lineal  $\mu$ , para un punto cuántico de  $\hbar\omega_0 = 30 [meV]$ ,  $a = 30 [nm]$ ,  $\gamma = -10^{-3}$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$ ,  $b_{sl}a = 2 [T]$ , y una base simétrica con  $L = 20$  y  $N = 20$ ,  $\eta = 4$ . El método es inestable si el mínimo del estado fundamental depende del parámetro variacional, en la figura se observa que este no es el caso. El valor del parámetro variacional no lineal  $\eta$ , asociado a  $z$ , se obtiene analizando la reducción del sistema al caso unidimensional. De la figura 4.16 está claro que el método es capaz de proveer más de



**Figura 4.16:** Espectro de energía obtenido con el método de Ritz en función del parámetro variacional no lineal  $\mu$  asociado a la coordenada  $y$ . Los autovalores son estables para un intervalo, cuyo ancho es más grande que el más pequeño de los autovalores. El actual tamaño del intervalo se puede extender mediante el incremento de la cantidad de funciones que componen la base.

treinta autovalores estabilizados para  $\mu \in (0.5, 0.75)$ , en particular para  $\mu \in (0.5, 1)$  el estado fundamental de energía es constante con un error relativo menor que  $2 \times 10^{-5}$ . Por supuesto que si los parámetros del sistema se cambian lo suficiente es necesario analizar el espectro nuevamente.

#### 4.4.0.3. Un buen punto cuántico

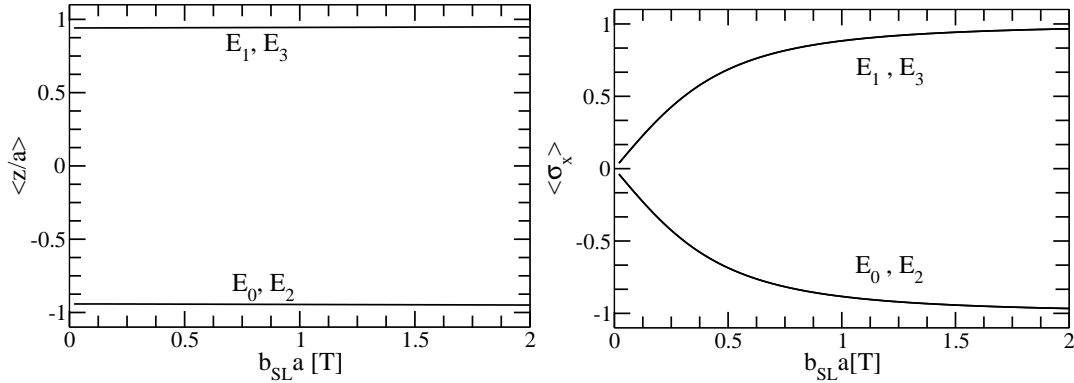


**Figura 4.17:** Espectro aproximado vs el campo magnético  $b_{sl}a$ . El espectro está compuesto por pares de estado casi degenerados, por eso en la escala en la que se muestra la figura, cada línea está formada por dos niveles de energía muy cercanos. Para los parámetros usados, ver el texto, los tres primeros pares de niveles no muestran cruces evitados.

En la figura 4.17 se puede ver el comportamiento del espectro variacional como función del campo  $b_{sl}a$ . Los otros parámetros del sistema utilizados fueron  $a = 30 [nm]$ ,  $\hbar\omega_0 = 30 [meV]$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$ ,  $\gamma = -10^{-3}$ . Todos los autovalores son pares casi degenerados, claramente, ellos se corresponden con el régimen de “buena separación entre los pozos”. es importante notar que tanto el estado fundamental como el primer estado excitado dependen del campo magnético aplicado, mientras que  $\Delta$  permanece básicamente constante con un valor de  $2 \times 10^{-3} \hbar\omega_0$ . Entonces el gap entre estos estados que pertenecen al dominio de los  $[\mu eV]$  se corresponde con una región en donde el ruido que afecta los grados de libertad del espín es suficientemente bajo para permitir manipulación coherente del estado [33].

En la figura 4.18 se puede observar los valores de expectación de los operadores ( $z/a$  en el panel izquierdo y  $\sigma_x$  en el panel derecho) como función del campo magnético  $b_{sl}a$  para los primeros cuatro autoestados.

La figura 4.18a) muestra que cada uno de los estado se encuentra localizado en uno de los pozos del potencial. El primero se encuentra en el pozo de la izquierda, el segundo en el de la derecha, el tercero en el de izquierda y por último el cuarto en el de la derecha nuevamente. Mientras que con el mismo argumento podemos inferir que el comportamiento observado en el espectro, los autovalores son funciones monótonas del campo magnético, a menos que los correspondientes autoestados “salten” del pozo del potencial al otro, como se puede observar a partir del quinto estado excitado en la figura 4.17. También se observa que para este conjunto de parámetros, los estados se encuentran localizados muy cerca del mínimo valor del potencial  $|\langle z \rangle| \approx a$ . Como se verá más adelante, esto no es necesariamente así para otras regiones del espacio de parámetros.



**Figura 4.18:** Los valores de expectación de los operadores ( $z/a$  (panel izquierdo)) y  $\sigma_x$  (panel derecho)) como función del campo magnético  $b_{sl}a$  para los primeros cuatro autoestados. En cada gráfico, los rótulos  $E_0, E_1, E_2$  y  $E_4$  corresponden a los valores obtenidos para el estado fundamental, primer, segundo y tercer estados excitados, respectivamente. Está claro que en este régimen, los autoestados están fuertemente localizados alrededor del centro de los pozos del potencial, el estado fundamental está localizado en el pozo de la izquierda y el primer estado excitado, en el de la derecha. Los estados se acercan cada vez más a ser autoestados de  $\sigma_x$  mientras aumenta el valor del campo magnético.

Valor de expectación	$E_0$	$E_1$
$\langle \sigma_x \rangle$	-0,98	0,96
$\langle z/a \rangle$	-0,95	0,94

**Cuadro 4.6:** Esta tabla muestra los valores de expectación obtenidos para el sistema con los siguientes parámetros:  $B_0 = 0,5$  [T],  $b_{sl}a = 2$  [T],  $\gamma = -0,001$ ,  $\hbar\omega_0 = 30$  [meV],  $\alpha = 0,048$  y  $a = 30$  [nm], Los parámetros variacionales no lineales fueron  $\eta = 4$  y  $\nu = 0,7$ .

En la figura 4.18 b) se muestra el comportamiento del valor de expectación de  $\sigma_x$ , evaluado para los primeros cuatro autoestados, como función del campo magnético  $b_{sl}a$ . Para campo magnético cero, el valor de expectación es cero, como se espera en este sistema. Cuando la intensidad del campo magnético se incrementa, lo hace también el valor absoluto del valor de expectación del operador, aunque no llega a alcanzar la unidad, es decir, los autoestados del Hamiltoniano nunca se convierten en autoestados de  $\sigma_x$ , por lo menos hasta  $b_{sl}a \leq 2$  [T]. Los resultados obtenidos se resumen en la tabla (4.6)

#### 4.4.0.4. Sensibilidad a la variación de los parámetros del QD

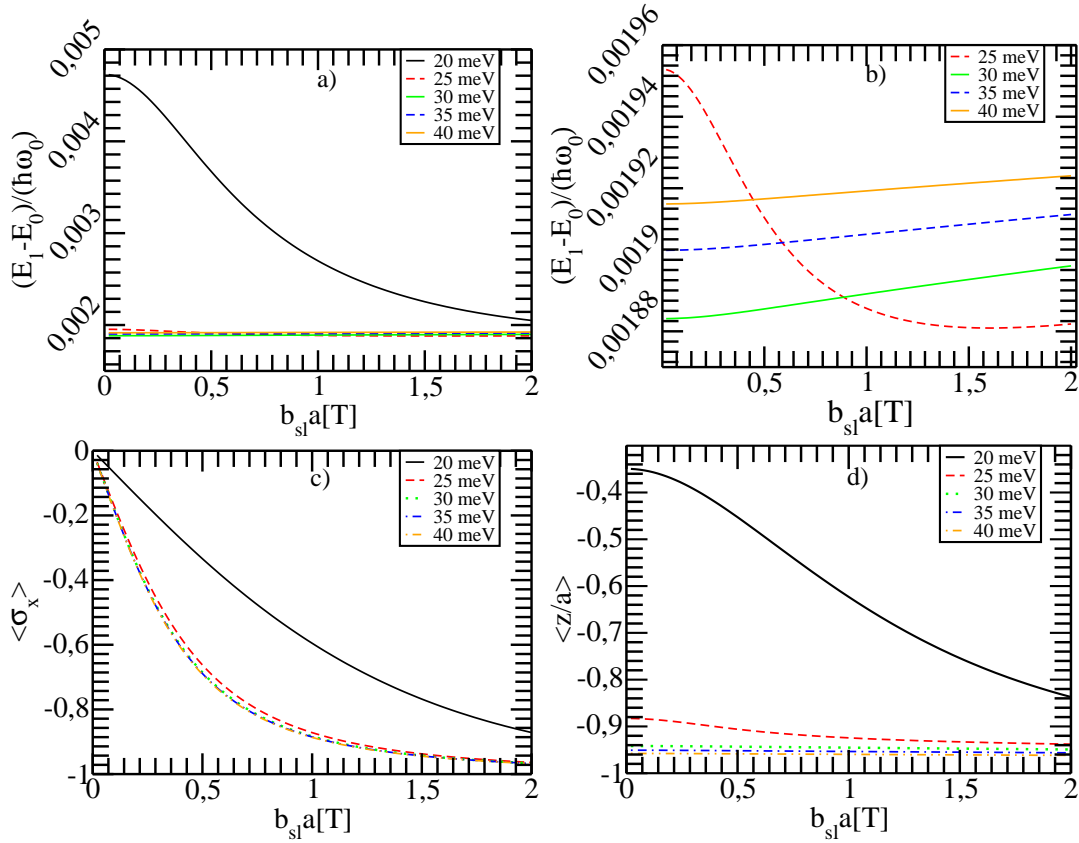
Ya presentamos un conjunto de parámetros para el sistema cuyos estados poseen las propiedades que se desean en el trabajo de Tokura, con un gap de energías del orden de

los  $\mu\text{eV}$ , y ambos estados eran autoestados de  $\sigma_x$  para valores de  $b_s/a$  lo suficientemente grandes. Ahora vamos a analizar cómo algunos de los parámetros del sistema pueden cambiar y no modificar de manera negativa las propiedades que deseamos para el punto cuántico.

El modelo del punto cuántico tiene bastantes parámetros, nosotros vamos a mostrar aquí una exploración en el espacio de parámetros. Hay tres parámetros que definen al QD, la separación entre los mínimos de los pozos del potencial cuártico,  $2a$ , la frecuencia  $\omega_0$  que define también al potencial cuártico y el alto de la barrera entre ambos pozos  $b$ . Nosotros mostraremos que el efecto neto sobre el espectro,  $\Delta$  y los valores de expectación de  $z$  y  $\sigma_x$  son bastante similares cuando cambiamos los diferentes parámetros.

La figura 4.19 compila los resultados obtenidos cambiando los valores de la frecuencia  $\omega_0$ , en particular en a) se observa el comportamiento de  $\Delta$  vs el campo magnético para cinco diferentes valores de  $\omega_0$ , en b) se encuentra una ampliación del gráfico en a), porque hay escalas bastantes diferentes. En c) se observa el valor de expectación de  $\sigma_x$  y en d) está el valor de expectación de  $z$ .

A grandes rasgos el comportamiento de las diferentes cantidades puede entenderse notando que para una dada separación de los pozos de potencial, hay valores de  $\omega_0$  que llevan al punto cuántico afuera del régimen de “bien separados”, dejando pequeños valores de expectación para  $z$  (en valor absoluto) y  $\sigma_x$ . Es interesante que cuando se incrementa el valor del campo magnético el sistema se restablece para volver al régimen que deseamos, este valor debe ser más grande mientras más chico es el valor de  $\omega_0$ .



**Figura 4.19:** En los paneles a) y b) se muestran las diferencias de energías entre el primer estado excitado y el estado fundamental en función de  $b_{sl}a$ , el panel b) es una ampliación en la zona con energías de  $\hbar\omega_0$  entre 25 y 40 [meV]. En los paneles c) y d) se muestran los valores de expectación para el nivel fundamental de los operadores  $\sigma_x$  y  $z/a$ , respectivamente, todos como función de la intensidad del campo magnético  $b_{sl}a$  y para diferentes características del QD con energías de  $\hbar\omega_0 = 20, 25, 30, 35$  y 40 meV.



# Bibliografía

- [1] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven , J. P. Petta, S. Tarucha y L. M. K. Vandersypen, *Rev. Mod. Phys.* **79** 1217 (2007).
- [2] O. Benson y F. Henneberger, Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., Singapore (2008).
- [3] Kawakami, P. Scarlino, D. Ward, F. Braakman, D. Savage, M. Lagally, M. Friesen, S. Coppersmith, M. Eriksson y L. Vandersypen, *Nature Nano.* **9**, 666 (2014).
- [4] M. Veldhorst, J. Hwang, C. Yang, A. Leenstra, B. de Ronde, J. Dehollain, J. Muhonen, F. Hudson, K. Itoh, A. Morello y A. Dzurak, *Nature Nano.* **9**, 981 (2014).
- [5] J. Muhonen, J. Dehollain, A. Laucht, F. Hudson, R. Kalra, T. Sekiguchi , K. Itoh, D. Jamieson, J. McCallum, A. Dzurak y A. Morello, *Nature Nano.* **9** 986 (2014).
- [6] B. Kane, *Nature (London)* **393**, 133 (1998).
- [7] H Bluhm, S Foletti, I Neder, M Rudner, D Mahalu, V Umansky y A Yacoby, *Nature Phys.* **7** 1856 (2010).
- [8] T. Tanamoto, *Phys. Rev. A* **61**, 022305 (2000).
- [9] A. Ferrón , P. Serra y O. Osenda, *Jour. Appl. Phys.* **113**, 134304 (2013).
- [10] T. Hayashi, T. Fujisawa, H. D. Cheong, Y. H. Jeong y Y. Hirayama, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 226804 (2003).
- [11] K. Wang, C. Payette, Y. Dovzhenko, P. Deelman y J. Petta *Phys. Rev. Lett.* **111** 046801 (2013).
- [12] V. Srinivasa, K. Nowack , M. Shafiei , L. Vandersypen y J. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **110** 196803 (2013).
- [13] F. Troiani, U. Hohenester y E. Molinari, *Phys. Rev. B* **62**, 2263 (2000).
- [14] Biolatti E, Iotti R C, Zanardi P and Rossi F, *Phys. Rev. Lett.* **85** 5647 (2000).
- [15] N. Bonadeo, J. Erland, D. Gammon, D. Park, D. Katzer y D. Steel, *Science* **282** 1473 (1998).

- [16] H. Haug y S. Koch *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* ( Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.), (2004).
- [17] D. Loss y D. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57** 120 (1998).
- [18] J. Levy, *Phys. Rev. Lett.* **89** 1479022 (2002).
- [19] A. Holleitner, R. Blick, A. Hüttel, K. Eberl y J. Kotthaus, *Science* **297** 70 (2002).
- [20] L. Gaudreau, S. Studenikin, A. Sachrajda, P. Zawadzki, A. Kam, J. Lapointe, M. Korkusinski y P. Hawrylak, *Phys. Rev. Lett.* **97** 036807 (2006).
- [21] M. Korkusinski, I. Puerto Gimenez, M. Hawrylak, L. Gaudreau, S. Studenikin y A. Sachrajda, *Phys. Rev. B* **75** 115301 (2007).
- [22] W. Witzel y S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **98** 077601 (2007).
- [23] Zhan Shi, C. Simmons, D. Ward, J. Prance, R. Mohr, Teck Seng Koh, John King Gamble, Xian Wu, D. Savage, M. Lagally, M. Friesen, S. Coppersmith y A. Eriksson, *Phys. Rev. B* **88** 075416 (2013).
- [24] G. Burkard y D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **88** 047903 (2002).
- [25] R. Petta, A. Johnson, J. Taylor, E. Laird, A. Yacoby, M. Lukin, M. Marcus, M. Hanson y A. Gossard, *Science* **309** 2180 (2005).
- [26] J. Taylor, J. Petta, A. Johnson, A. Yacoby, C. Marcus y M. Lukin, *Phys. Rev. B* **76** 035315 (2007).
- [27] A. Morello, J. Pla, A. Zwanenburg, W. Chan, Y. Tan, H. Huebl, M. Möttönen, D. Nugroho, C. Yang, A. van Donkelaar, C. Alves, N. Jamieson, C. Escott, L. Hollenberg, G. Clark y S. Dzurak, *Nat.* **467** 687 (2010).
- [28] M. Xiao, M. House y H. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **104** 096801 (2010).
- [29] B. Maune, G. Borselli, B. Huang, D. Ladd, W. Deelman, S. Holabird, A. Kiselev, I. Alvarado-Rodriguez, S. Ross, E. Schmitz, M. Sokolich, A. Watson, F. Gyure y T. Hunter, *Nat.* **481** 344 (2012).
- [30] Z. Shi, C. Simmons, J. Prance, J. Gamble, T. Koh, Y. Shim, X. Hu, D. Savage, M. Lagally, M. Eriksson, M. Friesen y S. Coppersmith, *Phys. Rev. Lett* **108** 140503 (2012).
- [31] T. Koh, J. Gamble, M. Friesen, M. Eriksson y S. Coppersmith *Phys. Rev. Lett.* **109**, 250503 (2012).
- [32] G. Morley, P. Lueders, M. Mohammady, S. Balian, G. Aeppli, W. Kay, W. Witzel, G. Jeschke y T. Monteiro, *Nat. Mat. Lett* **12**, 3499 (2013).



- [33] Y. Tokura, G. van der Wiel , T. Obata y S. Tarucha, Phys. Rev. Lett. 96 047202 (2006).
- [34] W. van der Wiel, Rev. Mod. Phys. **75**, 1 (2003).
- [35] C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Springer-Verlag, Berlín 1990).
- [36] J. Wróbel , Phys. Lett. **93**, 246601 (2004).
- [37] W. van der Wiel , Physica **272B**, 31 (1999).
- [38] W. G. van der Wiel , *Photon Assisted Tunneling in Quantum Dots in Strongly Correlated Fermions and Bosons in Low- Dimensional Disordered Systems*, editado por I. V. Lerner y colaboradores (Kluwer, Dordrecht, 2002), pág. 43-68.
- [39] A. Steane, Phys. Rev. A **68**, 042322 (2003).
- [40] A. Galindo y P. Pascual, *Quantum Mechanics II*, segunda edición, Springer-Verlag (1989).
- [41] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, segunda edición, Wiley (1970).
- [42] O. Osenda y P. Serra, Phys. Rev. A **75** 042331 (2007).
- [43] A. Ferrón, O. Osenda y P. Serra, Phys. Rev. A **79** 032509 (2009).
- [44] A. Ramos y O. Osenda, J. Phys B **47** 015502 (2014).
- [45] Y. Tokura, T. Kubo y J. Munro, J. Phys. Sim. Conference Proceedings **1** 012022 (2014).



# Capítulo 5

## Dinámica

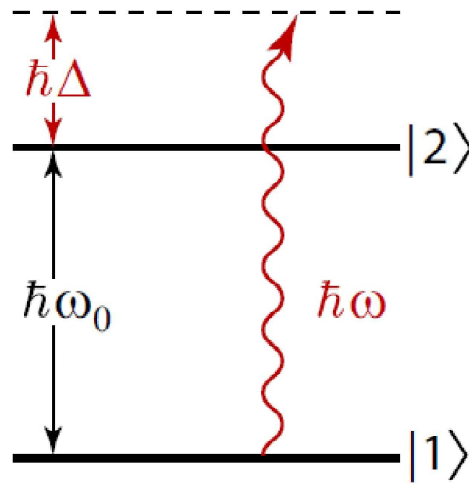
### 5.1. Introducción

Como se ha repetido numerosas veces, para definir un qubit no hace falta nada más que un sistema físico que, en algún régimen, se comporte como un sistema de dos niveles. Es decir, el comportamiento dinámico tiene que estar dominado por lo que sucede en los estados base del qubit. Es claro que un electrón atrapado en un pozo de potencial no puede ser descrito como un sistema de dos niveles salvo en circunstancias especiales. Dichas circunstancias son favorecidas por el diseño del quantum dot.

En el capítulo anterior nos hemos concentrado en un diseño que garantiza, hasta cierto punto, tener un par de estados base en los cuales la información podría ser almacenada eficazmente si el tiempo de decoherencia, asociado al momento angular de espín, es del orden de los microsegundos. De todas formas, no se puede saber *a priori* si el diseño estudiado permite realizar operaciones entre los estados base que insuman un tiempo mucho menor que el tiempo de decoherencia. Es claro también que utilizando un forzamiento suficientemente fuerte (un término dependiente del tiempo con el que el sistema evoluciona cuya intensidad puede ser modificada) el tiempo de operación (por ejemplo para ir de un estado a otro) puede reducirse considerablemente, pero en ese caso la dinámica no estará restringida sólo a los niveles base del qubit.

La tecnología desarrollada para aplicar potenciales eléctricos a quantum dots permite una gran flexibilidad a la hora de aplicar pulsos de distinta forma y con distintas frecuencias. Esto ha sido explotado para diseñar secuencias de pulsos que permiten ir desde un estado inicial hacia un estado blanco con gran fidelidad. Sin embargo, mientras más simple es el pulso y menor la cantidad de frecuencias que intervienen en su diseño más fácil resulta su implementación.

Es así que, teniendo en cuenta lo enunciado en el párrafo anterior, vamos a estudiar la dinámica de algunos estados cuánticos cuando a los electrones atrapados en los quantum dots analizados en el capítulo anterior, se les aplica un campo eléctrico que varía sinusoidalmente en el tiempo. El forzamiento sinusoidal permite estudiar varias cantidades que califican el desempeño del qubit, el tiempo de swapping entre estados base, la pérdida de



**Figura 5.1:** En este esquema se muestra un sistema de dos niveles que tiene autoestados  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$ , el electrón recibe una energía  $\hbar\omega$ , donde  $\omega = \omega_0 + \Delta$ , y  $\Delta$  es el cambio de la frecuencia respecto a la de resonancia.

probabilidad (hacia otros estados del electrón que no son los de la base del qubit) debida a la dinámica y la fidelidad del swap, es decir cuan bien transfiere entre ambos estados base. El objetivo es determinar cuales son los tiempos de operación más cortos que se pueden obtener con alta fidelidad y baja pérdida. También se estudiará que sucede cuando la frecuencia de forzamiento es igual o no a la frecuencia de resonancia determinada por la diferencia de energía entre los estados base del qubit.

Para fijar ideas y definir las cantidades que califican el desempeño del qubit se presenta brevemente el clásico ejemplo de la dinámica de un sistema de dos niveles, el método que permite integrar la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y, finalmente se analizarán los modelos presentados en el capítulo 4.

## 5.2. Oscilaciones de Rabi: dinámica de un sistema de dos niveles

Vamos a describir el comportamiento semi-clásico de un sistema de dos niveles en el cual se aplica una radiación de resonancia (un campo magnético o eléctrico oscilantes). El principal resultado describe la oscilación de las poblaciones del estado, las *oscilaciones de Rabi*. En la figura 5.1 se muestra un esquema en donde un electrón es afectado por radiación. sean  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  dos estados ortonormales que forman la base del sistema al que no se le aplica ningún campo,  $\hbar\omega$  es la energía que le entrega la radiación al electrón,  $\omega = \omega_0 + \Delta$ , y  $\Delta$  es la diferencia entre la frecuencia del sistema ( $\omega$ ) y la frecuencia de

resonancia ( $\omega_0$ ). Sea  $H_0$  el Hamiltoniano del sistema al que se aplica campo.

$$\begin{aligned} H_0|1\rangle &= 0|1\rangle, \\ H_0|2\rangle &= \hbar\omega_0|2\rangle. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Si el sistema comienza con un autoestado como estado inicial, es decir:  $|\psi(0)\rangle = |j\rangle$ , entonces  $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_j t/\hbar}|j\rangle$ . La probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $|j\rangle$  en función del tiempo es  $|\langle j|\psi(t)\rangle|^2 = |e^{-iE_j t/\hbar}|^2 = 1$ . Cualquier estado de este sistema de dos niveles puede ser expresado como:  $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$ , donde  $c_1$  y  $c_2$  son complejos y cumplen  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . Cada estado puede ser representado como:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

El Hamiltoniano  $H_0$  puede ser representado como

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Al aplicar un campo eléctrico o magnético, se induce un momento dipolar entre los estados  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$ . La interacción del campo electromagnético con el dipolo resulta en una perturbación a la oscilación. Esta perturbación puede ser representada como

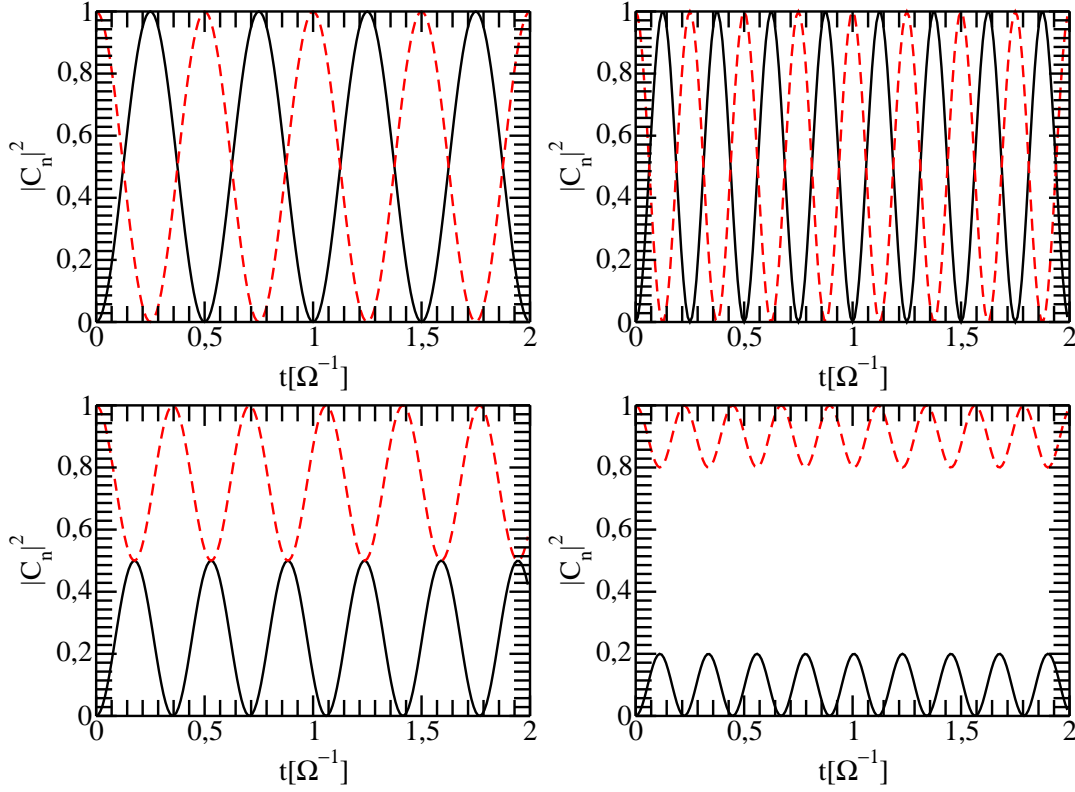
$$H_{int} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega \cos(\omega t) \\ \Omega^* \cos(\omega t) & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

donde  $\hbar\Omega = \mu A_0$ , donde  $\mu$  es el momento dipolar inducido y  $A_0$  es la amplitud del campo electromagnético. Esta amplitud causa transiciones entre los dos estados.

Si el estado comienza a  $t = 0$  en el estado  $|1\rangle$  y se aplica el campo electromagnético, las amplitudes de los estados evolucionan de la siguiente manera

$$\begin{aligned} |c_1|^2 &= \frac{\Omega^2}{\Omega_R^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \\ |c_2|^2 &= \frac{\Delta^2}{\Omega_R^2} + \frac{\Omega^2}{\Omega_R^2} \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), \end{aligned} \quad (5.5)$$

con  $\Omega_R^2 = \Omega^2 + \Delta^2$ . Esto significa que las probabilidades oscilan entre  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  con una frecuencia  $\Omega_R$ , o *frecuencia total de Rabi*. Notemos que en este punto el comportamiento dinámico del sistema está gobernado por sólo dos parámetros, ellos son el *la intensidad de acoplamiento* (proporcional a la intensidad del campo electromagnético) y la diferencia entre la frecuencia y la frecuencia de resonancia *detuning*,  $\Delta$ . El campo aplicado todavía induce transiciones entre los dos estados para frecuencias que no son exactamente las de resonancia. En la figura 5.2 se puede ver cómo cambian oscilaciones cuando el valor de  $\Delta = 0$ . Sólo en resonancia las poblaciones oscilan completamente entre cero y uno. Mientras nos alejamos de la frecuencia de resonancia, el período disminuye y también lo hace su amplitud. Si dejamos fijo el *detuning*, la frecuencia de las oscilaciones cambia al cambiar la intensidad del campo aplicado.



**Figura 5.2:** Se muestran las probabilidades asociadas a los estados  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  en función del tiempo en  $\Omega^{-1}$ . En línea negra continua se representa  $|C_1|^2$  y la roja entrecortada es  $|C_2|^2$ . Los gráficos superiores tienen  $\Delta = 0$ , el de la izquierda tiene  $\Omega = 2\pi$ , y el de la derecha  $\Omega = 4\pi$ . Los gráficos inferiores tienen  $\Omega = 2\pi$  fijo, el gráfico izquierdo tiene  $\Delta = 2\pi$  y el de la derecha  $\Delta = 4\pi$ .

### 5.3. Control sinusoidal de un electrón

Uno de los potenciales dependientes del tiempo más sencillos, desde el punto de vista numérico y experimental, que se puede aplicar para controlar el sistema es:

$$V_{ext}(\vec{r}, t) = A_0 \sin(\omega t)z, \quad (5.6)$$

donde  $A_0$  es la intensidad control y  $\omega$  es la frecuencia de control. Esta ecuación modela el efecto de campo eléctrico que cambia periódicamente en el tiempo, el cual se aplica en la dirección  $z$ .

Dado que queremos analizar el comportamiento de los modelos presentados en el capítulo anterior como qubits, estudiaremos la evolución del estado cuántico del electrón, tomando como condición inicial el estado más bajo del sistema.

Haciendo uso de que tenemos la solución para el problema estacionario del sistema explicaremos dos métodos para resolver el problema con el potencial dependiente del tiempo y así analizar la dinámica de este sistema. De los dos métodos, el primero está basado en

resolver una ecuación diferencial [1] y el segundo está basado en diagonalizar Hamiltonianos y hace uso del operador propagación (aproximación a primer orden).

### 5.3.1. Métodos de resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

#### 5.3.1.1. Resolviendo ecuación diferencial

La evolución temporal del estado está gobernada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad (5.7)$$

donde  $H = H_0 + V(\vec{r}, t)$ .

Se propone la función de onda que resuelve el problema como una superposición de todos los auto-estados:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\vec{r}) \quad (5.8)$$

y sabiendo que

$$H_0 \Phi_n(\vec{r}) = E_n \Phi_n(\vec{r}) \quad (5.9)$$

podemos encontrar fácilmente una solución. Resolviendo (5.7), obtenemos

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \Phi_n(\vec{r}) \frac{\partial (C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar})}{\partial t} &= H \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\vec{r}) \\ i\hbar \sum_n \Phi_n(\vec{r}) \left( \frac{\partial C_n(t)}{\partial t} - \frac{iE_n}{\hbar} C_n(t) \right) e^{-iE_n t/\hbar} &= (H_0 + V(\vec{r}, t)) \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\vec{r}) \\ \sum_n \Phi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial C_n(t)}{\partial t} + E_n C_n(t) \right) &= \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} (E_n + V(\vec{r}, t)) \Phi_n(\vec{r}) \\ \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial C_n(t)}{\partial t} + E_n C_n(t) \right) \int \Phi_k^*(\vec{r}) \Phi_n(\vec{r}) d\vec{r} &= \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \int \Phi_k^*(\vec{r}) (E_n + V(\vec{r}, t)) \Phi_n(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Por ortogonalidad de las funciones  $\Phi_n$  tenemos:

$$\begin{aligned} \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial C_n(t)}{\partial t} + E_n C_n(t) \right) \delta_{k,n} &= \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \left( E_n \delta_{k,n} + \int \Phi_k^*(\vec{r}) V(\vec{r}, t) \Phi_n(\vec{r}) d\vec{r} \right) \\ \left( i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} + E_k C_k(t) \right) &= C_k(t) E_k + \sum_n C_n(t) e^{-i(E_n - E_k)t/\hbar} \langle \Phi_k(\vec{r}), V(\vec{r}, t) \Phi_n(\vec{r}) \rangle \\ i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} &= \sum_n C_n(t) e^{-i(E_n - E_k)t/\hbar} \langle \Phi_k(\vec{r}), V(\vec{r}, t) \Phi_n(\vec{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Como conocemos la expresión para  $V(\vec{r}, t)$ , resulta:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = A_0 \sin(\omega t) \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) e^{i\omega_{kn} t} Z_{kn}}, \quad (5.12)$$

donde  $\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$  y  $Z_{kn} = \langle \Phi_k | z | \Phi_n \rangle$ .

La probabilidad dependiente del tiempo para que un determinado estado, por ejemplo  $k$ , esté ocupado al tiempo  $t$  está dada por  $|C_k(t)|^2$ .

Los elementos de matriz  $Z_{kn}$  se pueden obtener para todos los estados con una precisión muy alta (cuadruple precisión por lo menos), por lo que la evolución temporal de los estados cuánticos resulta de la integración de la ecuación (5.12). La integración numérica se realizó utilizando Runge-Kutta de cuarto orden, teniendo en cuenta todos los estados ligados que poseen cada sistema. La desventaja de este método es que en cada paso (o una cantidad determinada de pasos) hay que normalizar el módulo cuadrado de la función de onda.

### 5.3.1.2. A partir del operador evolución temporal

Empecemos con un Hamiltoniano que no depende del tiempo como en la ecuación (5.9), entonces:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle \quad (5.13)$$

luego

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} &= \sum_j \frac{\partial |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle}{\partial t} \\ -\frac{i}{\hbar} H_0 |\Psi(t)\rangle &= \sum_j \left( -\frac{i}{\hbar} \right) H_0 |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle \\ \sum_j |\phi_j\rangle \frac{\partial \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle}{\partial t} &= \sum_j \left( -\frac{i}{\hbar} \right) E_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle \\ \sum_j \langle \phi_k | \phi_j \rangle \frac{\partial \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle}{\partial t} &= \sum_j \left( -\frac{i}{\hbar} \right) E_j \langle \phi_k | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle \\ \frac{\partial \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} E_j \langle \phi_j | \Psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (5.14)$$

esta es una ecuación diferencial de primer orden con solución:

$$\langle \phi_j | \Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_j (t-t_0)} \langle \phi_j | \Psi(t_0)\rangle, \quad (5.15)$$

con lo cual tenemos:

$$|\Psi(t)\rangle = \left[ \sum_j |\phi_j\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j (t-t_0)} \langle \phi_j | \Psi(t_0)\rangle \right] |\Psi(t_0)\rangle. \quad (5.16)$$

El factor entre corchetes es  $U(t, t_0)$  el *operador evolución*, definido como

$$U(t, t_0) = \sum_j |\phi_j\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j (t-t_0)} \langle \phi_j |, \quad (5.17)$$



la cual es la representación espectral de un operador que es función del operador Hamiltoniano

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}. \quad (5.18)$$

Este operador posee las siguientes propiedades:

- $U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle$ ,
- $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 = \langle\psi(t_0)|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$  entonces  $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$  y  $U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0)$ ,
- $U(t, t_0) = U(t, t_3)U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$ , con  $t \geq t_3 \geq t_2 \geq t_1 \geq t_0$ .

Entonces reemplazando en la ecuación de Schrödinger tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial|\psi(\tau_1)\rangle}{\partial\tau_1} &= -\frac{i}{\hbar}H(\tau_1)|\psi(\tau_1)\rangle \\ \frac{\partial U(\tau_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle}{\partial\tau_1} &= -\frac{i}{\hbar}H(\tau_1)U(\tau_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ \frac{\partial U(\tau_1, t_0)}{\partial\tau_1} &= -\frac{i}{\hbar}H(\tau_1)U(\tau_1, t_0) \\ \int_{t_0}^t \left( \frac{\partial U(\tau_1, t_0)}{\partial\tau_1} \right) d\tau_1 &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (H(\tau_1)U(\tau_1, t_0)) d\tau_1 \\ U(t, t_0) - U(t_0, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau_1)U(\tau_1, t_0)d\tau_1, \end{aligned} \quad (5.19)$$

como  $U(t_0, t_0) = 1$

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau_1)U(\tau_1, t_0)d\tau_1. \quad (5.20)$$

Esta ecuación integral puede iterarse sobre si misma, si tenemos en cuenta que

$$U(\tau_1, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{\tau_1} H(\tau_2)U(\tau_2, t_0)d\tau_2, \quad (5.21)$$

reemplazando en (5.20):

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau_1)d\tau_1 + \left( \frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t H(\tau_1) \left( \int_{t_0}^{\tau_1} H(\tau_2)U(\tau_2, t_0)d\tau_2 \right) d\tau_1, \quad (5.22)$$

repetiendo este proceso obtenemos

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n H(\tau_1)H(\tau_2)\dots H(\tau_n) \quad (5.23)$$

esta serie se conoce como *serie de Dyson*.

Integrando en 5.20, a primer orden nos queda:

$$U(t, t_0) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}H(\tilde{t})\Delta\tilde{t}}, \quad (5.24)$$

con  $\tilde{t} = \frac{t+t_0}{2}$  y  $\Delta\tilde{t} = t - t_0$ .

Así obtenemos una ecuación iterativa con la cual, para resolver el problema para cada tiempo, hay que diagonalizar el sistema con un nuevo valor de  $t$ .

- Para  $t = t_0$ :

$$H(\tilde{t}) = H(t_0) + \langle z \rangle f(\tilde{t}), \quad (5.25)$$

donde  $H(t_0)$  es el Hamiltoniano que resulta del estado estacionario en la base en donde es diagonal, restringido a un espacio  $n_e \leq n_f$  ( $n_f$  es la cantidad total de funciones de prueba del estado estacionario),  $\langle z \rangle$  es la matriz en la base en donde  $H(t_0)$  es diagonal y  $f(\tilde{t})$  es la función que depende del tiempo, en este caso:  $A_0 \sin(\omega t)$ .

Se diagonaliza el nuevo Hamiltoniano obteniendo  $\lambda_0^{(0)}, \lambda_1^{(0)}, \dots, \lambda_{n_e}^{(0)}$  y autovectores  $|\phi_0^{(0)}(\tilde{t})\rangle, |\phi_1^{(0)}(\tilde{t})\rangle, \dots, |\phi_{n_e}^{(0)}(\tilde{t})\rangle$ , el supra-índice hace referencia al número de iteración.

- Para  $t = t_1$ . Repetimos el procedimiento anterior, ahora al  $\tilde{t}$  anterior le sumamos  $\Delta\tilde{t}$  y este se convierte en el nuevo  $\tilde{t}$ .

Repetiendo este procedimiento  $i$ -veces, podemos obtener una expresión para el operador propagación:

$$U(t_{i+1}, t_i) = \sum_{k=0}^{n_e} e^{-iH(\tilde{t})\Delta\tilde{t}/\hbar} |\phi_k^{(i)}(\tilde{t})\rangle \langle \phi_k^{(i)}(\tilde{t})| \quad (5.26)$$

el cual es equivalente a:

$$U(t_{i+1}, t_i) = \sum_{k=0}^{n_e} e^{-i\lambda_k^{(i)}(\tilde{t})\Delta\tilde{t}/\hbar} |\phi_k^{(i)}(\tilde{t})\rangle \langle \phi_k^{(i)}(\tilde{t})|. \quad (5.27)$$

Esta es la expresión que vamos a utilizar para encontrar las probabilidades.

Dado un estado inicial  $|\psi_0\rangle$  encontramos el estado  $|\psi_f\rangle$  (función de onda al tiempo final  $t_f$ ) al aplicarle el propagador  $U(t_f, t_{f-1})$ .

La diagonalización se realiza a partir de las subrutinas usadas en el capítulo anterior. Este método tiene la ventaja de que ya se encuentra normalizado y la desventaja de que cada paso implica una diagonalización.

### 5.3.2. Pérdida

Idealmente para calificar como un qubit, un sistema físico debería cambiar perfectamente entre los dos estados de la base bajo un *control* apropiado, es decir, si  $|C_1|^2$  y  $|C_2|^2$  son las probabilidades que dependen del tiempo de que el electrón esté en el estado  $|0\rangle$  o en el estado  $|1\rangle$ , respectivamente, entonces  $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$ .

Excepto para sistemas de dos niveles, hay una probabilidad finita de que después de una operación conmutación *switching*  $|C_1|^2 + |C_2|^2 < 1$ , es decir, el qubit sufre una pérdida de probabilidad. La *pérdida instantánea* (*instantaneous leakage*), se define como  $1 - (|C_1|^2 + |C_2|^2)$  y es una buena medida para analizar el desempeño de un sistema dado como qubit [?]. La pérdida tiene un doble origen, por un lado el control utilizado para cambiar entre los estados de la base produce transiciones a otros niveles además de los de interés (los dos primeros), y por el otro la interacción con el medio ambiente. En este capítulo sólo analizaremos la primera sin tener en cuenta la posibilidad de ionización, así que el electrón permanece ligado mientras se aplica el control.

Además de la pérdida instantánea se suele introducir la *pérdida promediada*,  $L_p$ , la cual es definida como

$$L_p = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} (1 - (|C_1(t')|^2 + |C_2(t')|^2)) dt' \quad (5.28)$$

donde  $T$  es un tiempo lo suficientemente largo como para tomar varios períodos de *switching*.

Los métodos que explicamos anteriormente para encontrar las probabilidad de que la partícula se encuentre en un determinado estado a tiempo  $t$  muestran que incluso el control está en resonancia,  $\omega_{res} = (E_1 - E_0)/\hbar$  (donde  $E_0$  es el autovalor variacional del estado fundamental y  $E_1$  es el autovalor variacional del primer estado excitado), hay transiciones a todos los estados acotados permitidos por las reglas de selección de dipolo, así que a menos que de algún modo los elementos de matriz  $Z_{kn}$  eliminen esta posibilidad, para un tiempo lo suficientemente grande todos los términos de la ecuación de superposición (5.8) tendrán contribuciones no despreciables. Este hecho, inevitablemente, produce una pérdida indeseable.

Desde el punto vista experimental es factible sintonizar muy bien la frecuencia de campo eléctrico. En nuestros sistemas vamos a analizar qué pasa cuando se cambia el valor de la intensidad de forzamiento  $A_0$  y la frecuencia varía un 1%, 5% y un 10%, respecto a la frecuencia de resonancia.

## 5.4. Dinámica modelos bidimensionales

Utilizamos los dos métodos contados anteriormente. Se compararon los resultados, en doble precisión y desde el punto de vista numérico dieron los mismos valores. Se evaluó cuál era el código que funcionaba más rápido y por esa razón se eligió el segundo método.

Los estados iniciales que se utilizarán para iniciar la evolución temporal serán los que analizamos en el capítulo anterior. Con el objetivo de simplificar su análisis los resumiremos enumerándolos. A continuación detallamos cuales son los parámetros que caracterizan cada sistema

- S1 Sistema 1: bidimensional con  $a = 70 [nm]$ ,  $b_{sl} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$
- S2 Sistema 2: bidimensional con  $a = 70 [nm]$ ,  $b_{sl} = 3,00 [T/\mu m]$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$

- S3 Sistema 3: bidimensional con  $a = 70 [nm]$ ,  $b_{sl} = 5,00 [T/\mu m]$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$
- S4 Sistema 4: bidimensional con  $a = 100 [nm]$ ,  $b_{sl} = 6,00 [T/\mu m]$ ,  $B_0 = 0,5 [T]$ ,
- S5 Sistema 5: confinamiento en  $y$   $a = 70 [nm]$ ,  $b_{sl} = 5,00 [T/\mu m]$ ,  $B_0 = 0,3 [T]$ ,  $\omega_y = 1 [meV]$ ,
- Sistema 6: confinamiento en  $y$   $a = 70 [nm]$ ,  $b_{sl} = 5,00 [T/\mu m]$ ,  $B_0 = 0,2 [T]$ ,  $\omega_y = 5 [meV]$ ,

todos con  $\omega_0 = 1 [meV]$ .

Obtuvimos las probabilidades para diferentes valores de forzamiento  $A_0$  y para valores de frecuencia que coinciden con el valor de resonancia, que varían un uno, cinco y diez por ciento, para cada uno de los sistemas.

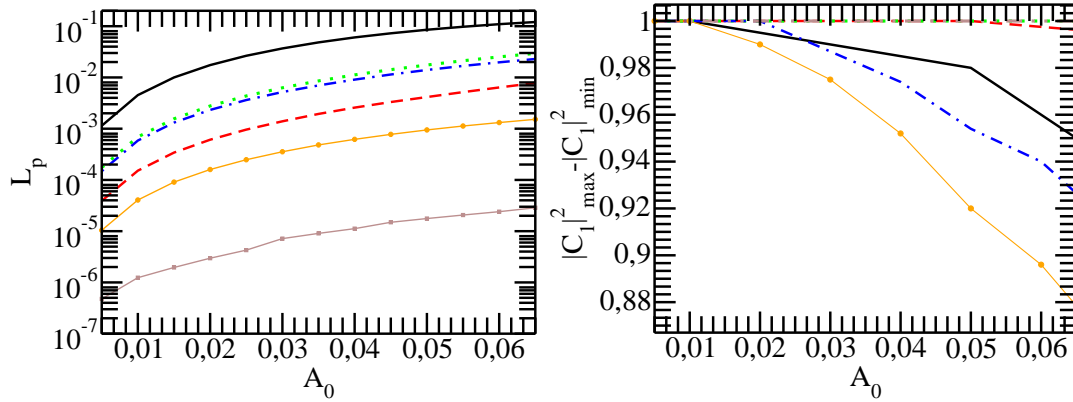
Claramente, como el *driving* aumenta su valor, la evolución temporal del estado se vuelve menos armónica. Por lo tanto para todos los sistemas, existe un valor de forzamiento para el cual la evolución temporal ya no tiene período determinado.

Para un sistema con un número finito de estados, hay una probabilidad finita de que el estado del sistema vuelva al estado inicial para un tiempo de evolución lo suficientemente grande. Por esta razón, es útil introducir cantidades promediadas en el tiempo para calificar el comportamiento dinámico del sistema. Para computar la *pérdida promedio*,  $L_p$ , utilizamos el método de integración de Simpson y el valor  $T$  correspondió aproximadamente a 30 períodos de *switching* de los estados.

Otra forma con la que caracterizaremos el desempeño del qubit es a partir de la *transmisión* que está dada por  $|C_1|_{max}^2 - |C_1|_{min}^2$ , que nos da una medida instantánea de qué tan bien puede pasar del estado  $|0\rangle$  al  $|1\rangle$ . Como consideramos que la mayor contribución a la probabilidad está dada por los primeros dos estados, el valor de óptimo  $|C_1|_{max}^2$  es cercano a 1 y el de  $|C_1|_{min}^2$  es cercano a cero. Por lo tanto la transmisión es mejor cuándo más cerca de uno sea el resultado.

La figura 5.3 resume qué tan controlable es cada uno de los sistemas. En el panel izquierdo se muestra la *Pérdida promedio* en función del forzamiento. Un valor aceptable de pérdida es menor o igual a  $10^{-3}$ , los sistemas que cumplen con esta condición para el rango de valores que se muestra en la figura son S6 y S5, son los sistemas que tienen confinamiento en la dirección  $y$ . En el panel derecho vemos que la transmisión no es buena para S5, de hecho es la peor de todos los sistemas, mientras que S6 muestra la mejor transmisión, seguida por S3 y S2, en ese orden. Notemos que para valores chicos del forzamiento todos los sistemas cumplen con una buena transmisión y una pequeña pérdida. Por otra parte, recordemos que S1, S2 y S3 no son sistemas que proporcionen los estados iniciales buscados, sólo fueron incluidos para resaltar que cambiar el valor del gradiente de campo  $b_{sl}$ , no garantiza obtener un mejor desempeño en el control. La solución para estos sistemas es quizá considerar como estado inicial un estado preparado.

Se dijo que todos los sistemas funcionaban bien para valores chicos de forzamiento, sin embargo, mientras menor es  $A_0$  mayor es el período de *switching* y otra variable a tener en cuenta es la rapidez con la que se realizan las operaciones. Buscamos que el tiempo de



**Figura 5.3:** En el panel izquierdo se muestra Pérdida promedio en función del forzamiento  $A_0$ . En el derecho se muestra la transmisión  $|C_1|^2_{max} - |C_1|^2_{min}$  vs.  $A_0$ . En línea negra continua se muestra el S1, en rojo entrecortado el S2, en verde punteado el S3, en azul punto y línea S4, naranja con puntos S5, marrón con cuadrados S6. La frecuencia de control coincide con la frecuencia de resonancia, es decir,  $\omega = \omega_{res}$ .

	$A_0^\ell$
S1	0,07
S2	0,07
S3	0,07
S4	0,1
S5	0,2
S6	1,0

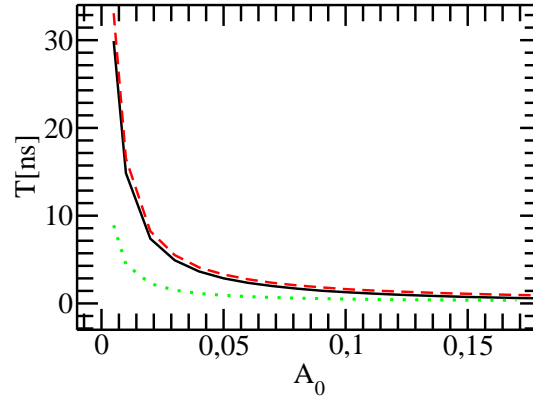
**Cuadro 5.1:** Esta tabla muestra Los valores de forzamiento límite, aproximados para los diferentes sistemas estudiados.

operación sea el menor posible porque eso determina la cantidad de operaciones que se podrán realizar antes de que la decoherencia asociada al ambiente degrade la dinámica del sistema. En la figura 5.4 se puede observar que para este rango de forzamientos el menor tiempo de operación lo realiza el sistema S4 (el sistema bidimensional con  $a = 100$  [nm]), luego le sigue S5 y por último S6.

Los rangos de forzamientos con los que se graficó hasta ahora están acotados superiormente porque a partir de valores de forzamiento superiores, alguno de los sistemas perdía su periodicidad o su máximo o mínimo valor de probabilidad fluctuaba en cada período. En la Tabla 5.1 se muestra para cada sistema el valor, aproximado, de forzamiento límite que llamaremos  $A_0^\ell$ .

A modo de ejemplificar cómo son las probabilidades y cómo varían en función del tiempo se muestra el sistema S6, el de mejor desempeño. En la figura 5.5 se muestra la probabilidad de que el qubit se encuentre en el estado  $|0\rangle$ ,  $|C_1|^2$  en función del tiempo.

Los gráficos de probabilidad en función del tiempo para los otros se encuentran en el apéndice C.



**Figura 5.4:** Se muestra período  $T$  en función del forzamiento, sólo mostramos los sistemas que nos proporcionaban un buen estado inicial. En línea negra continua se encuentra  $S5$ , rojo entrecortado  $S6$  y en verde punteado  $S4$ , mientras menor es el valor de forzamiento mayor es el tiempo que tarda el sistema en permutar entre los estados.

Cada panel se realizó para diferentes valores de forzamiento. El valor de forzamiento límite que se muestra en la Tabla (5.1) es el primer valor para el cual el sistema pierde periodicidad y sus máximos y mínimos cambian con el tiempo. Este sistema se comporta diferente a todos los demás porque existe otro valor de forzamiento más grande para el cual la probabilidad recupera su período, aunque los valores máximos y mínimos de la probabilidad no vuelven a ser independientes del período. En cada panel se observa la probabilidad para diferentes valores de la frecuencia de control  $\omega$ . En línea negra continua se muestra  $\omega = \omega_{res}$ , en roja entrecortada  $\omega = \omega_{res}1,01$ , en verde de punto y línea  $\omega = \omega_{res}1,05$  y en azul punteada  $\omega = \omega_{res}1,10$ . Para valores chicos de forzamiento y frecuencias diferentes a la de resonancia, sucede lo mismo que pasaba en las oscilaciones de Rabi, si  $\Delta \neq 0$  (*detuning* diferente de cero) el periodo de la probabilidad aumenta y no es posible realizar una evolución que vaya desde el estado fundamental al excitado. En consecuencia con una frecuencia de este tipo no se podría realizar control cuántico. A medida que aumenta el valor de forzamiento sucede que las probabilidades con *detuning* no nulo aumentan su amplitud. La probabilidad con la frecuencia que difiere un 1% con respecto a la frecuencia de resonancia es la primera en llegar a tener amplitud que va entre cero y uno. Luego la debería seguir la que difiere un 5%, pero eso no sucede para todos los sistemas, es más muchas veces llegan a su  $A_0^\ell$  antes. Es interesante que en todos los sistemas, excepto  $S6$ , justo antes de que la probabilidad con  $\omega = \omega_{res}$  llegue a su  $A_0^\ell$ , las probabilidades con *detuning* no nulo alcanzan su mayor amplitud, llegando varias ( $S1$ ,  $S2$ ,  $S3$  y  $S4$ ) a alcanzar la misma amplitud de probabilidad que la de  $\omega = \omega_{res}$ . Posteriormente  $A_0^\ell$  de esas probabilidades coinciden con las probabilidades que tienen  $\omega = \omega_{res}$ .

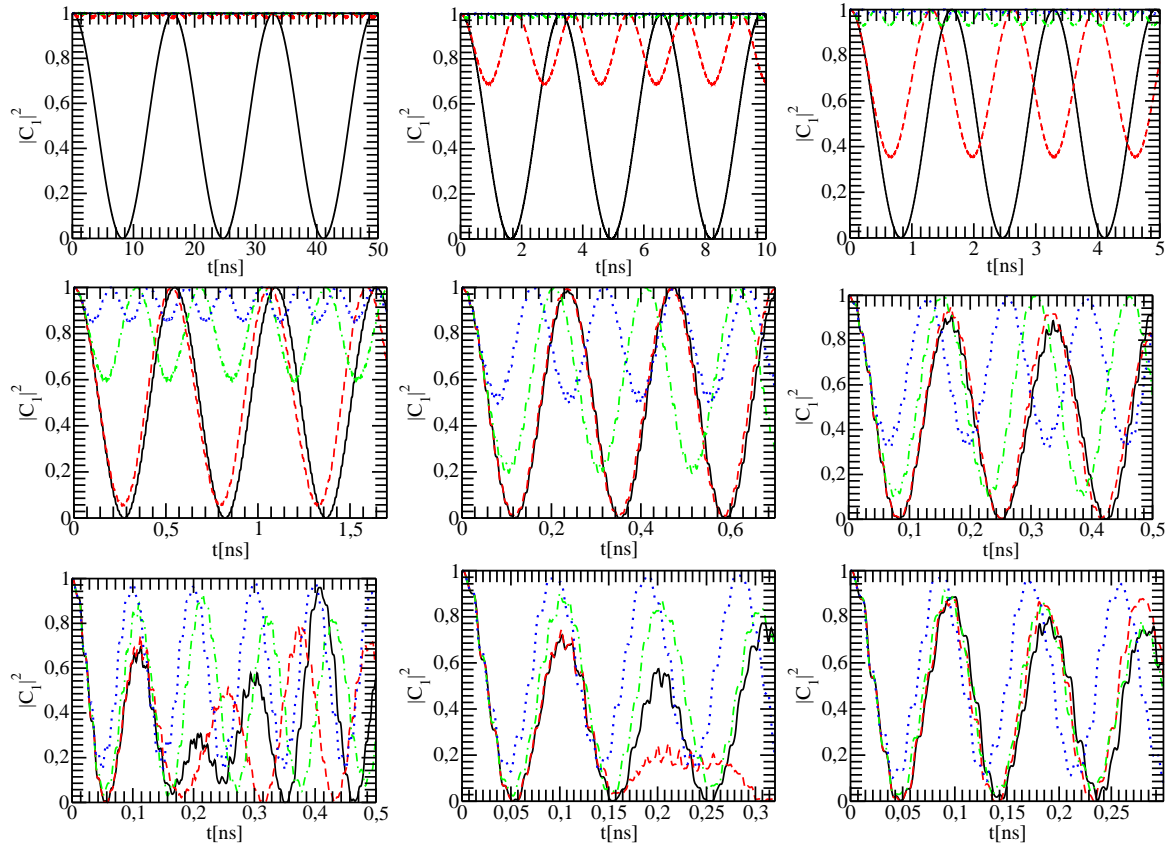
Para el sistema  $S6$  el comportamiento es diferente porque los  $A_0^\ell$  para las probabilidades con *detuning* no nulo no coinciden con la de *detuning* nulo, es más para ciertas

frecuencias ( $\omega = \omega_{res}1,05$  y  $\omega = \omega_{res}1,10$ ) los  $A_0^\ell(\Delta \neq 0) > A_0^\ell(\Delta = 0)$ . En la figura 5.5 para forzamiento  $A_0 = 1,5$  las probabilidades con frecuencia que difieren un 5 y un 10 % respecto a la frecuencia de resonancia pueden realizar una mejor transmisión del estado. Para  $A_0 = 1,6$  la última probabilidad sigue mejorando pero nunca llega a cero.

Para analizar este sistema (S6) podemos ver la figura 5.6 en donde se muestra en el panel izquierdo la pérdida promedio, y en el izquierdo la transmisión ambos en función de  $A_0$ . Cada línea tiene un valor de frecuencia diferente. Línea negra continua  $\omega = \omega_{res}$ , roja entrecortada  $\omega = 1,01\omega_{res}$ , verde punteada  $\omega = 1,05\omega_{res}$  y azul punto y línea  $\omega = 1,10\omega_{res}$ . La pérdida tiene valores aceptables hasta valores de forzamiento menores a 0,5. Las curvas correspondientes a *detuning* no nulo llegan a valores de forzamiento ligeramente mayores. A pesar de que el comportamiento para valores de forzamiento más grandes que 0,5 no entran dentro de la pérdida promedio recomendada, vamos a analizarlo porque es interesante que existan valores de *detuning* para los cuales la pérdida disminuya y su probabilidad de encontrarse en el estado 1 siga manteniendo su comportamiento oscilatorio, como explicamos anteriormente. En el panel derecho se observa que para valores grandes de forzamiento los estados con *detuning* no nulo muestran un mejor desempeño.

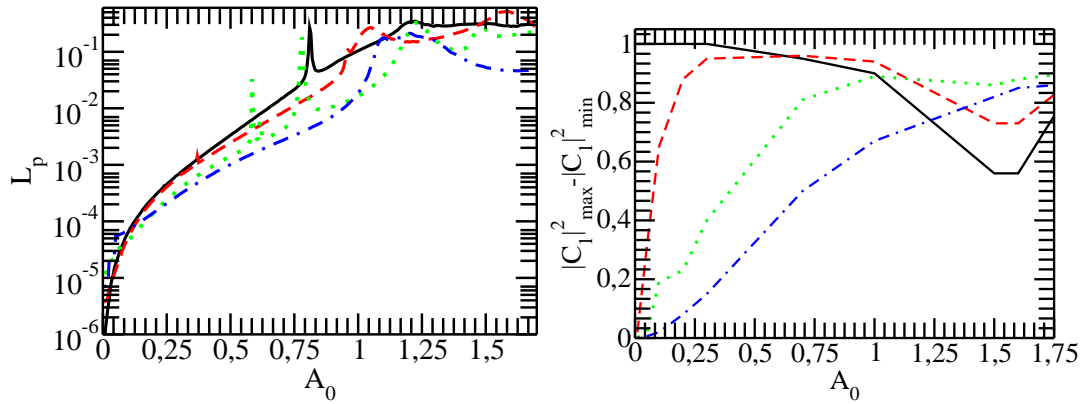
#### 5.4.1. Dinámica para el modelo bidimensional ideal

Para este sistema dejamos una sección especial porque es la que nos da mejores resultados, es el que vimos en el capítulo anterior, que tiene un valor de gradiente de campo  $b_{sl}$  muy grande. En la figura 5.7 se muestra la pérdida en función del forzamiento. En los paneles superiores y en el izquierdo inferior se varía el valor de  $a$  y las líneas corresponden a diferentes valores de frecuencias de control, en línea negra con puntos  $\omega = \omega_{res}$ , en línea roja con cuadrados  $\omega = \omega_{res}1,01$ , la línea verde con diamantes  $\omega = \omega_{res}1,05$  y en línea azul con triángulos  $\omega = \omega_{res}1,10$ . El panel superior izquierdo se realizó con  $a = 20[nm]$ , el superior derecho con  $a = 25[nm]$ , el inferior derecho con  $a = 30[nm]$  muestra las pérdidas para los valores anteriores pero con  $\omega = \omega_{res}$ . No se muestra la transmisión porque se puede resumir como sigue:  $A_0^\ell = 1 \times 10^{-2}$  para una frecuencia de control que coincide con la frecuencia de resonancia. La transmisión para estados con frecuencia de control que difieren un 1 % con respecto a la frecuencia de resonancia van de cero a uno justo antes de que  $A_0^\ell = 1 \times 10^{-2}$  y su forzamiento límite es el mismo que el de anterior, es decir para un control con  $\omega = \omega_{res}1,01$  el forzamiento debe ser muy preciso. Con las otras frecuencias nunca se llega a una transmisión entre cero y uno. Los tres primeros paneles muestran que con forzamientos menores a  $10^{-2}$  y con  $\omega = \omega_{res}$  se obtienen valores aceptables de pérdida promedio. En el panel derecho inferior se puede ver que dependiendo del valor de forzamiento conviene que los pozos estén más cerca o más separados. Para  $A_0$  entre  $10^{-4}$  y aproximadamente hasta  $10^{-3}$  la mejor pérdida se produce para una separación de  $a = 20 nm$  y para  $A_0$  entre  $10^{-3}$  y  $10^{-2}$  la mejor pérdida es para  $a = 30 [nm]$ .

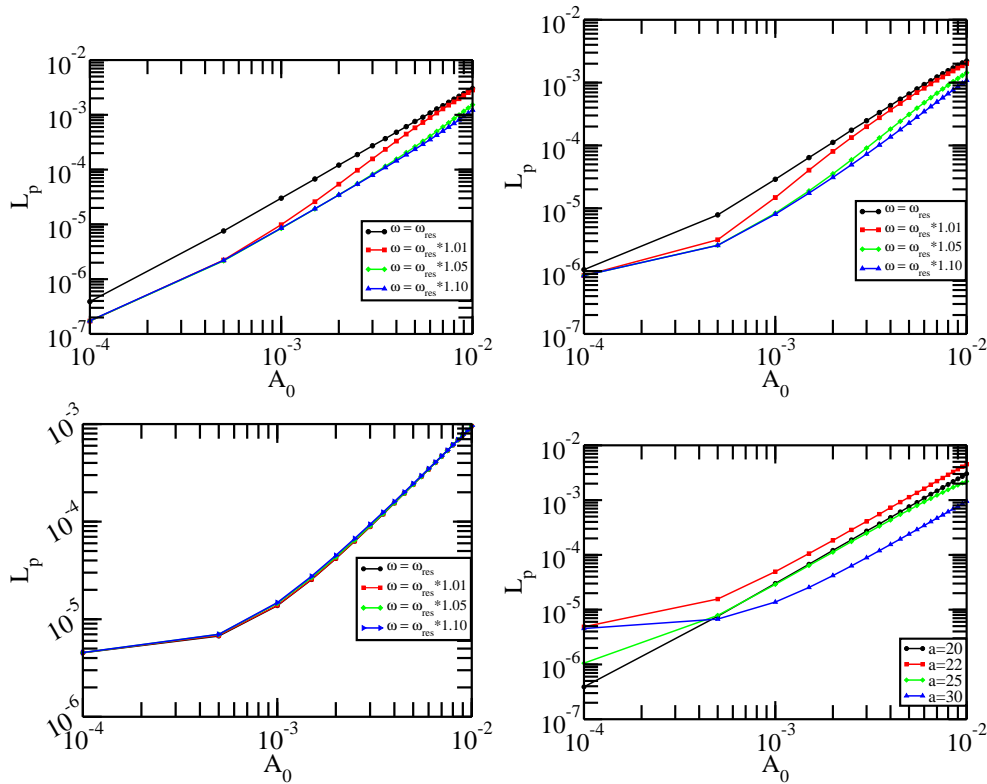


**Figura 5.5:** Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S_6$ . El panel superior izquierdo se hace con forzamiento  $A_0 = 0,01$ , el central con  $A_0 = 0,05$ , el de la derecha  $A_0 = 0,1$ , el central izquierdo  $A_0 = 0,2$ , el central  $A_0 = 0,3$ , el derecho  $A_0 = 0,7$  y siguientes inferiores, izquierdo  $A_0 = 1,0$ , central  $A_0 = 1,5$ , derecho  $A_0 = 1,6$  y el último  $A_0 = 1,8$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.





**Figura 5.6:** Pérdida y transmisión vs  $A_0$ . Para el sistema S6. Línea negra continua  $\omega = \omega_{res}$ , roja entrecortada  $\omega = 1,01\omega_{res}$ , verde punteada  $\omega = 1,05\omega_{res}$  y azul punto y línea  $\omega = 1,10\omega_{res}$ .



**Figura 5.7:** Pérdida promedio en función del forzamiento para diferentes valores de frecuencia. En negro y punto circulares se muestra la frecuencia coincidente con la de resonancia, en rojo con puntos cuadrados  $\omega = 1,01 \times \omega_{res}$ , en verde con puntos de diamantes  $\omega = 1,05 \times \omega_{res}$  y en azul con triángulos  $\omega = 1,10 \times \omega_{res}$ . El gráfico superior izquierdo corresponde a  $a = 20$ [nm], el superior derecho a  $a = 25$ [nm] y el inferior izquierdo a  $a = 30$ [nm]. El último es una comparación entre los diferentes tamaños mostrados anteriormente en donde se agregó además la pérdida para  $a = 22$ [nm]. En todos los casos la frecuencia del sistema coincide con la frecuencia de resonancia.

# Bibliografía

- [1] A. Ferrón, P. Serra y O. Osenda, *Quantum control of a model qubit based on a multi-layered quantum dot. J. Appl. Phys.* **113**, 134304 (2013).



# Capítulo 6

## Conclusiones y perspectivas

- En el capítulo tres vimos que implementar el estudio de algunos aspectos básicos de la Mecánica Cuántica, como el confinamiento de resonancias, se puede realizar en quantum dots semiconductores con dimensiones e intensidades de campo accesibles para los estándares actuales. El hecho de que las dimensiones características del quantum dot puedan escogerse del orden del radio de los niveles de Landau asociados a un campo magnético uniforme y constante permite explorar distintos regímenes que son inaccesibles para sistemas atómicos o moleculares, donde las dimensiones características son varios ordenes de magnitud menor que en un quantum dot nanoscópico. Otro ejemplo, muy relacionado, es la posibilidad de establecer corrientes permanentes en nanoestructuras conocidas como quantum rings, o anillos cuánticos, mediante la aplicación de un campo magnético uniforme y constante.
- El confinamiento de resonancias en puntos cuánticos puede ser aplicado a otros sistemas con estados electrónicos cuyos tiempos de vida media deban ser controlados, como en el caso de excitones atrapados en estructuras semiconductoras.
- Desde el punto de vista teórico no cabe duda sobre cuales son las ventajas de suponer que el comportamiento de un electrón confinado en un hilo cuántico puede ser descrito como unidimensional. Sin embargo, desde el punto de vista experimental hay sistemas que son muy bien descritos como gases de electrones bidimensionales, como los electrones en films delgados de *AsGa*, mientras que con la tecnología actual no se pueden fabricar hilos cuánticos donde la descripción de un electrón pueda ser tomada *a priori* como unidimensional, en particular en el rango de energías y campos propuestos por Tokura. De ahí la necesidad de explorar sistemas bidimensionales.
- Se utilizaron parámetros macroscópicos compatibles con valores experimentales. En particular en el capítulo 4 se encontró que el sistema con confinamiento en una dimensión *y* con  $\omega_y = 5 [meV]$  tenía tiempos cortos de operación y baja pérdida para valores adecuados del forzamiento. Se podría mejorar muchísimo los valores obtenidos por el sistema anterior si la intensidad del gradiente  $b_{sl}$  pudiera ser aumentada entre uno y dos órdenes de magnitud, pero ese parámetro no puede llegar

a ese valor desde el punto de vista experimental.

- A diferencia del sistema que estudió Tokura, en nuestro sistema el campo transversal es lo suficientemente alto como para no ser tratado como una perturbación y pudimos aprovechar este hecho mejorando las condiciones que queríamos para el estado inicial del qubit.
- El control sinusoidal no es el único tipo de control, existen otros que resultan en un mayor control del sistema, un ejemplo es el llamado *control óptimo*. De todas formas, en general, el control óptimo es considerablemente más lento que el sinusoidal cuando éste controla adecuadamente el sistema. Por control óptimo se entiende aquellos métodos que optimizan (maximizan) la fidelidad de transmisión entre un estado de partida y uno de llegada predeterminado.
- A pesar de que el sistema analizado en el capítulo 4 carece de simetrías se pudieron implementar métodos para estudiar sus comportamiento con una precisión bastante satisfactoria.
- Aún en aquellos casos en los cuales la diferencia de energía entre los estados base del qubit es del orden de  $10[\mu eV]$ , los tiempos de operación son del orden del nanosegundo. Disminuir más el tiempo de operación lleva a que haya una inaceptable pérdida de probabilidad hacia otros niveles del sistema, debido a la necesidad de aumentar el forzamiento utilizado. De todas formas, el período de oscilación del sistema es de unos dos ordenes de magnitud más grande que el período que se obtendría de la frecuencia de resonancia calculada con la diferencia de energía entre los niveles base. Es posible, que utilizando otro tipo de forzamiento se obtuvieran tiempos de operación más cortos.

# Apéndice A

## Métodos aproximados para estados estacionarios

El estudio de los sistemas físicos conservativos en Mecánica Cuántica está basado en obtener la solución del problema de autovalores y autovectores de la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, sólo en una pequeña cantidad de problemas es posible resolver la ecuación en forma exacta, con lo cual es indispensable recurrir a métodos alternativos, numéricos, a partir de los cuales seremos capaces de obtener una solución analítica aproximada del problema de autovalores de la ecuación.

### A.1. Método perturbativo

En esta sección vamos a brindar un breve resumen a cerca del método perturbativo de un Hamiltoniano independiente del tiempo. La idea básica de este método consiste en dividir en dos partes al Hamiltoniano, una cuya solución es conocida y otra que será considerada como perturbación. Entonces se trata de relacionar los autovectores y autovalores del Hamiltoniano de interés con los autovalores y autovectores del Hamiltoniano del cuál estos últimos son conocidos.

Los métodos perturbativos son aplicados cuando el Hamiltoniano  $H$ , del sistema que desea ser estudiado, puede escribirse de la siguiente manera:

$$H = H^0 + H^1, \quad (\text{A.1})$$

donde los autovalores y autovectores de  $H^0$  son conocidos (en este trabajo en particular vamos a considerar solamente el caso en el que las autofunciones de  $H_0$  no son degeneradas) y donde  $H^1$  es mucho más pequeño que  $H^0$ . Entonces el problema que queremos resolver es:

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad (\text{A.2})$$

mientras que el problema del que conocemos la solución es:

$$H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0 \quad (\text{A.3})$$

Para obtener una relación entre las autofunciones del sistema perturbado y las del sistema sin perturbar vamos a hacer más explícito que significa que  $H^1$  sea mucho más chico que  $H^0$ . Supondremos que  $H^1$  es proporcional a un parámetro real  $\lambda \ll 1$ , es decir:

$$H^1 = \lambda \hat{H}^1. \quad (\text{A.4})$$

Está claro que  $H$  depende de  $\lambda$ , con lo cual  $\Psi_n$  y  $E_n$  dependen de  $\lambda$  y es posible desarrollarlos en serie de Taylor en potencias de  $\lambda$ :

$$\Psi_n = \Psi_n |_{\lambda=0} + \frac{\partial \Psi_n}{\partial \lambda} |_{\lambda=0} \lambda + \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial \lambda^2} |_{\lambda=0} \frac{\lambda^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.5})$$

$$E_n = E_n |_{\lambda=0} + \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} |_{\lambda=0} \lambda + \frac{\partial^2 E_n}{\partial \lambda^2} |_{\lambda=0} \frac{\lambda^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.6})$$

Ahora si denominamos:

$$\Psi_n^{(k)} = \frac{\partial^k \Psi_n}{\partial \lambda^k} \frac{1}{k!} \quad E_n^{(k)} = \frac{\partial^k E_n}{\partial \lambda^k} \frac{1}{k!} \quad (\text{A.7})$$

obtenemos:

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} \lambda^0 + \Psi_n^{(1)} \lambda^1 + \Psi_n^{(2)} \lambda^2 + \dots \quad (\text{A.8})$$

$$E_n = E_n^{(0)} \lambda^0 + E_n^{(1)} \lambda^1 + E_n^{(2)} \lambda^2 + \dots \quad (\text{A.9})$$

Con lo cual, la función de onda estará formada por la función de onda sin perturbar, más unas correcciones, al igual que la energía. Reemplazando en la ecuación (A.2), agrupando las potencias de  $\lambda$  y luego de hacer uso de sus propiedades [1] resulta que la corrección a primer orden en el caso no degenerado es:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^0 | H^1 | \Psi_n^0 \rangle \quad (\text{A.10})$$

mientras que la corrección a primer orden de la función de onda es:

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n^0 | H^1 | \Psi_m^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \Psi_m^{(0)} \quad (\text{A.11})$$

Finalmente las energías y autofunciones corregidas a primer orden son:

$$E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)}, \quad (\text{A.12})$$

$$\Psi_n \simeq \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)}. \quad (\text{A.13})$$



## A.2. Método variacional de Rayleigh-Ritz

Este Método tiene por objetivo estimar los autovalores de ecuaciones diferenciales ordinarias a partir de argumentos variacionales. Consiste en considerar una combinación lineal de  $N$  funciones linealmente independientes (ortogonales):

$$\Psi = \sum_{i=0}^N c_i \psi_i \quad (\text{A.14})$$

en donde los coeficientes  $c_i$  van a ser determinados de tal manera que la aproximación a los autovalores reales sea óptima y en donde las funciones no son necesariamente ortonormales entre si, con lo cual:

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = s_{i,j} \quad (\text{A.15})$$

En el contexto de la Mecánica Cuántica lo que se quiere es encontrar cotas para las autoenergías correspondientes a un Hamiltoniano,  $H$ , el valor esperado de la energía es:

$$Q = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (\text{A.16})$$

donde:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \sum_{i=0}^N c_i \psi_i \left| \sum_{j=0}^N c_j \psi_j \right. \right\rangle = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N c_i c_j s_{i,j}, \quad (\text{A.17})$$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N c_i c_j H_{i,j}. \quad (\text{A.18})$$

La matriz  $S$  con elementos  $s_{i,j}$  es llamada matriz de solapamiento, la cual se convierte en la matriz identidad si los elementos de la base son ortonormales.

Para obtener estimaciones óptimas de las autoenergías, los coeficientes  $c_i$  deben calcularse a partir de la minimización de  $Q$ . El resultado de esta minimización, la cual hace uso de la hermiticidad del Hamiltoniano, se reduce a resolver el problema de autovalores generalizado del sistema:

$$\sum_{j=0}^N ((H_{i,j} - s_{i,j}Q)c_{i,j}) = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N. \quad (\text{A.19})$$

Entonces tenemos un conjunto de  $N$  ecuaciones con  $N$  incógnitas, las cuales forman un sistema de ecuaciones lineales homogéneo, por ende, para que la solución sea distinta de la trivial, el determinante de los coeficientes de las  $N$  variables debe ser nulo:

$$| H_{i,j} - s_{i,j}Q | = 0 \quad (\text{A.20})$$

El desarrollo del determinante nos proporciona una ecuación algebraica de grado  $N$  en la incógnita  $Q$ , la cual tendrá lógicamente  $N$  raíces (las cuales serán reales por la hermiticidad

de la matriz a la que hace referencia la ecuación (A.20)) que podemos ordenar en forma creciente:

$$Q_0 \leq Q_1 \leq Q_2 \leq \dots \leq Q_{N-1} \quad (\text{A.21})$$

y si enumeramos los estados del sistema en orden de energías crecientes:

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_{n-1} \leq \dots \quad (\text{A.22})$$

podemos afirmar lo siguiente:

$$E_0 \leq Q_0 = \min(\text{autovalor}), \quad (\text{A.23})$$

su correspondiente función de onda es la representada por el autovector (normalizado) del mínimo autovalor. Básicamente, este método consiste en resolver la ecuación de Schörringer en un subespacio generado por el conjunto base. Es por esta razón que si el conjunto de autofunciones tiene las simetrías adecuadas es posible, además que:

$$E_1 \leq Q_1, E_2 \leq Q_2, \dots, E_{n-1} \leq Q_{n-1} \quad (\text{A.24})$$

y en donde cada uno de los correspondientes autovectores del método son aproximaciones a las autofunciones del sistema.

# Bibliografía

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe. *Quantum Mechanics*, Volumen 1. Wiley-VCH editorial (1991).



## Apéndice B

### Algunos elementos de matriz del punto cuántico cilíndrico

Por conveniencia, separamos los elementos de matriz de la energía cinética en dos contribuciones, una corresponde a la coordenada radial

$$\begin{aligned}\langle \psi_n | T_\rho | \psi_s \rangle &= \left\langle \psi_n \left| -\frac{1}{2\mu} \nabla_r^2 \right| \psi_s \right\rangle \\ &= \frac{\eta}{\mu \sqrt{(n+1)(s+1)}} \left( \frac{1}{4} T_1 + \frac{1}{2} (T_2 + T_3) + T_4 \right)\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

y la otra corresponde a la coordenada  $z$ ,

$$\begin{aligned}\langle \phi_t | T_z | \phi_r \rangle &= \left\langle \phi_t \left| -\frac{1}{2\mu} \nabla_z^2 \right| \phi_r \right\rangle \\ &= \frac{\eta}{2\mu \sqrt{(n+1)(s+1)}} \left( \frac{1}{4} T_{1z} + \frac{1}{2} (T_{2z} + T_{3z}) + T_{4z} \right)\end{aligned}\quad (\text{B.2})$$

donde

$$\begin{aligned}T_1 &= (n+1)\delta_{n,s}, \\ T_2 &= \sum_{p=0}^n \sum_{q=0}^{s-1} \frac{(-1)^{p+q} (n+1)! (s+1)! (p+q+1)!}{(n-1-p)! (2+p)! p! (s-q)! (1+q)! q!}, \\ T_3 &= \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{q=0}^s \frac{(-1)^{p+q} (n+1)! (s+1)! (p+q+1)!}{(n-p)! (1+p)! p! (s-1-q)! (2+q)! q!}, \\ T_4 &= \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{q=0}^{s-1} \frac{(-1)^{p+q} (n+1)! (s+1)! (p+q+1)!}{(n-1-p)! (2+p)! p! (s-1-q)! (2+q)! q!}\end{aligned}\quad (\text{B.3})$$

(B.4)

mientras

$$T_{1z} = \delta_{t,r},$$

$$T_{2z} = \sum_{d=0}^t \sum_{f=0}^{r-1} \frac{(-1)^{t+r} t! r! (d+f)!}{(t-d)! (d!)^2 (r-1-f)! (1+f)! f!}, \quad (\text{B.5})$$

$$T_{3z} = \sum_{d=0}^{t-1} \sum_{f=0}^r \frac{(-1)^{t+r} t! r! (d+f)!}{(t-1-d)! (1+d)! (r-f)! (f!)^2},$$

$$T_{4z} = \sum_{d=0}^{t-1} \sum_{f=0}^{r-1} \frac{(-1)^{t+r} t! r! (d+f)!}{(t-1-d)! (1+d)! d! (r-1-f)! (1+f)! f!}. \quad (\text{B.6})$$

$$(\text{B.7})$$

Los elementos de matriz del potencial de confinamiento pueden ser factorizados porque es un potencial separado a trozos y usando el hecho de que la barrera de potencial se encuentra en la dirección  $z$ .

$$\langle \psi_n \phi_t | V(\rho, z) | \psi_s \phi_r \rangle = -V_2 I_{V2} + V_1 I_{V1} \delta_{n,s}, \quad (\text{B.8})$$

El término de barrera es proporcional a  $V_1$ , mientras el término proporcional a  $V_2$  se corresponde con los elementos de matriz del pozo. Los elementos de matriz  $I_{V2}$  e  $I_{V1}$  están dados por

$$I_{V2} = \frac{1}{\sqrt{(n+1)(s+1)}} \sum_{p=0}^n \sum_{q=0}^s \frac{(-1)^{p+q} (n+1)! (s+1)! I_{V21}}{(n-p)! (1+p)! p! (s-q)! (1+q)! q!}$$

$$\times \sum_{d=0}^t \sum_{f=0}^r \frac{(-1)^{d+f} t! r! I_{V22}}{(t-d)! (d!)^2 (r-f)! (f!)^2} \quad (\text{B.9})$$

$$I_{V1} = \frac{1}{\sqrt{(n+1)(s+1)}} \sum_{d=0}^t \sum_{f=0}^r \frac{(-1)^{d+r} t! r! I_{V11}}{(t-d)! (t!)^2 (r-f)! (f!)^2} \quad (\text{B.10})$$

y

$$I_{V21} = (p+q+1)! - e^{-\eta a} \sum_{k=0}^{p+q+1} \frac{(p+q+1)! (a\eta)^{p+q+1-k}}{(p+q+1-k)}, \quad (\text{B.11})$$

$$I_{V22} = (d+f)! - e^{-\nu a/2} \sum_{g=0}^{d+f} \frac{(d+f)!}{(d+f-g)!} \left( \frac{\nu a}{2} \right)^{d+f-g}, \quad (\text{B.12})$$

$$I_{V11} = \sum_{k=0}^{d+f} \frac{(d+f)!}{(d+f-k)!}$$

$$\times \left( e^{-a\nu/2} \left( \frac{a\nu}{2} \right)^{d+f-k} - e^{-\frac{(a+b)\nu}{2}} \left( \frac{(a+b)\nu}{2} \right)^{d+f-k} \right). \quad (\text{B.13})$$

Los elementos de matriz del término de campo magnético es

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | H_c | \psi_s \rangle &= \frac{B^2}{8\mu\eta^2 \sqrt{(n+1)(s+1)}} \\ &\times \sum_{p=0}^n \sum_{q=0}^s \frac{(-1)^{p+q} (n+1)! (s+1)! (p+q+3)!}{(n-p)! (1+p)! p! (s-q)! (1+q)! q!}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

## B.1. Rotación exterior compleja

Como la resonancia se produce en la dirección  $z$ , solamente aplicamos la rotación exterior compleja a los términos de esa dirección.

$$T_\sigma = -\frac{1}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2}$$

Usando que  $z_0 = a + b$ , podemos dividir el problema en dos casos

a)  $z < z_0$ :

tenemos que

$$T_\theta = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\begin{aligned} \langle t | T_\theta | r \rangle &= -\frac{1}{2m^*} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \psi_t^*(\nu |z|) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_r(\nu |z|) dz - 2 \int_{\nu z_0}^{\infty} \psi_t^*(\nu z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_r(\nu z) dz \right) \\ &= T_\infty - T_> \end{aligned}$$

donde hemos definido

$$T_> = -\frac{1}{2m^*} 2 \int_{\nu z_0}^{\infty} \psi_t^*(\nu z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_r(\nu z) dz$$

y  $T_<$  definido por su producto interno (como se definió anteriormente).

Ahora evaluemos el siguiente término

$$\langle t | T_\theta | r \rangle = \frac{1}{2m^*} (\nu^2 I_{zc1} + \nu^2 I_{zc2}).$$

donde

$$\begin{aligned} I_{zc1} &= \frac{1}{4} I_{1z} + \frac{1}{2} (I_{2z} + I_{3z}) + I_{4z} \\ I_{zc2} &= e^{-\nu z_0/2} \mathcal{L}_t^{(0)}(\nu z_0) \left( \frac{1}{2} \mathcal{L}_r^{(0)}(\nu z_0) + \mathcal{L}_{r-1}^{(1)}(\nu z_0) \right) \end{aligned}$$

.Los términos  $I_{iz}$ , con  $i = 1, 2, 3, 4$ , serán expresados a continuación:

$$\begin{aligned} I_{1z} &= \int_0^{\nu z_0} e^{-z} \mathcal{L}_t^{(0)}(z) \mathcal{L}_r^{(0)}(z) dz \\ &= \sum_{d=0}^t \sum_{f=0}^r \frac{(-1)^{d+f} t! r!}{(t-d)! d! (r-f)! f! f!} \int_0^{\nu z_0} e^{-z} z^{d+f} dz \end{aligned}$$

Entonces necesitamos evaluar la integral de la última expresión, la cual resulta

$$Int \equiv \int_0^{\nu z_0} e^{-z} z^{d+f} dz = (d+f)! - \Gamma(d+f+1, \nu z_0)$$

Entonces, en resumen, los términos  $I_{iz}$  resultan

$$\begin{aligned} I_{1z} &= \sum_{d=0}^t \sum_{f=0}^r \frac{(-1)^{d+f} t! r!}{(t-d)! d! (r-f)! f! f!} Int \\ I_{2z} &= \sum_{d=0}^t \sum_{f=0}^{r-1} \frac{(-1)^{d+f} t! r!}{(t-d)! d! (r-1-f)! (f+1)! f!} Int \\ I_{3z} &= \sum_{d=0}^{t-1} \sum_{f=0}^r \frac{(-1)^{d+f} t! r!}{(t-1-d)! (d+1)! d! (r-f)! f! f!} Int \\ I_{4z} &= \sum_{d=0}^{t-1} \sum_{f=0}^{r-1} \frac{(-1)^{d+f} t! r!}{(t-1-d)! (d+1)! d! (r-1-f)! (f+1)! f!} Int \end{aligned}$$

b)  $z > z_0$ :

$$H_\theta = -\frac{1}{2m^*} \left( e^{-2i\theta} \frac{d^2}{dz^2} + (e^{-i\theta} - 1) \delta(z - z_0) e^{-i\theta} \frac{d}{dz} \right)$$

$$\langle t | H_\theta | r \rangle = \frac{1}{m^*} e^{-2i\theta} I_{1z} + \frac{1}{m^*} (e^{-i\theta} - 1) e^{-i\theta} I_{2z}$$

$$\begin{aligned} \langle I_{1z} \rangle &= -\frac{\nu^2}{2} e^{-\nu z_0} \left( \frac{1}{2} \mathcal{L}_t(\nu z_0) + \mathcal{L}_{t-1}^{(1)}(\nu z_0) \right) \mathcal{L}_r(\nu z_0) + \\ &+ \frac{\nu^3}{2} \left( \frac{1}{4} I_{1d2} + \frac{1}{2} I_{2d2} + \frac{1}{2} I_{3d2} + I_{4d2} \right) \end{aligned}$$

$$I_{1d2} = \int_{z_0}^{\infty} \mathcal{L}_t(\nu z) \mathcal{L}_r(\nu z) e^{-\nu z} dz$$

$$I_{2d2} = \int_{z_0}^{\infty} \mathcal{L}_t(\nu z) \mathcal{L}_{r-1}^{(1)}(\nu z) e^{-\nu z} dz$$

$$I_{3d2} = \int_{z_0}^{\infty} \mathcal{L}_{t-1}^{(1)}(\nu z) \mathcal{L}_r(\nu z) e^{-\nu z} dz$$

$$I_{4d2} = \int_{z_0}^{\infty} \mathcal{L}_{t-1}^{(1)}(\nu z) \mathcal{L}_{r-1}^{(1)}(\nu z) e^{-\nu z} dz$$



$$\begin{aligned}
I_{1d2} &= \frac{1}{\nu} \sum_{p=0}^t \sum_{q=0}^r \frac{(-1)^{p+q} t!r!}{(t-p)!p!p!(r-q)!q!q!} \Gamma(p+q+1, \nu z_0) \\
I_{2d2} &= \frac{1}{\nu} \sum_{p=0}^t \sum_{q=0}^{r-1} \frac{(-1)^{p+q} t!r!}{(t-p)!p!p!(r-1-q)!(q+1)!q!} \Gamma(p+q+1, \nu z_0) \\
I_{3d2} &= \frac{1}{\nu} \sum_{p=0}^{t-1} \sum_{q=0}^r \frac{(-1)^{p+q} t!r!}{(t-1-p)!(p+1)!p!(r-q)!q!q!} \Gamma(p+q+1, \nu z_0) \\
I_{4d2} &= \frac{1}{\nu} \sum_{p=0}^{t-1} \sum_{q=0}^{r-1} \frac{(-1)^{p+q} t!r!}{(t-1-p)!(p+1)!p!(r-1-q)!(q+1)!q!} \Gamma(p+q+1, \nu z_0)
\end{aligned}$$

Por otro lado, tenemos el término de la derivada

$$I_2 = -\frac{1}{2} \delta(z - z_0) \frac{d}{dz}$$

$$\begin{aligned}
\langle I_2 \rangle &= -\frac{1}{2} 2 \int_{z_0}^{\infty} \psi_t^*(z) \delta(z - z_0) \frac{\partial \psi_r(z)}{\partial z} dz \\
&= \frac{\nu^2}{2} e^{-\nu z_0} \mathcal{L}_t(\nu z_0) \left( \frac{1}{2} \mathcal{L}_r(\nu z_0) + \mathcal{L}_{r-1}^{(1)}(\nu z_0) \right)
\end{aligned}$$

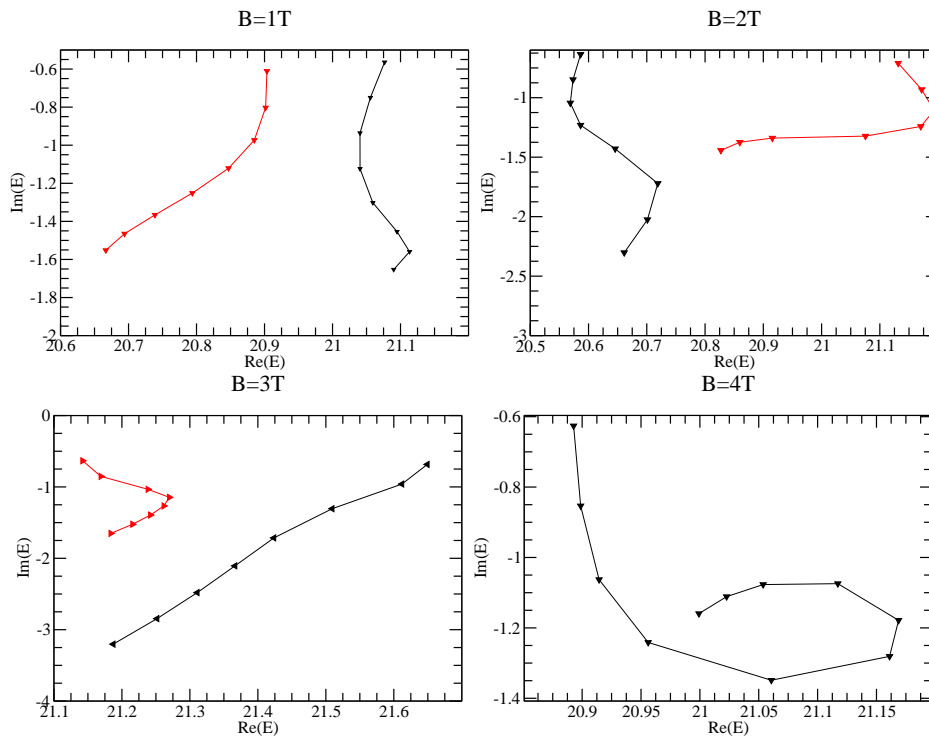


# Apéndice C

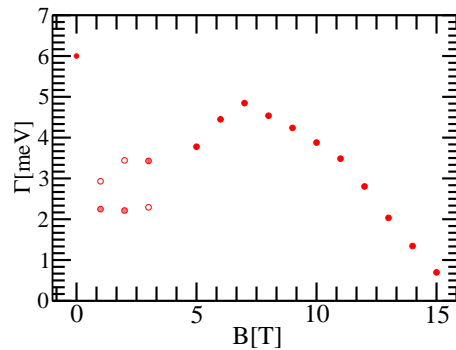
## Trayectorias para $B < 5[T]$ y ancho de resonancia

En este apéndice mostramos los gráficos utilizados para encontrar los valores de la parte real de la energía y el ancho de la resonancia que se muestra en el capítulo 3, para valores del campo que se encuentran entre  $B = 1 [T]$  y  $B = 4 [T]$ .

En la figura C.1 se muestran las trayectorias de  $\theta$  para diferentes valores del campo magnético. Se puede ver que para  $B = 1, 2$  y  $3[T]$  existen dos trayectorias. La parte real de la energía de la resonancia que se muestra en la figura ?? se obtuvo de las trayectorias rojas ( y la negra para  $B = 4 [T]$ ). Mientras que la parte real de la energía de la resonancia obtenida con las trayectorias negras difiere mucho del comportamiento que presenta la parte real de la energía para  $B \geq 5 [T]$  y  $B = 0$ . La figura C.2 muestra los valores del ancho de la resonancia en función del campo magnético. En puntos redondos vacíos se encuentran los valores obtenidos con la figura anterior (C.1), se marcan los puntos obtenidos con ambas trayectorias. Queda claro que ninguno de estos conjuntos de puntos coinciden con el comportamiento del sistema para  $B = 0$ .



**Figura C.1:** Se muestra la (o las) trayectoria (trayectorias)  $\theta$  para diferentes valores del campo magnético. El panel superior izquierdo muestra la trayectoria para  $B = 1 [T]$ , el superior derecho para  $B = 2 [T]$ , el inferior izquierdo para  $B = 3 [T]$  y el inferior derecho para  $B = 4 T$ . Se puede ver que para los tres campos más bajos hay dos trayectorias.



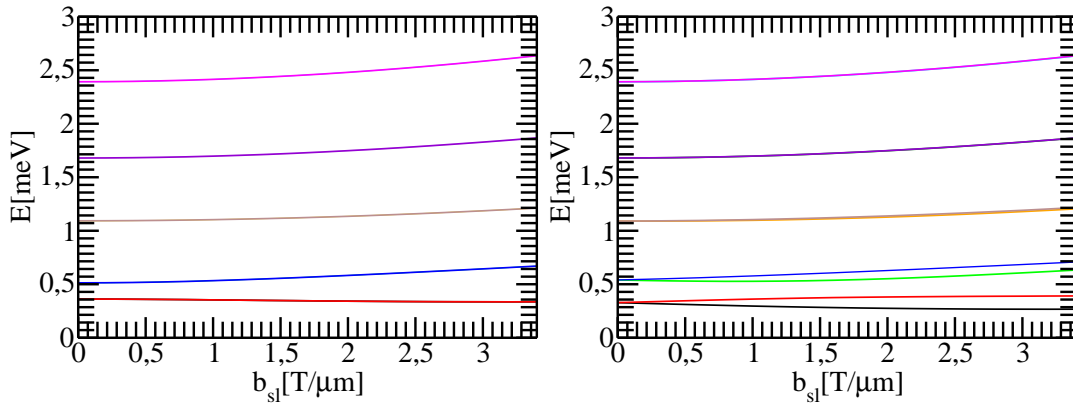
**Figura C.2:** Se muestra el ancho de la resonancia en función del campo magnético  $B$ . Cada punto se obtuvo con el método de rotación exterior compleja. Los puntos rojos vacíos se obtuvieron con el método mostrado en la sección 3.3. Con ese criterio se construyeron las trayectorias que se muestran en la figura C.1.

# Apéndice D

## Algunos gráficos extra del punto cuántico híbrido

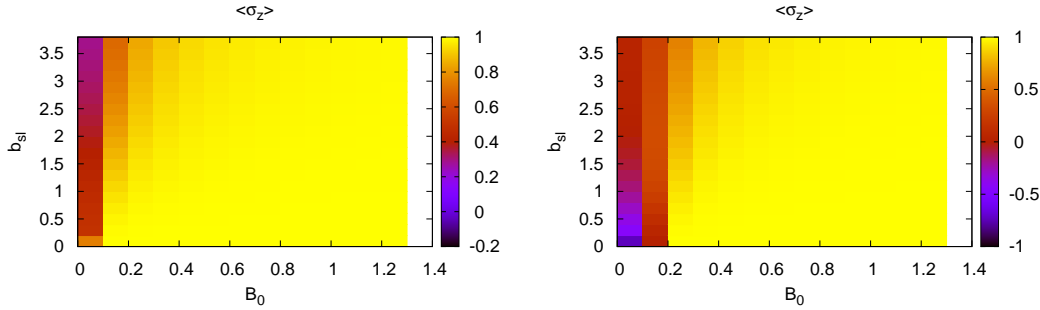
En este apéndice mostramos las figuras que utilizamos en el capítulo 4 que utilizamos para algunas conclusiones que se expusieron en el mismo.

### D.1. Problema unidimensional



**Figura D.1:** Se muestra la energía en función del campo gradiente  $b_{sl}$ . En el panel izquierdo el primero el campo magnético constante es nulo y el potencial es simétrico. El derecho cambia respecto al izquierdo en que se le agrega un término de asimetría al potencial  $\gamma = 0,1$ .

En la figura D.2 tanto el estado fundamental como el primer excitado tienen autovalor 1, excepto para  $B_0$  entre  $[0 : 0,1][T]$  y  $b_{sl}$  entre  $[0 : 1][T/\mu m]$  en donde el primer estado excitado es autoestado de  $\sigma_z$  con autovalor  $-1$ , mientras que si se va aumentando el valor de  $b_{sl}$  en el mismo rango de valores de  $B_0$ , se cambian los roles.

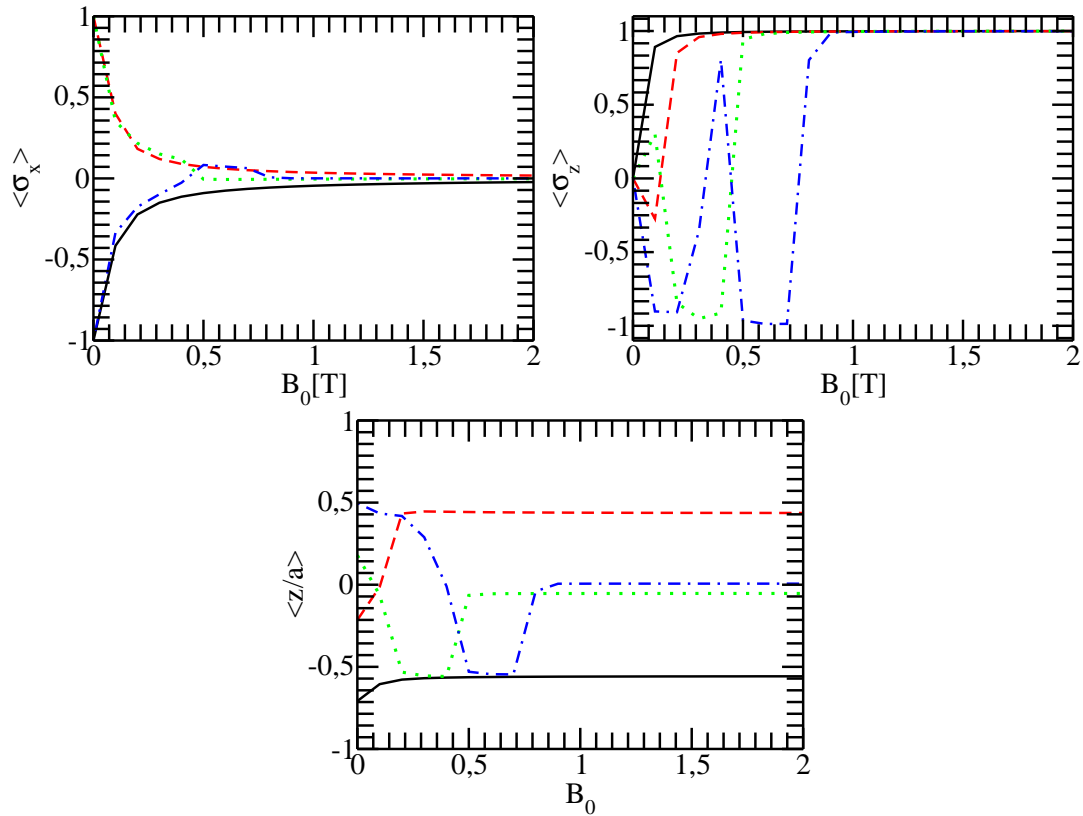


**Figura D.2:** Estos gráficos muestran los valores de expectación de  $\sigma_z$  en diagrama de colores, en función del campo gradiente  $b_{sl}$  en el eje  $y$  y del campo magnético constante  $B_0$  en el eje  $x$ . En el gráfico de la izquierda se encuentra el valor de expectación asociado al estado fundamental y en el izquierdo el asociado al primer estado excitado. Notemos que el aumento de  $B_0$  hace que tengamos auto-estados de  $\sigma_z$  con autovalor 1 tanto para el estado fundamental como para primer estado excitado sin importar el valor de  $b_{sl}$ .

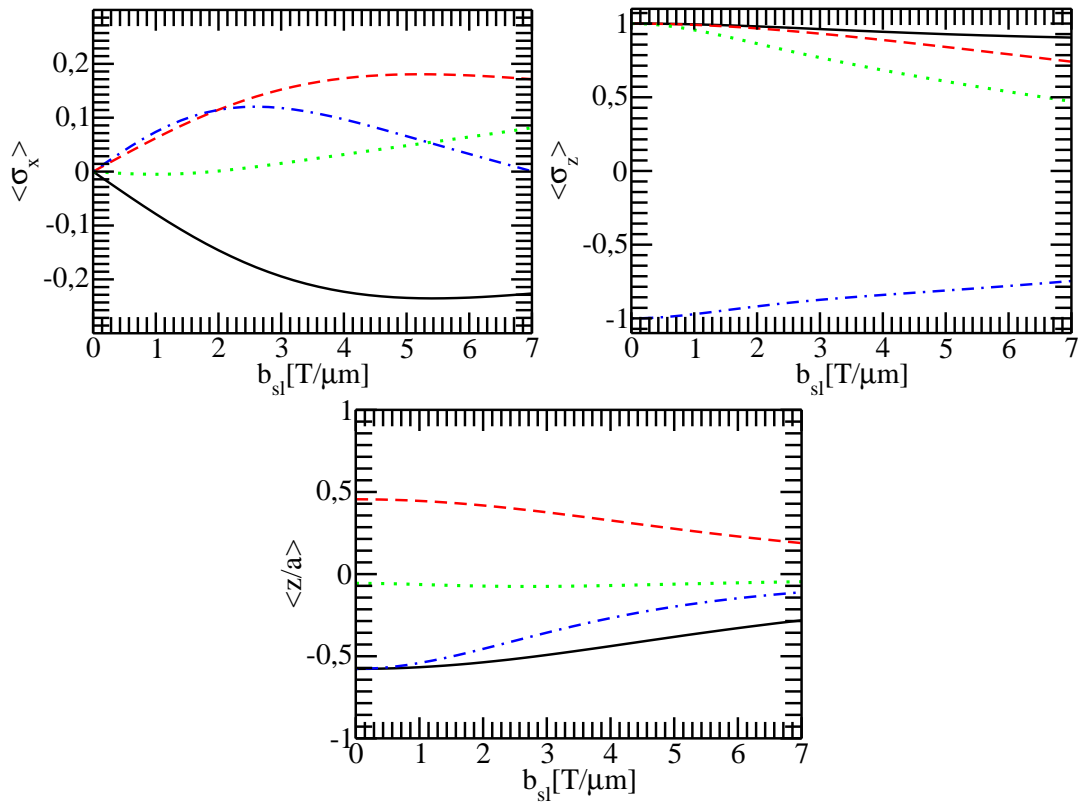
En la figura D.4 pasa que a medida que aumenta el valor de  $b_{sl}$ , aumenta la probabilidad de que los estados fundamental y primer excitado sean autoestados de  $\sigma_x$ , hasta  $b_{sl} \approx 5 [T/\mu m]$ , en donde se mantiene estable hasta  $6 [T/\mu m]$  en donde la probabilidad deja de ser monótonamente creciente (o decreciente para el primer estado excitado), para empezar a decrecer (o crecer), es decir, dentro de este rango de valores encontramos un límite para el valor de expectación de  $\sigma_x$ . respecto al segundo y tercer estado excitado, el cambio entre crecimiento se realiza mucho antes,  $b_{sl} \approx 1 [T/\mu m]$  para el segundo estado y  $b_{sl} \approx 2,5 [T/\mu m]$  para el tercero. A pesar que disminuye el valor de expectación de  $\sigma_x$  no aumenta el valor de expectación de  $\sigma_z$  (ya no son auto-estados ni se  $\sigma_x$  ni de  $\sigma_z$  sino de una combinación de ambos) (?). Por otra parte se ve que los estados se alejan cada vez más de los pozos a medida que aumenta el valor de  $b_{sl}$ . Hay que destacar que los valores de expectación de  $z/a$  con respecto al estado fundamental y el primer excitado, se encuentran prácticamente a la misma distancia con respecto a  $z = 0$ , pero en lados opuestos a pesar de que cambie el valor de  $b_{sl}$ . Observando nuevamente la figura (D.3), vemos que es  $B_0$  el principal responsable de este comportamiento. También lo podemos deducir recordando que en el Hamiltoniano el término que tiene  $\omega_c$  desdobra los niveles de energía y no es una corrección a segundo orden.

## D.2. Bidimensional

## D.3. Bidimensional confinado en $y$

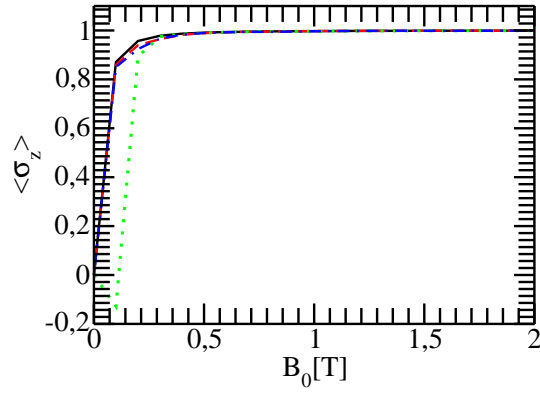


**Figura D.3:** Se muestran los valores de expectación en función de  $B_0$  [T] con  $b_s l = 1,16$  [T/ $\mu\text{m}$ ]. En línea negra continua se muestran los valores de expectación para el estado fundamental, en línea roja entrecortada los del primer estado excitado, en verde punteadas las del segundo estado excitado y en azul de punto y línea los del tercer estado excitado. A medida que aumenta  $B_0$ , los estados se convierten en autestados de  $\sigma_z$ , lo cual es razonable porque los espines intentan alinearse con el campo. Los auto-estados no se encuentran centrado en los pozos, sino en  $a/2$  y  $-a/2$  para el estado fundamental y primer excitado respectivamente, mientras que los dos siguientes se encuentran en  $z = 0$ .

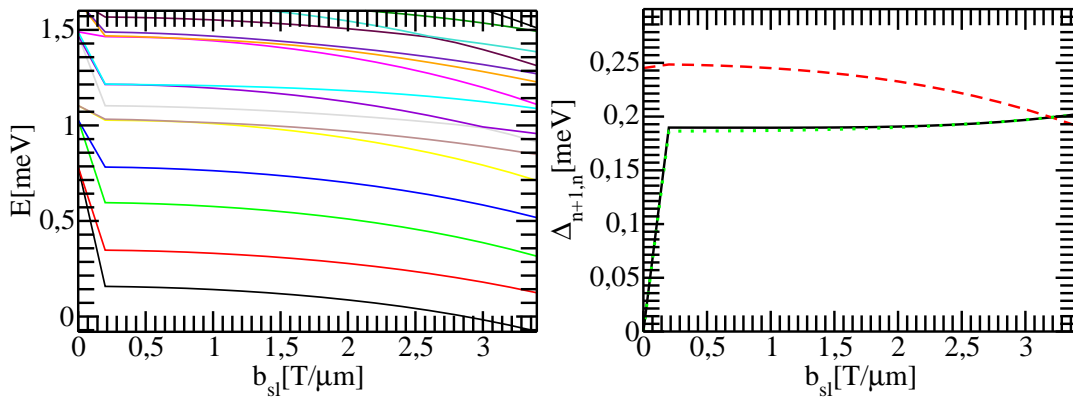


**Figura D.4:** Se muestran los valores de expectación en función de  $b_{sl} [T/\mu m]$  a  $B_0 = 0,5 [T]$  fijo. Los diferentes tipos de líneas y colores se corresponden a valores de expectación para diferentes estados. Se muestran los primeros cuatro, en línea negra continua el fundamental, roja entrecortada el primer excitado, verde punteada el segundo y en azul punto y raya, el tercero. Se ve que a medida que aumenta el valor de  $b_{sl}$ , los estados aumentan su valor de expectación respecto a  $\sigma_x$  y disminuyen la de  $\sigma_z$ , en acuerdo con su rol en el Hamiltoniano,  $\omega_{sl}$  es un factor que acompaña a  $\sigma_x$  y  $\omega_c$  lo hace equivalentemente con  $\sigma_z$ , mientras que el valor de expectación de  $z/a$  tiende a cero cuando aumenta  $b_{sl}$ .

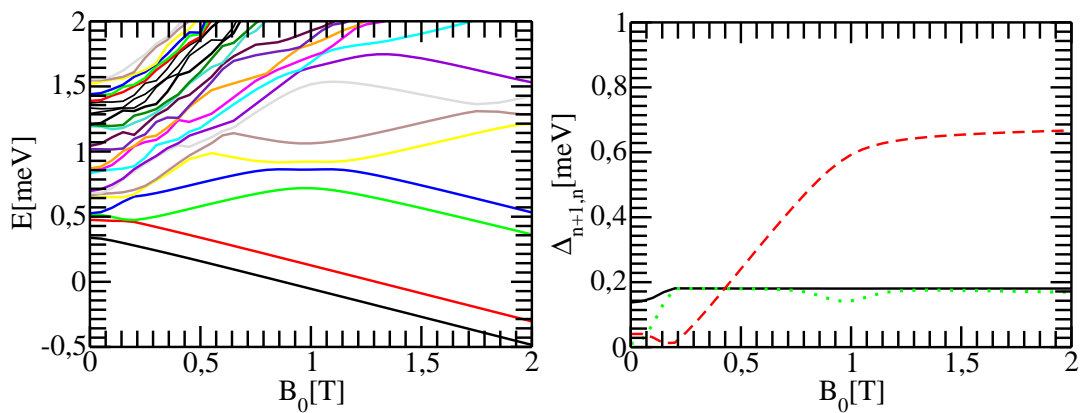




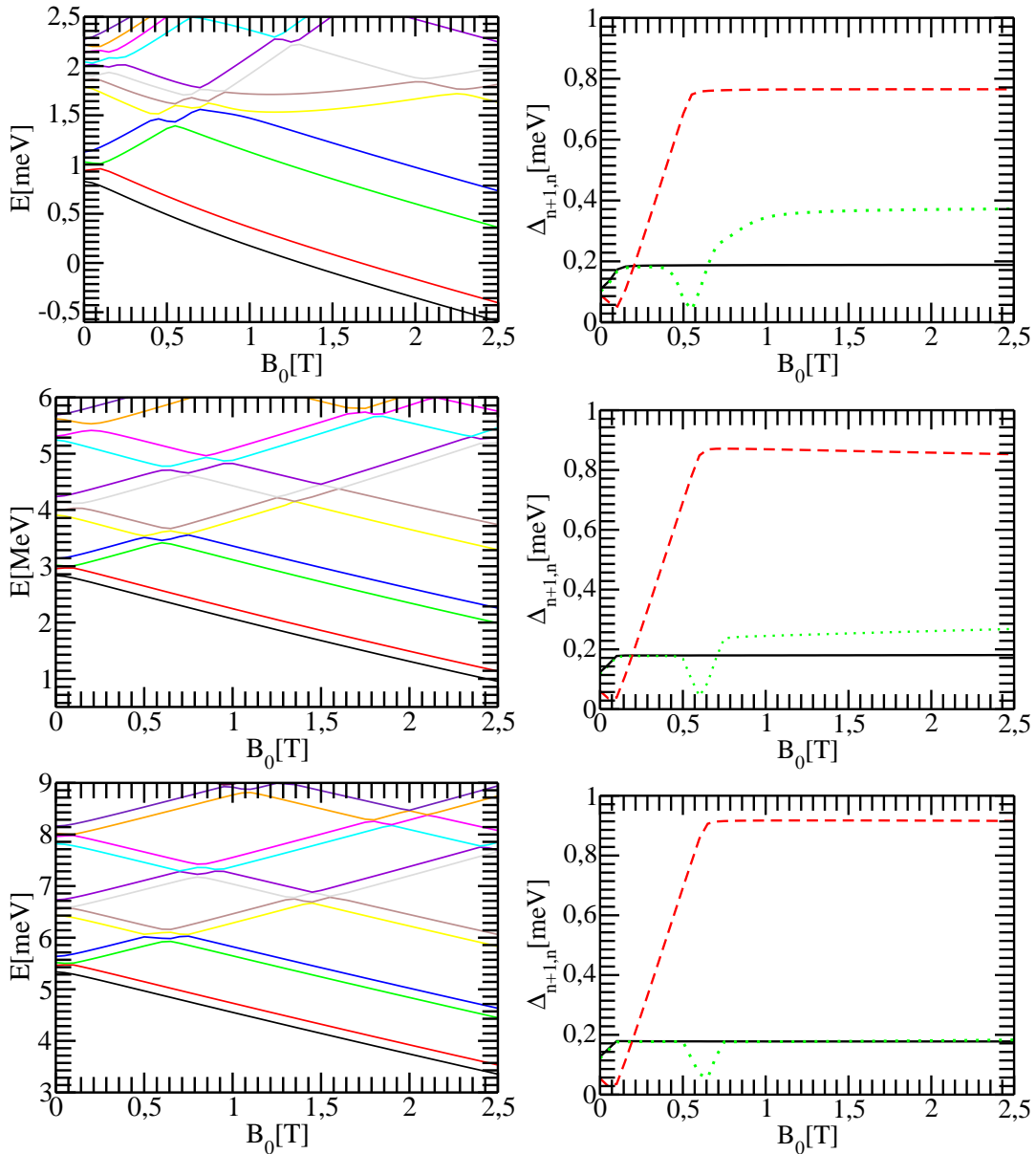
**Figura D.5:** Se muestran el valor de expectación de  $\sigma_z$  en función de  $B_0[T]$  para  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$ , para  $a = 70[nm]$ ,  $\hbar\omega_0 = 1[meV]$ ,  $\gamma = 0,1$ .



**Figura D.6:** Espectro en función de  $B_0$  para  $b_{sl} = 1,16[T/\mu m]$  fijo. En el panel izquierdo se observa energía y en el derecho la diferencia entre energías sucesivas.



**Figura D.7:** Estos gráficos se realizaron para una separación entre los pozos de  $a = 100$  [nm] a  $b_{sl} = 1,16$  [T/ $\mu$ m] fijo. En el gráfico de la izquierda se muestra la energía en función del campo  $B_0$  [T] y en el de la derecha se muestran las diferencias entre energías sucesivas.



**Figura D.8:** En estos gráficos de izquierda se muestra la energía en función del campo magnético  $B_0$  para  $b_{st} = 1,16 [T/\mu m]$ ,  $\gamma = 0,1$ ,  $a = 70 [nm]$  y  $\hbar\omega_0 = 1 [meV]$ . En los gráficos de la derecha se muestra las diferencias de energía entre energías consecutivas, en línea negra continua se muestra  $E_1 - E_0$ , en línea entrecortada roja  $E_2 - E_1$  y en verde punteada  $E_3 - E_2$ . En los gráficos superiores  $\omega_y = 1 [meV]$ , en los centrales  $\omega_y = 5 [meV]$  y en los inferiores  $\omega_y = 10 [meV]$ . En los gráficos de la derecha se puede ver como crece la energía cuando aumenta el valor de  $\omega_y$  mientras que en los de la izquierda se ve que la física del sistema es muy parecida.



# Apéndice E

## Reducción del problema generalizado al problema estándar

Consideremos que nuestro problema tiene la forma matricial

$$\mathbf{K}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{M}\mathbf{v}. \quad (\text{E.1})$$

Este es el problema generalizado ya que tiene en cuenta la matriz  $\mathbf{M}$ , en principio distinta de la identidad, en el segundo miembro de la igualdad. Nuestro objetivo es reducir el problema generalizado a una ecuación de autovalores convencional de la forma

$$\mathbf{A}^*\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}, \quad (\text{E.2})$$

que es el problema de autovalores convencional.

1) Consideremos primero el caso en que la matriz  $\mathbf{M}$  es invertible. En esta situación, podemos definir la matriz

$$\mathbf{A}^* := \mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}. \quad (\text{E.3})$$

Aunque  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{K}$  sean matrices simétricas,  $\mathbf{A}^*$  puede no serlo. La condición para que  $\mathbf{A}^*$  resulte simétrica es que  $\mathbf{M}^{-1}$  y  $\mathbf{K}$  conmuten.

2) Consideremos ahora la situación en que tanto  $\mathbf{K}$  como  $\mathbf{M}$  son matrices simétricas y adicionalmente  $\mathbf{M}$  es definida positiva. Entonces, la descomposición de Cholesky resulta  $\mathbf{M} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ , con lo cual

$$\mathbf{K}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{L}\mathbf{L}^T\mathbf{v}. \quad (\text{E.4})$$

Entonces,

$$\underbrace{\mathbf{L}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{L}^{-T}}_{\mathbf{A}^*} \underbrace{\mathbf{L}^T\mathbf{v}}_{\mathbf{v}^*} = \lambda \underbrace{\mathbf{L}^T\mathbf{v}}_{\mathbf{v}^*}. \quad (\text{E.5})$$

Con las definiciones de la ecuación anterior, finalmente obtenemos el problema estándar

$$\mathbf{A}^*\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}.$$



# Apéndice F

## Elementos de matriz e integrales conocidas que se usaron para resolver el problema del punto cuántico híbrido

Los siguientes términos los calculamos haciendo uso de los operadores creación y aniquilación de un sistema desplazado en  $a$  y  $-a$ .

Sea

$$\langle x | n; \pm a \rangle = \mathcal{N}_n H_n(\eta(x \pm a)) e^{-\eta^2(x \mp a)^2/2} \quad (\text{F.1})$$

### F.1. Términos diagonales

$$\langle ma | x | na \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\eta} \left( \sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right) + a\delta_{m,n} \quad (\text{F.2})$$

$$\langle ma | x^2 | na \rangle = \frac{1}{2\eta^2} \left( \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} \right) \quad (\text{F.3})$$

$$\frac{\sqrt{2}}{\eta} a \left( \sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right) + a^2\delta_{m,n} \quad (\text{F.4})$$

Término cuártico

$$x^4 | na \rangle = \frac{1}{4\eta^4} \{1\} + \frac{1}{2\eta^2} \{2\} + \{3\} + \frac{1}{2\eta^2} \{4\} \quad (\text{F.5})$$

donde

$$\{1\} = \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} |n+4; a\rangle + (4n+6) \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2; a\rangle \quad (\text{F.6})$$

$$+ (6n^2 + 6n + 3) |n; a\rangle + (4n-6) \sqrt{n(n-1)} |n-2; a\rangle + \quad (\text{F.7})$$

$$\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} |n-4; a\rangle \quad (\text{F.8})$$

definiendo

$$\alpha = \frac{\sqrt{2}}{\eta} a \quad (\text{F.9})$$

$$\{2\} = \alpha \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} |n+3; a\rangle + a^2 \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2; a\rangle + \quad (\text{F.10})$$

$$\alpha (3n+3) \sqrt{(n+1)} |n+1; a\rangle + a^2 (2n+1) |n; a\rangle + \quad (\text{F.11})$$

$$\alpha 3n \sqrt{n} |n-1; a\rangle + a^2 \sqrt{n(n-1)} |n-2; a\rangle + \alpha \sqrt{n(n-1)(n-2)} |n-3; a\rangle \quad (\text{F.12})$$

el tercer termino es

$$\{3\} = \frac{2a^2}{\eta^2} \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2; a\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{\eta} a^3 \sqrt{(n+1)} |n+1; a\rangle + \quad (\text{F.13})$$

$$\left( \frac{2a^2}{\eta^2} (2n+1) + a^4 \right) |n; a\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{\eta} a^3 \sqrt{n} |n-1; a\rangle + \frac{2a^2}{\eta^2} \sqrt{n(n-1)} |n-2; a\rangle \quad (\text{F.14})$$

y asi llegamos al cuarto termino:

$$\{4\} = 2 \quad (\text{F.15})$$

## F.2. Términos no diagonales

$$\langle m; -a | x | n; a \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\eta} \left( \sqrt{n} \langle m; -a | n-1; a \rangle + \sqrt{n+1} \langle m; -a | n+1; a \rangle \right) + a \langle m; -a | n; a \rangle \quad (\text{F.16})$$

Término cuadrático

$$\begin{aligned} \langle m; -a | x^2 | n; -a \rangle &= \frac{1}{2\eta^2} \left( \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + (2n+1) \delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \right) \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}}{\eta} a \left( \sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \right) + a^2 \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

Termino cuartico

{1} es igual y {3}, {2} cambia el signo

$$\begin{aligned} \langle m; -a | x^4 | n; -a \rangle &= \frac{1}{4\eta^4} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \delta_{m,n+4} - \frac{\sqrt{2}a}{\eta^3} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \delta_{m,n+3} \\ &\quad + \left( \frac{4n+6}{4\eta^4} + 3\frac{a^2}{\eta^2} \right) \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} - \left( \frac{3n+3}{\eta^2} + 2a^2 \right) \frac{\sqrt{2}a}{\eta} \sqrt{(n+1)} \delta_{m,n+1} \\ &\quad + \left( \frac{1}{4\eta^4} (6n^2 + 6n + 3) + 3\frac{a^2}{\eta^2} (2n+1) + a^4 \right) \delta_{m,n} - \left( \frac{3n}{\eta^2} + 2a^2 \right) \frac{\sqrt{2}na}{\eta} \delta_{m,n-1} \\ &\quad + \left( \frac{2n-1}{2\eta^4} + \frac{a^2}{\eta^2} \right) \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + \\ &\quad \frac{\sqrt{2}a}{\eta^3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{m,n-3} + \frac{1}{4\eta^4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{m,n-4} \end{aligned} \quad (\text{F.18})$$



### F.3. Momento

$$\langle m; \pm a | p | n; \pm a \rangle = \frac{\eta}{\sqrt{2}i} \left( \sqrt{n} \delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \right) \quad (\text{F.19})$$

$$\langle m; \mp a | p | n; \pm a \rangle = \frac{\eta}{\sqrt{2}i} \left( \sqrt{n} \langle m; \mp a | n-1; \pm a \rangle - \sqrt{n+1} \langle m; \mp a | n+1; \pm a \rangle \right) \quad (\text{F.20})$$

Momento al cuadrado

$$\langle m; \pm a | p^2 | n; \pm a \rangle = -\frac{\eta^2}{2} \left( \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} - (2n+1) \delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \right) \quad (\text{F.21})$$

$$\begin{aligned} \langle m; \mp a | p^2 | n; \pm a \rangle &= -\frac{\eta^2}{2} \left( \sqrt{n(n-1)} \langle m; \mp a | n-2; \pm a \rangle - (2n+1) \langle m; \mp a | n; \pm a \rangle + \right. \\ &\quad \left. \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle m; \mp a | n+2; \pm a \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{F.22})$$

### F.4. Integrales

Las integrales que nos quedan por calcular son:

$$\langle m; a | n; -a \rangle = C_m^+ C_n^- \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\eta(x-a)) H_n(\eta(x+a)) e^{-\eta^2[(x-a)^2+(x+a)^2]/2} dx \quad (\text{F.23})$$

Resolvamos primero:

$$\begin{aligned} (x-a)^2 + (x+a)^2 &= x^2 - 2ax + a^2 + x^2 + 2ax + a^2 \\ &= 2x^2 + 2a^2 \\ &= 2(x^2 + a^2), \end{aligned} \quad (\text{F.24})$$

reemplazando en (F.23)

$$\langle m; a | n; -a \rangle = C_m^+ C_n^- \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\eta(x-a)) H_n(\eta(x+a)) e^{-\eta^2[x^2+a^2]} dx. \quad (\text{F.25})$$

Realicemos ahora un cambio de variable, sea  $u = \eta x$  entonces  $du = dx\eta$  con lo cual nos queda:

$$\langle m; a | n; -a \rangle = \frac{C_m^+ C_n^-}{\eta} e^{\eta^2 a^2} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(u - \eta a) H_n(u + \eta a) e^{-u^2} du. \quad (\text{F.26})$$

De [1] pág. 804:

$$\int_e^{-x^2} H_m(x+y)H_n(x+z)dx = 2^n \sqrt{\pi} m! z^{n-m} L_m^{n-m}(-2xy), \quad (\text{F.27})$$

para  $[m \leq n]$ . Y de [2] pág. 841:

$$L_n^k(x) = \sum_{p=0}^n \frac{(-1)^p (n+k)! x^p}{(n-p)! (k+p)! p!}, \quad k > -1. \quad (\text{F.28})$$

■ Para  $[m \leq n]$ :

$$\langle m; a|n; -a \rangle = e^{-\eta^2 a^2} \sqrt{2^{n-m} m! n!} \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^p 2^p (\eta a)^{n-m+2p}}{(m-p)! (n-m+p)! p!} \quad (\text{F.29})$$

■ Para  $[n \leq m]$ :

$$\langle m; a|n; -a \rangle = e^{-\eta^2 a^2} \sqrt{2^{m-n} m! n!} \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^{p+m-n} 2^p (\eta a)^{m-n+2p}}{(n-p)! (m-n+p)! p!} \quad (\text{F.30})$$

# Bibliografía

- [1] I. S. Gradshteyn. *Table of Integrals, Series and Products*. Elsevier, seventh edition (2007).
- [2] G. B. Arfken y H. J. Weber *Method Mathematical of Physics*. Elsevier, firts edition (2005).



# Apéndice G

## Transformando una matriz Hermitiana a una matriz simétrica

Si  $\mathbf{C} = \mathbf{A} + i\mathbf{B}$  es una matriz Hermitiana, entonces el problema de autovalores complejos  $n \times n$

$$(\mathbf{A} + i\mathbf{B}) \cdot (\mathbf{u} + i\mathbf{v}) = \lambda (\mathbf{u} + i\mathbf{v}) \quad (\text{G.1})$$

es equivalente al problema real  $2n \times 2n$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & -\mathbf{B} \\ \mathbf{B} & \mathbf{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} \quad (\text{G.2})$$

Nótese que la matriz  $2n \times 2n$  en la ecuación anterior es simétrica:  $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}^T = -\mathbf{B}$  si  $\mathbf{C}$  es Hermitiana.

En correspondencia con el autovalor dado  $\lambda$ , el vector

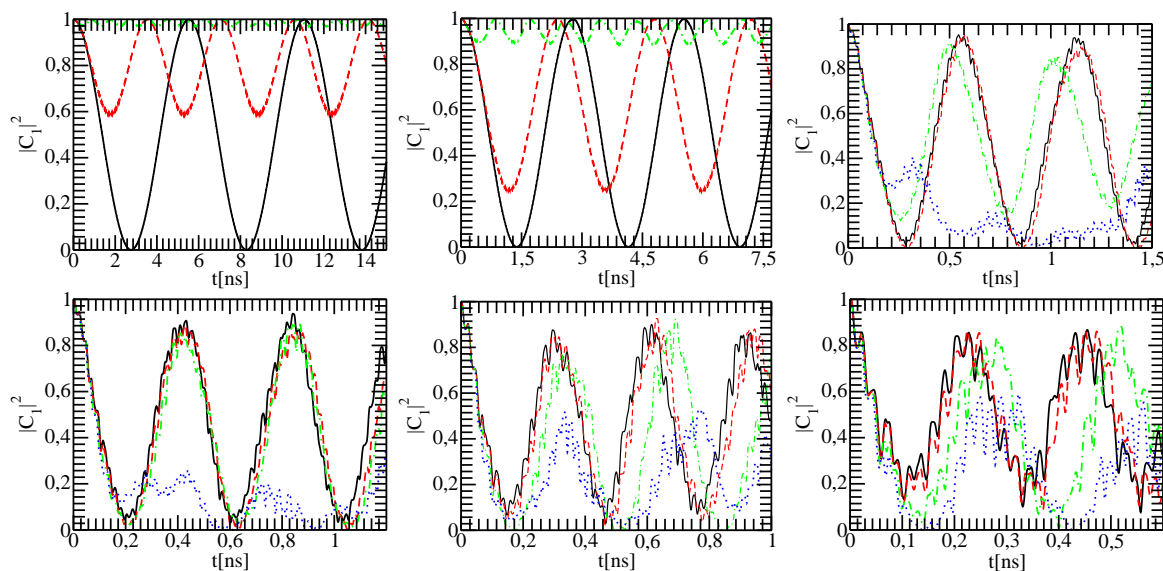
$$\begin{bmatrix} -\mathbf{v} \\ \mathbf{u} \end{bmatrix} \quad (\text{G.3})$$

también es un autovector, como se puede verificar al escribir las dos ecuaciones matriciales que resultan de la ecuación G.2. Por lo tanto, si  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  son los autovalores de  $\mathbf{C}$ , luego los  $2n$  autovalores del problema ampliado G.2 son  $\lambda_1, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \lambda_n$ , en otras palabras, se repiten dos veces. Los autovectores son pares de la forma  $(\mathbf{u} + i\mathbf{v})$  y  $i(\mathbf{u} + i\mathbf{v})$ ; es decir, son lo mismo salvo por una fase trivial. Por tanto, resolvemos el problema ampliado G.2 y elegimos un autovalor y un autovector de cada par. Estos corresponden a los autovalores y autovectores de la matriz original  $\mathbf{C}$ .

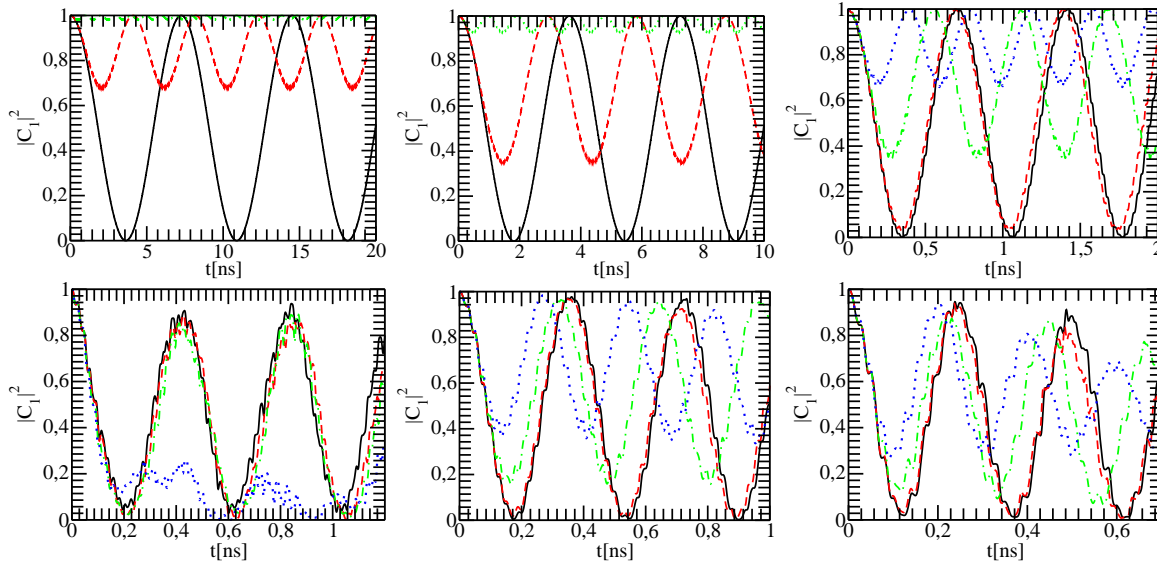


## Apéndice H

### Algunos gráficos extra asociados a la dinámica del punto cuántico híbrido

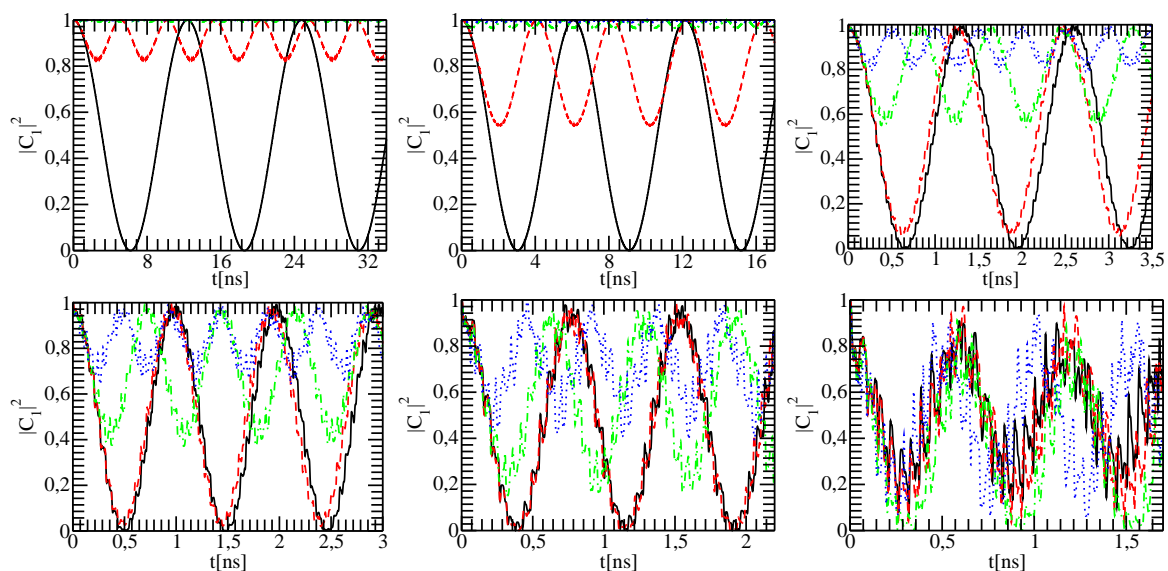


**Figura H.1:** Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t$  [ns], para S1. En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.

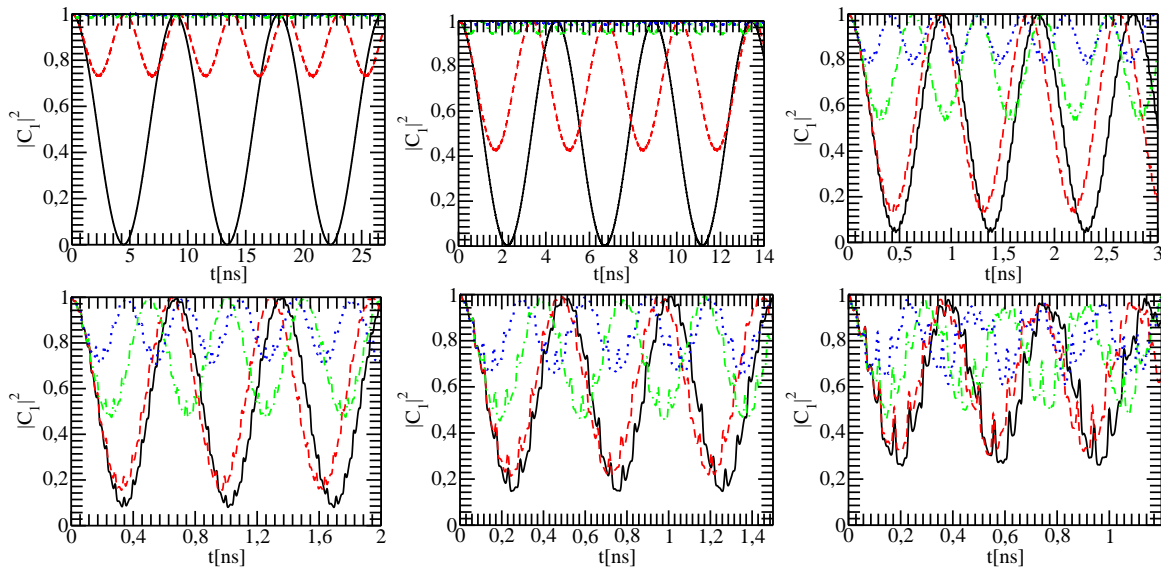


**Figura H.2:** Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t$  [ns], para  $S_2$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.

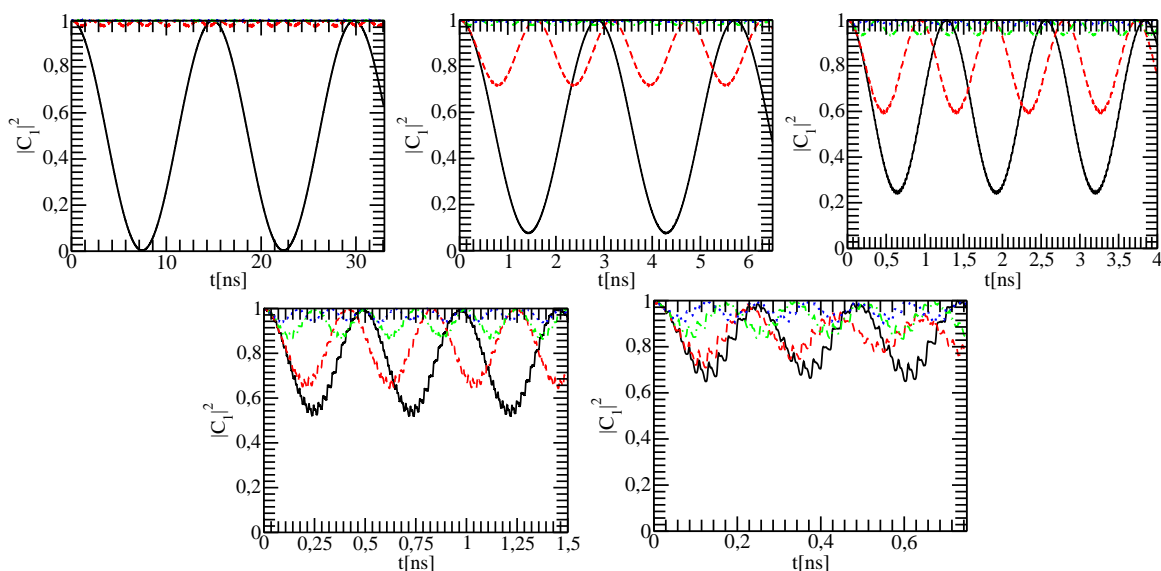




**Figura H.3:** Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para S3. En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.



**Figura H.4:** Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[\text{ns}]$ , para  $S_4$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,005$ , el central con  $A_0 = 0,01$ , el de la derecha  $A_0 = 0,05$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,7$ , el central  $A_0 = 0,1$  y el derecho  $A_0 = 1,5$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%.



**Figura H.5:** Probabilidad de encontrar al electrón en el estado 1,  $|C_1|^2$  en función del  $t[ns]$ , para  $S5$ . En el panel superior izquierdo el forzamiento es de  $A_0 = 0,01$ , el central con  $A_0 = 0,05$ , el de la derecha  $A_0 = 0,1$  y el inferior izquierdo  $A_0 = 0,2$  y el derecho  $A_0 = 0,3$ . En línea negra continua se muestra que la frecuencia  $\omega$  coincide con la frecuencia de resonancia, en rojo entrecortado la frecuencia difiere un 1%, en verde punto y raya la frecuencia difiere un 5% y en azul punteado difiere un 10%..

