



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación



UNC

Universidad  
Nacional  
de Córdoba

# Estudio de propiedades de sistemas de pocos cuerpos usando medidas de información: Sistemas de dos cuerpos y nanoestructuras semiconductoras.

por

**Natalia Agustina Giovenale**

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

Julio 2022

Director: Dr. Omar Osenda

## Tribunal Especial

### *Titulares:*

Dra. Ana Paula Majtey (FAMAF)

Dr. Raúl Alberto Bustos Marun (FCQ - UNC)

Dr. Alejandro Ferron (FACENA - UNNE)

### *Suplentes:*

Dra. Ana Karina CHATTAH (FAMAF)

Dr. Federico Hernán HOLIK (IFLP - UNLP)



Esta obra está bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).



# Resumen

Los avances tecnológicos logrados en las últimas décadas, y la aspiración a producir dispositivos que funcionen en el régimen cuántico para aprovechar sus novedosas propiedades, impulsan el estudio de determinados estados cuánticos. Una posible caracterización de los mismos puede llevarse a cabo a partir del estudio de medidas de información cuánticas sobre los mismos, tarea que motivó los trabajos realizados durante esta tesis. La misma puede dividirse en dos partes, donde este problema se aborda desde distintos enfoques.

En la primer parte, estudiamos la entropía de entrelazamiento de von Neumann para superposiciones de estados que son autoestados del Hamiltoniano del sistema y de una componente del momento angular total del mismo. Para poder caracterizar esta entropía en función del parámetro de superposición del estado, estudiamos su comportamiento en sistemas de una y dos partículas con solución exacta o casi-exacta. Logramos generar un criterio que predice la superposición de máxima entropía, mediante el cálculo de medidas entrópicas dependientes únicamente de los estados superpuestos.

La segunda parte se centró en el uso de medidas de información para la caracterización de estados en nanoestructuras semiconductoras. Para ello se estudiaron la estructura de bandas y los estados correspondientes en dos sistemas distintos, mediante el método *k.p.*

Uno de los sistemas consiste en un nanohilo semiconductor, en el cual se genera un punto cuántico mediante la aplicación de un campo electrostático o mediante la combinación de distintos materiales semiconductores dentro de la estructura del nanohilo. En este sistema estudiamos la presencia de resonancias y la posibilidad de ligar estos estados aplicando un campo magnético. Para ello estudiamos la probabilidad de localización de estados en el punto cuántico.

El otro sistema es un pozo cuántico compuesto por HgTe/CdTe, en el régimen invertido en que el sistema presenta estados de borde helicoidales, topológicamente protegidos. Estudiamos la caracterización de los mismos, y su identificación frente al resto de estados del sistema, por medio de distintas entropías: la entropía de espacio real, para distintas biparticiones del espacio de Hilbert del estado, y una entropía definida en este trabajo que logra captar las propiedades que definen a estos estados.



# *Abstract*

The technological advances achieved in the last decades, and the aspiration to produce devices that function in the quantum regime in order to take advantage of their novel properties, have driven the study of certain quantum states. A possible characterization of these states can be achieved from the study of quantum information measurements, task that motivated the work carried out during this thesis. The thesis can be divided into two parts, where this problem is approached from different points of view.

In the first part, we study the von Neumann entanglement entropy for superpositions of states that are eigenstates of the Hamiltonian of the system and of a component of its total angular momentum. In order to characterize this entropy as a function of the superposition parameter, we study its behavior in one- and two-particle systems with exact or near-exact solution. We succeeded in generating a criterion that predicts the maximum entropy superposition, by calculating entropic measures dependent only on the superposed states.

The second part focused on the use of information measures for the characterization of states in semiconductor nanostructures. For this purpose, the band structure and the corresponding states were studied using the  $k.p$  method in two different systems.

One of them consists of a semiconductor nanowire, in which a quantum dot is generated by applying an electrostatic field or by combining different semiconductor materials within the nanowire structure. In this system we study the presence of resonances and the possibility of binding these states by applying a magnetic field. For this we study the probability of localization of states in the quantum dot.

The other system is a HgTe/CdTe quantum well, in the inverted regime in which the system presents topologically protected helical edge states. We study their characterization, and their identification with respect to the rest of the states of the system, by means of different entropies: the real space entropy, for different bipartitions of the Hilbert space of the state, and an entropy defined in this work that manages to capture the properties that define these states.



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Conceptos preliminares</b>	<b>5</b>
2.1. Medidas de Información Cuántica . . . . .	5
2.2. Entrelazamiento y Entropía . . . . .	7
2.2.1. Entrelazamiento . . . . .	7
2.2.2. Entropías de Entrelazamiento . . . . .	8
2.2.3. Entropías como Medida de Información . . . . .	10
2.3. Resonancias . . . . .	12
2.4. Efecto Hall Cuántico de Spin . . . . .	14
<b>3. Propiedades de la entropía de von Neumann de la superposición de estados degenerados</b>	<b>17</b>
3.1. Introducción . . . . .	17
3.2. Criterio para la convexidad de la superposición de estados degenerados del momento angular . . . . .	19
3.3. Testeando el criterio . . . . .	22
3.3.1. Autoestados de dos osciladores armónicos interactuantes . . . . .	22
3.3.2. Autoestados del modelo Spherium . . . . .	27
3.3.3. Estados de Laguerre-Gauss de un fotón . . . . .	29
3.3.4. Autoestados del momento angular total de dos partículas . . . . .	32
3.4. Resumen y Conclusiones . . . . .	35
<b>4. Hamiltonianos multibanda y estructura de bandas en semiconductores</b>	<b>37</b>
4.1. El Método $k.p$ . . . . .	37
4.1.1. Aproximación de Masa Efectiva . . . . .	39
4.1.2. Hamiltoniano de Luttinger-Kohn . . . . .	39
4.1.3. Hamiltoniano de Kane . . . . .	42
4.1.4. Hamiltonianos Efectivos . . . . .	43
4.2. Autoestados del Hamiltoniano $k.p$ . . . . .	46
<b>5. Estudio de la transición entre estados ligados y resonancias en un punto cuántico</b>	<b>49</b>
5.1. Introducción . . . . .	49
5.2. Punto Cuántico inducido Electroestáticamente . . . . .	51
5.2.1. Modelo . . . . .	51
5.2.2. Resultados . . . . .	52
5.3. Punto Cuántico definido por una Heteroestructura . . . . .	56

5.3.1. Modelo . . . . .	56
5.3.2. Resultados . . . . .	57
5.4. Resumen y Conclusiones . . . . .	60
<b>6. Estados de borde helicoidales en pozos cuánticos</b>	<b>63</b>
6.1. Introducción . . . . .	63
6.2. Modelo . . . . .	65
6.3. Estados de un pozo cuántico compuesto por HgTe/CdTe . . . . .	65
6.4. Resultados . . . . .	68
6.4.1. Caracterización de los estados de borde mediante entropías de espacio real	68
6.4.2. Caracterización de los estados de borde mediante la entropía <i>edge</i> . . . . .	72
6.5. Resumen y Conclusiones . . . . .	73
<b>7. Conclusiones generales</b>	<b>77</b>
<b>A. Método variacional de Rayleigh-Ritz</b>	<b>81</b>
<b>B. Cálculos analíticos para dos osciladores armónicos</b>	<b>85</b>
<b>C. Cálculos analíticos para el modelo Spherium</b>	<b>91</b>
<b>D. Parámetros y cálculos auxiliares para los Hamiltonianos <math>k.p</math></b>	<b>95</b>
D.1. Hamiltoniano de Kane y Hamiltoniano efectivo . . . . .	95
D.2. Hamiltoniano de Luttinger-Kohn . . . . .	96
<b>E. Bipartición del espacio de Hilbert utilizando la base <math>k.p</math></b>	<b>101</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>104</b>

# Índice de figuras

2.1. Entropía de von Neumann para el estado $\Psi_p = \sqrt{1-p} \uparrow\downarrow\rangle + \sqrt{p} \downarrow\uparrow\rangle$ en función del parámetro $p$ .	10
2.2. Esquema de las regiones espaciales que definen $S_{topo}$ .	11
2.3. Representación de una resonancia en el espectro de energías.	13
2.4. Representación del efecto Hall.	15
2.5. Representación del efecto Hall Cuántico de Spin.	16
3.1. Entropía de von Neumann para la superposición de autoestados de dos osciladores no interactuantes	24
3.2. Entropía de von Neumann para la superposición de autoestados de dos osciladores interactuantes	26
3.3. Representación del modelo Spherium	27
3.4. Entropía de von Neumann para la superposición de autoestados del Spherium	29
3.5. Perfiles del haz de estados de Laguerre-Gauss	30
3.6. Entropía de von Neumann para la superposición de estados de Laguerre-Gauss	32
3.7. Entropía de von Neumann para la superposición de autoestados del momento angular	33
4.1. Representación de la estructura de bandas del GaAs	40
5.1. Perfil de potencial electrostático para un punto cuántico	52
5.2. Espectro de energía en función de la profundidad del pozo para un punto cuántico electrostático	53
5.3. Espectro de energías en función del alto de las barreras para un punto cuántico electrostático	54
5.4. Espectro de energía, $\Delta E$ y probabilidad de localización en función de $B$ para el punto cuántico electrostático	55
5.5. Representación del nanohilo heteroestructurado para formar un punto cuántico.	57
5.6. Perfil de potencial para el punto cuántico definido por una heteroestructura.	57
5.7. Espectro de energía en función del ancho del núcleo, para un punto cuántico definido por una heteroestructura.	58
5.8. Espectro de energía en función del ancho de las barreras, para el punto cuántico definido por una heteroestructura.	59
5.9. Espectro de energía y probabilidad de localización en función del campo magnético, para el punto cuántico definido por una heteroestructura.	59
6.1. Representación esquemática de un pozo cuántico.	65
6.2. Espectro de <i>bulk</i> de un pozo cuántico infinito.	66

---

6.3. Espectro de los estados de borde de un pozo cuántico finito. . . . .	67
6.4. Espectro de energía y entropía de espacio real, en función de un campo magnético, para un pozo cuántico bidimensional. . . . .	70
6.5. Autoestados y entropía de espacio real en función de $\Delta$ , para estados de <i>bulk</i> y borde de un pozo cuántico. . . . .	71
6.6. Espectro de energía y entropía <i>edge</i> , en función de un campo magnético, para un pozo cuántico bidimensional. . . . .	73
D.1. Funciones <i>B</i> -Spline en función de $k$ . . . . .	97
E.1. Espectro de <i>bulk</i> de un pozo cuántico y entropía de von Neumann en función de $d$ para la bipartición spin/bandas . . . . .	103

# Índice de cuadros

3.1. Curvatura, entropías y $Q_c$ para los osciladores no interactuantes . . . . .	25
3.2. Curvatura, entropías y $Q_c$ para los osciladores interactuantes . . . . .	26
3.3. Curvatura, entropías y $Q_c$ para los estados del Spherium . . . . .	29
3.4. Curvatura, entropías y $Q_c$ para el sistema de fotones . . . . .	32
3.5. Curvatura, entropías y $Q_c$ para los autoestados del momento angular . . . . .	34
D.1. Parámetros del Hamiltoniano de Kane . . . . .	95
D.2. Parámetros del Hamiltoniano efectivo . . . . .	95
D.3. Parámetros del Hamiltoniano LK . . . . .	97
D.4. Energías offset del Hamiltoniano LK . . . . .	97



# Capítulo 1

## Introducción

La Teoría de la Mecánica Cuántica surge en los años '20 a partir de la necesidad de explicar ciertos fenómenos que fueron observados experimentalmente en las décadas anteriores [1]. En la actualidad, si bien una cantidad notable de avances se han logrado en el entendimiento y aplicabilidad de esta teoría, su formulación matemática se encuentra aún en discusión [2], [3]. A pesar de esto, y gracias al estudio de los fundamentos de esta teoría y a los avances tecnológicos de las últimas décadas, existe un vasto entendimiento sobre las propiedades y fenómenos propios del comportamiento cuántico de los sistemas físicos, respaldado en una gran variedad de casos por evidencia experimental. Estos avances derivan en el uso de sistemas físicos en el régimen cuántico para diversas aplicaciones tecnológicas.

Dentro de la Mecánica Cuántica, uno de los campos de estudio es el de la Teoría de la Información Cuántica, rama que se encarga del estudio de la información que un estado cuántico puede almacenar y transmitir, así como del procesamiento de dicha información, aprovechando las ventajas que ofrece trabajar con sistemas cuánticos. El interés en este campo de estudio tiene distintas motivaciones, y con ello distintos enfoques al abordar los objetos de estudio. Desde un punto de vista teórico, su estudio permite un mayor entendimiento de la teoría, mientras que el enfoque experimental tiene injerencia directa en las posibles aplicaciones tecnológicas.

Las aplicaciones prácticas posibilitadas por el avance de la teoría son de variadas índoles. Uno de los aportes tecnológicos más prometedores es la implementación de computadoras que funcionen en un régimen cuántico. Esta idea data de principios de los años '80 [4], y rápidamente desencadenó una creciente cantidad de trabajos sobre las posibilidades teóricas ofrecidas por la cuántica, y su ventaja sobre la computación clásica. La motivación de estos trabajos es clara: contar con estos dispositivos permitiría obtener la solución a problemas que las computadoras clásicas no pueden resolver, ya sea por limitaciones impuestas por la física de los sistemas, como sus capacidades de procesamiento/almacenamiento, o por los elevados tiempos de cálculo que en general requiere una computadora clásica. Otra gran aplicación de los avances realizados en el campo de la información cuántica, es que permiten formular protocolos para optimizar los procesos requeridos en criptografía cuántica [5]. Esto es gracias a la descripción exhaustiva que logra obtenerse de los estados de interés en distintos sistemas, lo cual los hace candidatos a ser utilizados en nuevas propuestas.

Este breve planteo sobre las aplicaciones y motivaciones para el estudio de esta rama de la mecánica cuántica, si bien es solo una parte de todas las posibilidades que la teoría ofrece, da una idea de la importancia del conocimiento y manejo de estados cuánticos. Poder preparar estados con características específicas para cumplir con protocolos de información cuántica - experimentalmente realistas-, y saber en qué configuraciones del sistema estos estados están

presentes, son herramientas fundamentales en los avances que propone la mecánica cuántica para optimizar tareas cotidianas en la actualidad.

La factibilidad experimental de los protocolos propuestos y en investigación crece constantemente, dado que la posibilidad de lograr *supremacía cuántica* genera una gran cantidad de inversiones en desarrollo tecnológico y experimental. Esto conlleva a comprobar experimentalmente propiedades propuestas teóricamente en el pasado, y también posibilita que los conocimientos adquiridos puedan ser utilizados con fines comerciales, disminuyendo el tamaño de los dispositivos, o permitiendo su funcionamiento a mayor escala.

Esta línea de avances se centra también en estudiar propiedades de interés en determinados materiales, explotando las distintas posibilidades que sus configuraciones ofrecen. Por ejemplo, el estudio de nanoestructuras semiconductoras obedece a las consideraciones planteadas anteriormente. Por un lado, disponer de dispositivos en la escala de los nanómetros, y poder controlarlos, es una característica requerida en diversas aplicaciones tecnológicas para incrementar su funcionalidad. Por el otro, los materiales que las componen juegan un rol fundamental en las posibilidades que el dispositivo puede ofrecer. En particular, los materiales semiconductores -y las nanoestructuras fabricadas con ellos- permiten investigar un amplio y variado conjunto de situaciones físicas. Entre las ventajas de estos sistemas se puede remarcar la variabilidad de la estructura de bandas que presentan, que puede modificarse con facilidad en formas muy variadas, presentando cada configuración escenarios notablemente diferentes.

Gran parte de la implementación experimental de los protocolos propuestos en el marco de esta teoría requieren del conocimiento de las propiedades de los estados de distintos sistemas. Mas aún, es necesario poder controlar estos estados y poder predecir, por ejemplo, su comportamiento frente a impurezas en los dispositivos propuestos. Estos conocimientos son fundamentales para cualquier avance tecnológico que podamos prever, y para profundizar en los conocimientos de la mecánica cuántica con los que contamos. Con esto en mente nos planteamos como objetivo utilizar las herramientas que esta teoría ofrece, así como herramientas propuestas de manera *ad hoc*, para aportar a la caracterización de sistemas y estados físicos que actualmente son de gran interés para distintas aplicaciones tecnológicas.

El estudio de medidas de información cuántica requiere del conocimiento de los estados del sistema bajo estudio, y de su espectro que es esencial para identificar distintos estados y regímenes. Gran parte del trabajo realizado se basa en la obtención de esas cantidades, de manera exacta o numérica dependiendo del sistema, y el consecuente cálculo en las matrices densidad reducidas de los estados para obtener una caracterización entrópica de los mismos. Para esto fue necesaria la implementación numérica de diversos códigos que permitan obtener los resultados buscados a partir de los cálculos exactos que cada sistema permita realizar. La mayor parte de los resultados numéricos obtenidos se lograron a partir de la programación en Fortran, y el uso de los programas Matlab y Mathematica. La gran cantidad de sistemas estudiados durante este doctorado implican una gran cantidad de códigos implementados, ya que cada sistema presenta características particulares que el código debe contemplar. Los resultados obtenidos fueron, en su totalidad, el resultado de códigos desarrollados durante el trabajo.

Durante la escritura de esta tesis, buscamos que la misma pueda entenderse sin necesidad de estudiar otros trabajos, sin embargo, la gran cantidad de contenido teórico, numérico y de cálculo involucrado hace esta tarea algo difícil. Es por esto que incluimos dos Capítulos con contenido teórico para poder situar el contexto de los trabajos realizados, con todas las herramientas necesarias para el entendimiento de los sistemas y métodos implicados. Incluimos también una gran cantidad de Apéndices, que contienen el tratamiento matemático o numérico de los trabajos con gran detalle, para garantizar el entendimiento y la posible reproducción de los cálculos teóricos y numéricos involucrados. Los Capítulos correspondientes a los sistemas estudiados y los resultados obtenidos contienen toda la información necesaria de los sistemas: introducción al

---

problema, motivación, modelos y métodos de estudio, resultados y conclusiones.

A continuación, la estructura de la Tesis y los contenidos de cada Capítulo.

El Capítulo 2 contiene la descripción teórica de los principales actores en este trabajo: las medidas de información cuántica y los estados estudiados a partir de estas cantidades. Las medidas de información cuántica son cantidades que se obtienen a partir de los estados del sistema, y que dan información de distintas características de los mismos. En este Capítulo definimos estas cantidades, y nos centramos en una de ellas: la entropía de entrelazamiento de von Neumann. Estudiamos además como distintas entropías puede utilizarse como medidas de información. En cuanto a los estados presentados en este Capítulo, incluimos a las resonancias, estados metaestables presentes en algunos sistemas, y a los estados del Efecto Hall Cuántico de Spin, responsables de las propiedades de conducción en pozos cuánticos semiconductores. Estos estados son el objeto de estudio de una parte del trabajo realizado.

El Capítulo 3 se centra en el estudio de las propiedades de la entropía de von Neumann de la superposición de estados degenerados. A partir de la sospecha de que la entropía de von Neumann es una función convexa del parámetro de superposición de dos estados degenerados, abordamos el estudio de la misma para distintos sistemas. Para acotar las posibilidades, consideramos estados que sean autoestados tanto del Hamiltoniano como de algún grado de libertad del mismo, y consideramos sistemas con solución exacta o casi-exacta para lograr una descripción confiable. Los sistemas considerados fueron sistemas de una o dos partículas, donde la cantidad conservada es alguna componente del momento angular total del sistema: dos oscilados armónicos interactuantes, el modelo Spherium, las funciones de Laguerre-Gauss para un fotón en un campo electromagnético en la aproximación paraxial y los autoestados de un sistema de dos spines interactuantes. A partir del estudio de la entropía de von Neumann para la superposición de estados, postulamos un criterio para predecir la curvatura de la entropía de von Neumann en función del parámetro de superposición. Este criterio se basa en el cálculo de una cantidad entrópica definida en este trabajo, que contiene la información necesaria sobre los estados superpuestos para poder predecir si la entropía del estado superpuesto será cóncava o convexa en función del parámetro de superposición.

El Capítulo 4 es el segundo capítulo que contiene nociones teóricas necesarias para el entendimiento de los resultados presentados. En particular, en este Capítulo se presenta el modelo  $k.p$ , utilizado para el estudio de la estructura de bandas y los estados en sistemas semiconductores. Este método provee una aproximación al Hamiltoniano de estos sistemas, a partir del uso del teorema de Bloch y la teoría de perturbaciones. Los Hamiltonianos así obtenidos se denominan «Hamiltonianos  $k.p$ », y existe una numerosa cantidad de los mismos, ya que se adaptan a los materiales empleados, el objeto de estudio, la cantidad de bandas que lo afectan, etc. Además de una descripción del método de obtención de estos Hamiltonianos, y las razones por las cuales este método se emplea en determinados sistemas, presentamos los Hamiltonianos utilizados en este trabajo. Se incluyen también las consideraciones necesarias para obtener el espectro y los estados del sistema a partir de este método.

En el Capítulo 5 se presenta el estudio de la ligadura de resonancias en puntos cuánticos embebidos en nanohilos semiconductores. Las resonancias son estados metaestables de un sistema, cuyas energías se encuentran en el continuo de energías pero que están localizados por algún período de tiempo. Aplicar un campo magnético a un sistema con resonancias puede hacer, para ciertos parámetros del sistema e intensidades del campo, que se produzca una transición de resonancia a estado ligado, proceso denominado *ligadura de resonancias*. Estudiamos este fenómeno en dos sistemas: un nanohilo de un único material, al cual se le aplica un campo electrostático que genera un punto cuántico en su interior, y un nanohilo compuesto por distintos materiales, que genera un punto cuántico debido a la diferencia de energías en sus estructuras de banda. La detección de resonancias y el estudio de la ligadura de las mismas se llevó a cabo

a partir del estudio de la estructura de bandas del sistema y de las propiedades de sus estados, obtenidos con el método  $k.p$ , a través de la probabilidad de localización.

El Capítulo 6 está dedicado al estudio de estados de borde helicoidales en pozos cuánticos semiconductores. Estos sistemas, en los que se apilan tres planchas de distintos materiales, siendo la primer y última plancha del mismo material, presentan en ciertas configuraciones estados topológicamente protegidos que son responsables de la conducción medida en el borde de la plancha intermedia. Estudiando el espectro de este sistema, obtenido mediante el método  $k.p$ , es posible identificar estos estados. Las autofunciones aproximadas, obtenidas mediante el método de Rayleigh-Ritz aplicado a Hamiltonianos  $k.p$ , permite calcular distintas entropías de estos estados para poder caracterizarlos y distinguirlos del resto de los estados del sistema. En este trabajo estudiamos la entropía de espacio real para la matriz densidad reducida de los estados del sistema, donde la traza se toma sobre una región espacial determinada. Si bien el uso de esta cantidad revela información sobre las propiedades de los estados de borde, no permitía distinguirlos del resto de los estados. Con el fin de lograr una cantidad que los separe efectivamente del resto de los estados, estudiamos las características que el método  $k.p$  da a los estados obtenidos, y logramos definir una entropía que separa estados de borde del resto de los estados.

En el Capítulo 7 se presentan las conclusiones generales del trabajo realizado y los resultados obtenidos, y perspectivas de trabajo futuras que pueden emprenderse en cada uno de los sistemas estudiados.

Los Apéndices incluyen la información necesaria para la implementación de los cálculos presentados en esta tesis, y la obtención de los resultados obtenidos. Incluir cierta información de esta manera busca que la lectura de la tesis sea amena, pero que posibilite la comprensión de los temas presentados. El Apéndice A describe el método variacional de Rayleigh-Ritz, empleado para la obtención de los resultados presentados. Este método es ampliamente utilizado por su efectividad para la obtención de autoestados y energías aproximados en diversos sistemas cuánticos. Los Apéndices B y C presentan los cálculos relacionados a los resultados del Capítulo 3 para los osciladores armónicos y el Spherium respectivamente. En el caso de los osciladores armónicos, Apéndice B, se presentan los pasos a realizar para cualquiera de los sistemas estudiados, con los detalles particulares de este sistema y las estrategias empleadas para obtener los resultados presentados. En el Apéndice C se describe el método de obtención de los autoestados del modelo Spherium, que incluye un gran cantidad de cálculos demasiado tediosos para incluir en el Capítulo 3. El Apéndice D incluye los parámetros de los materiales estudiados en los Capítulos 5 y 6 mediante el método  $k.p$ . Además, se incluyen detalles sobre el manejo de parámetros dependientes de la posición para resolver el Hamiltoniano de Luttinger-Konh en el Capítulo 5, y la descripción de las funciones  $B$ -Spline, utilizadas como base variacional en el Capítulo 6.

## Capítulo 2

# Conceptos preliminares

La descripción y caracterización de estados cuánticos es de fundamental importancia para poder identificar y manipular sistemas con propiedades útiles en tareas de Información y Computación Cuánticas. En este Capítulo se introducen las medidas de información cuántica, herramientas claves para el estudio de estados cuánticos, y los fenómenos cuánticos objetos de nuestro estudio: el entrelazamiento, las resonancias y el Efecto Hall Cuántico de Spin.

### 2.1. Medidas de Información Cuántica

En física clásica, donde es posible tener conocimiento de la posición de un objeto en función del tiempo, contamos con herramientas que nos permiten obtener más información sobre el objeto en cuestión: podemos derivar esta función para obtener la velocidad, o evaluarla si nos interesa un instante de tiempo en particular. Lo mismo pasa en teoría de la información -clásica o cuántica-, donde la entropía es una herramienta para conocer la cantidad de información disponible dado un estado. Herramientas de esta índole es lo que entendemos por *Medidas de Información*.

La caracterización de un sistema cuántico puede abordarse desde, al menos, dos enfoques distintos. Por un lado, tenemos el espectro del sistema bajo estudio, que nos brinda información valiosa sobre la presencia de determinados estados (estados ligados, resonancias...) en función de los parámetros que definen el sistema (geometría, presencia de campos externos...). Además de la caracterización del sistema observando su espectro, podemos definir cantidades que dependen del mismo y que nos permiten caracterizar estados del sistema, como ser la densidad de estados.

Otro enfoque al problema de identificación y caracterización de estados cuánticos se da a partir del estudio de la función de onda de los mismos, a través de distintas cantidades definidas para tal objetivo. A esto nos referimos cuando hablamos de **medidas de información cuántica**. Estas medidas -o cantidades- ofrecen información adicional y complementaria a la obtenida del espectro del sistema, y pueden definirse para responder a preguntas particulares sobre el estado del sistema, aprovechando las propiedades de la mecánica cuántica.

La ventaja que ofrecen estas medidas para el estudio de estados cuánticos es que, al definir las a partir del conocimiento de la física que domina el sistema, permiten diferenciar inequívocamente estados con propiedades de interés -como ser estados entrelazados o topológicos- del resto de los estados del sistema. Como contraparte, en general el estado del sistema no puede ser obtenido

de manera exacta, y las aproximaciones numéricas no siempre contienen toda la información de los mismos. La dificultad de obtener los estados, o aproximaciones razonables a los mismos, es un limitante importante al uso de estas cantidades.

Para no quedar en lo abstracto con el concepto de medidas de información cuántica, consideremos un ejemplo.

#### Ejemplo: Medidas de Información Cuántica

Consideremos el estado de un sistema,  $\rho$ , y su representación matricial

$$\rho_{i,j} = \langle i|\rho|j\rangle, \quad (2.1)$$

donde  $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$  es la base de estados que expande el espacio de Hilbert de dimensión  $d$  del sistema.

Es posible obtener información sobre este estado si consideramos la cantidad

$$\mathcal{C} = \text{Tr}(\rho^2), \quad (2.2)$$

es decir, si tomamos traza de  $\rho^2$ . Las propiedades de los estados cuánticos arrojan los siguientes posibles valores para esta cantidad:

$$\mathcal{C} = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho \text{ es un estado puro} \\ c \in (0, 1) & \text{si } \rho \text{ es un estado mezcla.} \end{cases} \quad (2.3)$$

En el caso de estados mezcla, los distintos valores que puede tomar  $\mathcal{C}$  nos da información sobre cómo se compone esta mezcla. Por ejemplo, si la mezcla es igualmente pesada en el espacio de Hilbert del sistema tenemos

$$\mathcal{C} = 1/d, \quad (2.4)$$

mientras que si el estado es *casi puro*, obtenemos

$$\mathcal{C} = 1 - \epsilon, \quad (2.5)$$

con  $\epsilon \ll 1$ .

***La cantidad  $\mathcal{C}$  es un ejemplo de medida de información cuántica.***

Además de brindar información valiosa sobre los estados de un sistema, ciertas cantidades son de utilidad a la hora de tratar con aproximaciones numéricas a los autoestados de un sistema. En estos casos, cantidades como  $\text{Tr}(\rho)$  (que evidencia la normalización de un estado) son también de gran utilidad para chequear el correcto funcionamiento de los códigos y métodos empleados para obtener los estados: la condición de estado normalizado, de no cumplirse, es un claro indicativo de que el estado obtenido no es correcto. Como mencionamos, gran parte del trabajo presentado en esta tesis incluye una componente importante de producción de códigos para la obtención de los resultados, con lo cual tener presentes estos criterios para corroborar lo mas fehacientemente posible los resultados es de gran utilidad e importancia.

## 2.2. Entrelazamiento y Entropía

### 2.2.1. Entrelazamiento

El entrelazamiento es considerado uno de los fenómenos más relevantes de la mecánica cuántica, y la herramienta principal en las tareas de información cuántica. Disponer de estados entrelazados y poder controlarlos, es la clave de una numerosa, y creciente, cantidad de protocolos de almacenamiento y transmisión de información, como la *teleportación cuántica* [6], la *codificación densa* [7] y la *distribución cuántica de claves* [8], entre otros. Además de los protocolos posibles gracias al entrelazamiento, esta propiedad de los sistemas cuánticos permite también optimizar y acelerar distintas tareas de computación [9] con respecto a la computación clásica.

El término entrelazamiento fue utilizado por primera vez por Erwin Schrödinger en 1935, en una carta [10] en que respondía a Einstein, Podolsky y Rosen sobre lo que se conoce como *la paradoja EPR* [11]. En esos años, cercanos al surgimiento de la teoría de la mecánica cuántica, Einstein, Podolsky y Rosen sostenían que la formulación de la misma era incompleta, y plantean una paradoja para mostrarlo. Esto, y las discusiones que generó, derivó en la formulación del entrelazamiento como propiedad fundamental de los sistemas cuánticos.

Para ejemplificar el concepto de entrelazamiento, consideremos el estado global de un sistema de dos partículas con spin  $1/2$  y momento angular de spin total nulo, descrito por

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle), \quad (2.6)$$

donde  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  son los estados de spin *up* y *down* de una partícula, respectivamente. Es decir, el estado es una superposición de dos estados en los que las partículas tienen spin definido y opuesto.

Por simplicidad, consideremos estados preparados con spin *up* o *down* en la dirección  $z$ , y un proceso de medición de spin. Podemos separar las dos partículas, tanto como queramos, y medir el spin de una de ellas mediante un experimento de Stern-Gerlach [12]. Si medimos en la dirección  $z$ , y obtenemos como resultado “spin *up*”, esto equivale a proyectar el estado de la Ecuación 2.6 con el estado  $|\uparrow\rangle$ , y podemos ver claramente que el estado de la otra partícula será “spin *down*”. Esto obedece a la conservación del momento total de spin del sistema, y es perfectamente consistente con la descripción cuántica del estado en esta base.

El *problema* planteado por Einstein, Podolsky y Rosen, se presenta cuando el estado está preparado en la dirección  $z$ , como antes, pero ahora medimos en la dirección  $x$ . Afrontando este problema matemáticamente, sabemos que realizando un cambio de base llegamos a un resultado similar al descrito anteriormente: cuando mida una partícula con algún estado de spin, sabemos que la otra partícula se encuentra en el estado de spin opuesto. Pero conceptualmente esto planteaba un problema: cuando medimos en la base  $x$ , el spin preparado en la base  $z$  se proyecta con igual probabilidad (50% en cada caso), y de manera aleatoria, en cualquiera de los dos estados de la base  $x$ , y el estado de la Ecuación 2.6 no tiene información sobre esta proyección. Es decir, cuando medimos una de estas partículas y colapsa a un estado, lo llamemos “spin *right*”, alguien le debe avisar a la otra partícula que le corresponde el estado “spin *left*”, ya que el estado no tiene esta información.

Esto, decían, implica que hay información transmitiéndose a velocidades mayores que la de la luz, ya que la partícula no medida debe *saber que estado adoptar* instantáneamente después de haber medido la otra partícula.

Esta propiedad, que no viola ningún principio de la física, es el **entrelazamiento**. En el ejemplo anterior consideramos entrelazamiento en un grado de libertad particular del sistema: la componente de spin. Sin embargo, el entrelazamiento **nos da información sobre las correlaciones de origen cuántico que hay entre dos elementos que describen el sistema**. Estos elementos pueden ser de cualquier índole: podemos considerar entrelazamiento entre dos autovalores de un observable -como en el caso de spin-, entre dos direcciones espaciales, o entre regiones espaciales de una única dirección, entre otras opciones. Los últimos dos casos son de gran utilidad en el estudio de sistemas de una partícula, como veremos mas adelante.

### 2.2.2. Entropías de Entrelazamiento

El estudio de estados entrelazados es fundamental para el entendimiento y la formulación de la mecánica cuántica, y para su aplicabilidad en distintas tecnologías. Una gran cantidad de protocolos de comunicación cuántica se basan en este fenómeno [6]-[9], por lo que un conocimiento profundo sobre estos estados y su manejo es necesario. En este sentido, uno de los requerimientos es el de disponer de estados con alguna cantidad de entrelazamiento, y poder predecir cuál es esa cantidad y en qué circunstancias están presentes, es decir, qué sistemas permiten estados entrelazados, y bajo qué parámetros o configuraciones. Este estudio se puede hacer, en estados puros de sistemas bipartitos, a través de **entropías de entrelazamiento**, entre las que se encuentran la entropía de von Neumann, y las entropías de Renyi. Estas entropías son otro ejemplo de medidas de información.

La condición de que el sistema sea bipartito obedece a que estas cantidades miden el entrelazamiento de una parte del sistema respecto a otra. Esto no significa que el sistema deba estar compuesto de dos partículas, sino que debe ser posible una bipartición en el espacio de Hilbert que describe el estado bajo estudio. La elección de la partición es variada, y se toma en base al sistema bajo estudio; si se trata de dos partículas la partición mas recurrente es separar el sistema en dos partes de una partícula cada una, y como resultado sabremos que tan entrelazadas están las mismas, mientras que si estamos estudiando estados de una partícula podemos trazar sobre algún/os grado/s de libertad (espacial, de spin, etc) y conocer el entrelazamiento entre el grado de libertad trazado y el remanente.

#### ¿CÓMO SABER SI UN ESTADO ESTÁ ENTRELAZADO?

Para responder esta pregunta, estudiemos la entropía de von Neumann de un estado entrelazado. Para ello, consideremos el estado de un sistema bipartito dado por

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (2.7)$$

donde  $A$  y  $B$  pueden ser dos partículas, dos grados de libertad de una partícula, o cualquier partición que se pueda hacer en el sistema bajo estudio, y  $|\psi\rangle$  es la función de onda. El primer paso para estudiar el entrelazamiento entre  $A$  y  $B$  para este estado, es considerar el operador densidad reducido del mismo que se obtiene trazando sobre una de las particiones:

$$\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB}). \quad (2.8)$$

La entropía de von Neumann de este estado está dada por

$$S(\rho_A) = -\text{Tr}(\rho_A \log_2(\rho_A)), \quad (2.9)$$

y, como dijimos anteriormente, esta cantidad es una medida de entrelazamiento entre los subsistemas  $A$  y  $B$ . Para ver esto, avancemos en su cálculo. El operador densidad reducido, en sistemas

de dimensión finita, puede expresarse de manera matricial. Sus elementos de matriz están dados por

$$[\rho_A]_{ij} = \langle i | \rho_A | j \rangle \quad (2.10)$$

donde  $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$  es la base que expande el espacio de Hilbert del subespacio  $A$ , de dimensión  $d$ . Si calculamos los autovalores de  $\rho_A$ ,  $\lambda_A^i$ , la entropía de von Neumann puede calcularse como

$$S(\rho_A) = - \sum_{i=1}^d \lambda_A^i \log_2(\lambda_A^i) \quad (2.11)$$

Para estados puros de sistemas bipartitos de dimensión  $d = 2$ , el valor máximo que puede tomar esta cantidad es  $S = 1$ , mientras que el valor mínimo es  $S = 0$ . En un caso mas general, si  $d = N$  y tomamos logaritmo con base  $a$  en la Ecuación 2.9, tenemos  $S_{max} = \log_a(N)$ . Esta y las demás propiedades de la entropía de von Neumann, incluida su capacidad para cuantificar entrelazamiento, derivan de las propiedades espectrales de los estados cuánticos, es decir, se pueden entender a partir de las propiedades de los autovalores  $\lambda_A^i$ .

Para el estado de la Ecuación 2.6, el operador densidad tiene la forma

$$\rho = \frac{1}{2} \left( |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \right). \quad (2.12)$$

donde  $|\uparrow\rangle\langle\downarrow| \equiv |\uparrow\rangle_A\langle\downarrow|_B$ . Es decir, como es natural, tomamos a los los subsistemas como las componentes de spin de las partículas  $A$  y  $B$ . Así, para estudiar el entrelazamiento, debemos trazar sobre el subsistema  $B$ , esto sería, trazar sobre los estados  $|\uparrow\rangle_B$  y  $|\downarrow\rangle_B$ , que llamaremos  $|i\rangle_B$  para sintetizar. Haciendo esto, obtenemos

$$\begin{aligned} \rho_A &= \sum_i \langle i | \rho | i \rangle_B \\ &= \frac{1}{2} \left( |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

La representación matricial de este operador en la base del subsistema  $A$  es

$$\rho_A = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Podemos ver que este estado tiene entropía de von Neumann  $S(\rho_A) = 1$ , pero ¿Qué significa esto? Si tenemos en cuenta que la entropía de von Neumann es el equivalente cuántico a la entropía clásica de Shannon, mas entropía implica menor conocimiento sobre el sistema que estamos estudiando. En el procedimiento que realizamos, al operador densidad del estado global le sacamos toda información del subsistema  $B$ , quedándonos -en principio- con toda la información del subsistema  $A$  contenida en  $\rho_A$ . Vemos, sin embargo, que perdimos toda información disponible, ya que obtuvimos máxima entropía para  $\rho_A$ . Esta es la forma de la entropía de von Neumann de cuantificar entrelazamiento entre dos partes, y se deriva de las propiedades espectrales del operador densidad. La pérdida de información que se produce al trazar sobre  $B$  se debe a que el estado esta máximamente entrelazado, y si no disponemos de información sobre uno de los subsistemas, no podemos saber como se comportará el otro.

Una propiedad importante de la entropía de von Neumann para sistemas bipartitos es que, una vez elegida la partición que deseamos estudiar, se cumple:

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) \quad (2.15)$$

para cualquier elección de  $A$  y  $B$ . Es decir, se puede trazar sobre el subsistema mas conveniente desde un punto de vista matemático o numérico, sin que esto afecte a la información obtenida sobre el estado del sistema.

## CANTIDAD DE ENTRELAZAMIENTO

La entropía de von Neumann, y las demás entropías de entrelazamiento, están definidas para alcanzar un valor máximo cuando la información que tenemos de un subsistema es mínima -cuando el estado total es máximamente entrelazado-, y anularse cuando el operador densidad reducido de un subsistema nos brinda toda la información posible sobre el mismo -cuando el estado total es separable-.

Estos dos extremos son representados por superposiciones igualmente pesadas de dos estados en el primer caso, y por un estado global que es estado producto de los estados de cada subsistema en el segundo.

Cuando el estado del sistema es una superposición de estados, pero con distintos pesos cada uno, entonces podemos lograr una predicción un poco mas acertada del estado del sistema: no es lo mismo predecir un estado total con 50% de probabilidad para cada estado de la superposición, que si las probabilidades son distintas para cada uno. En estos casos, el contenido de entrelazamiento del estado no es máximo.

En el gráfico de la Figura 2.1 se muestra el ejemplo de la entropía de von Neumann para el estado  $\Psi_p = \sqrt{1-p}|\uparrow\downarrow\rangle + \sqrt{p}|\downarrow\uparrow\rangle$ , en función del parámetro de superposición de estados,  $p$ . Como se puede observar, para  $p = 0$  y  $p = 1$  la entropía es nula, lo que se corresponde con estados no entrelazados, o separables, coincidiendo con los estado separables  $|\uparrow\downarrow\rangle$  y  $|\downarrow\uparrow\rangle$ . Para el caso  $p = 1/2$  el estado correspondiente es  $\Psi_{1/2} = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ , que es máximamente entrelazado como vimos en la Sección 2.2.2. Para el resto de valores del parámetro  $p$ , la entropía toma valores entre 0 y 1, indicando un mayor contenido de entrelazamiento para valores de  $p$  mas cercanos a  $1/2$ .

Poder cuantificar y predecir la cantidad de entrelazamiento de un estado dado es de gran interés, ya que de esto depende si el estado es o no de utilidad para distintas aplicaciones tecnológicas. Con este objetivo, en el Capítulo 3 estudiaremos las propiedades de la entropía de von Neumann para la superposición de estados.

### 2.2.3. Entropías como Medida de Información

Como vimos, para conocer el grado de entrelazamiento entre dos grados de libertad de un sistema, podemos trazar el operador densidad sobre uno de ellos y calcular la entropía de von Neumann de matriz densidad reducida obtenida: esto constituye a la entropía de von Neumann como una medida de información. Este mismo procedimiento puede llevarse a cabo sobre cualquier bipartición del sistema, siempre que el estado del sistema y su formulación matemática lo

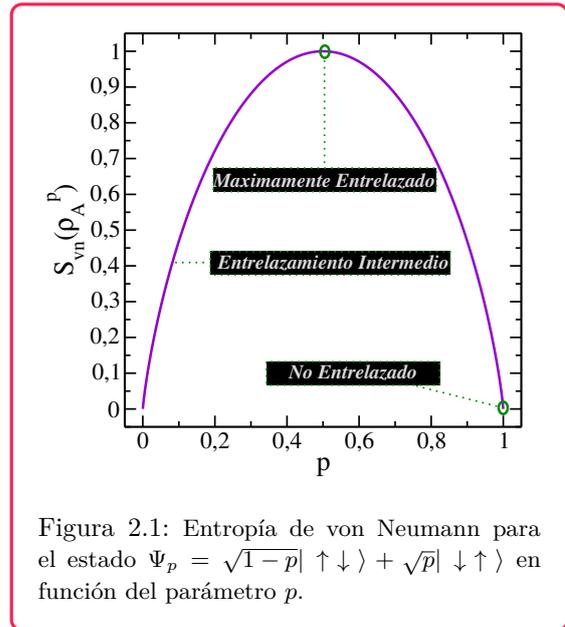


Figura 2.1: Entropía de von Neumann para el estado  $\Psi_p = \sqrt{1-p}|\uparrow\downarrow\rangle + \sqrt{p}|\downarrow\uparrow\rangle$  en función del parámetro  $p$ .

permitan, sin necesidad de que el resultado nos indique el contenido de entrelazamiento en un sentido estricto de la palabra.

Para entender esto, consideremos el estado de una partícula libre en una dimensión:  $\psi_l = e^{ikx}$ . A este sistema lo puedo pensar como un sistema bipartito si defino a las partes  $A$  y  $B$  según

$$A := x \in (-\infty, 0) \quad \text{y} \quad B := x \in [0, \infty). \quad (2.16)$$

Más allá de la interpretación física de qué significaría el entrelazamiento entre regiones espaciales, el cálculo de esta cantidad es posible desde un punto de vista matemático (esto no va a ser siempre así, y depende de las propiedades del estado que describe nuestro sistema). La entropía de von Neumann obtenida para  $\rho_A = \text{Tr}_B |\psi_l\rangle\langle\psi_l|$  es un ejemplo de lo que denominamos **entropías de espacio real**.

Esta elección particular de subsistemas fue introducida en la Referencia [13], y se ha utilizado para analizar el comportamiento de estados de Laguerre-Gaussianos de un fotón [14] y la unión de estados de resonancia [15], entre otras aplicaciones (ver Referencia [16] y las referencias allí incluidas).

## ENTROPÍA TOPOLÓGICA DE ENTRELAZAMIENTO

La entropía de espacio real puede definirse de infinitas maneras, siendo la diferencia entre estas definiciones la elección para los dominios  $A$  y  $B$ . Diferentes elecciones llevarán no solo a distintos resultados, sino también a explorar distintas correlaciones en el sistema.

A partir de la entropía de von Neumann, Kitaev y Preskill [17] y Levin y Wen [18] estudiaron, de manera simultánea e independiente, el uso de esta cantidad para caracterizar sistemas con orden topológico. En estos trabajos, los autores proponen calcular la entropía de von Neumann para distintas biparticiones espaciales del sistema. Mas específicamente, en [17] los autores estudian un sistema bidimensional de muchos cuerpos con orden topológico, a través de la cantidad

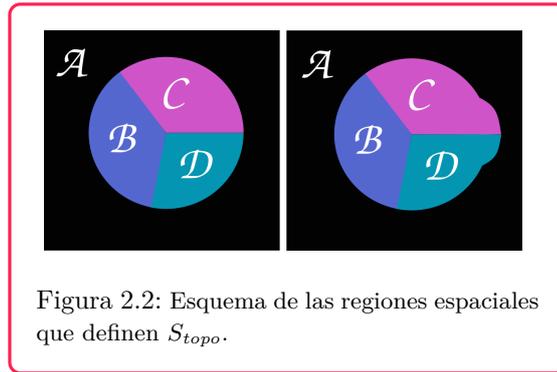
$$S_{topo} = S_B + S_C + S_D - S_{BC} - S_{CD} - S_{BD} + S_{BCD} \quad (2.17)$$

donde  $S_{\mathcal{E}}$  es la entropía de von Neumann obtenida trazando sobre la región exterior al dominio  $\mathcal{E}$ .

La definición de los dominios en la Ecuación 2.17 esta representada en la Figura 2.2, donde el área  $\mathcal{A}$ , en negro, representa el espacio bidimensional en que esta definido el sistema, y los subespacios  $\mathcal{B}$ ,  $\mathcal{C}$  y  $\mathcal{D}$  están representados en violeta, rosa y celeste respectivamente.

Estudiando la variación de la cantidad  $S_{topo}$  al modificar los dominios involucrados en maneras específicas, como se muestra en el panel derecho de la Figura 2.2, los autores muestran que esta cantidad tiene una conexión con el orden topológico del sistema. Resultados similares fueron presentados en [18].

A partir de esta propuesta, Sterdyniak y colaboradores [16] proponen realizar una única bipartición espacial en un sistema de  $N$  partículas para el estudio de estos sistemas. En particular, los autores de este trabajo centran su estudio en el espectro de la matriz densidad reducida



$$\rho_{N_A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_A}; \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_{N_A}) = \frac{\int_B \prod_{j=N_A+1}^N d^2\mathbf{r}_j \rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_A}, \mathbf{r}_{N_A+1}, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_{N_A}, \mathbf{r}'_{N_A+1}, \dots, \mathbf{r}'_N)}{\int_A \prod_{i=1}^{N_A} d^2\mathbf{r}_i \int_B \prod_{j=N_A+1}^N d^2\mathbf{r}_j \rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} \quad (2.18)$$

que representa el estado en que el sistema tiene  $N_A$  partículas en la región  $A$ .

Si consideramos un sistema de una partícula, un análogo a esta cantidad sería la entropía considerada al comienzo de esta sección. Para un sistema bidimensional podemos trazar sobre una región de una de las dimensiones espaciales, obteniendo

$$\rho_{\mathcal{D}^C} = \frac{\int_{\mathcal{D}} dV \rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\int_{\mathcal{D}^C} dV^C \int_{\mathcal{D}} dV \rho(\mathbf{r}; \mathbf{r})}, \quad (2.19)$$

donde  $\mathcal{D}^C$  es el espacio complemento a  $\mathcal{D}$ , y  $dV$  ( $dV^C$ ) es el diferencial de volumen correspondiente al dominio  $\mathcal{D}$  ( $\mathcal{D}^C$ ).

Cantidades similares han sido utilizadas para caracterizar los estados de un sistema de una partícula, utilizando el concepto de *entrelazamiento de una partícula*, donde se traza sobre una de las dimensiones espaciales del sistema [13]. En los Capítulos 3 y 6 veremos como estas entropías, definidas de manera acorde al sistema bajo estudio, exponen propiedades de gran importancia para distintos sistemas físicos.

## 2.3. Resonancias

La ventaja que implica la utilización de sistemas en el régimen cuántico para aplicaciones tecnológicas, así como las complicaciones que implica que un sistema se encuentre en este régimen, fomentan un estudio profundo y detallado de distintos fenómenos característicos de la mecánica cuántica. Así como el entrelazamiento constituye una herramienta esencial para tareas de computación cuántica, las resonancias -o estados resonantes- juegan un rol fundamental en la preparación de los estados que estas tareas requieren.

Como primera definición de **resonancias**, podemos decir que son los estados metaestables en que se encuentra un sistema (una molécula por ejemplo) antes de dividirse en dos o mas subsistemas (como ser muchos átomos). En Mecánica Cuántica, el concepto de resonancia fue introducido en 1928 por George Gamow [19], cuando estudiaba el decaimiento  $\alpha$  en núcleos pesados. En este escenario, el sistema inicial es el núcleo de un átomo en un estado estable, que debido a procesos de *tunneling* de partículas emite, en un momento dado, una partícula  $\alpha$ . El estado de la partícula  $\alpha$  en el núcleo está representada entonces por un estado metaestable: para tiempo  $t = 0$ , la probabilidad de encontrar la partícula en el núcleo es uno, y el estado es estacionario, pero para tiempos mayores esta probabilidad decrece en función del tiempo. Para describir matemáticamente este estado, Gamow introdujo estados con energías complejas de la forma

$$E_{res} = E_r - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (2.20)$$

donde la parte real,  $E_r$ , es la energía propiamente dicha del estado, con valores en el continuo de energía del sistema, y  $\Gamma > 0$  -el ancho de la resonancia- se relaciona con el tiempo de vida medio del estado definido según

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}. \quad (2.21)$$

Este tiempo de decaimiento varía de los nanosegundos a los millones de años, dependiendo del sistema bajo estudio, que no se limita a sistemas atómicos. Por el contrario, el estudio de resonancias es de gran importancia en nanoestructuras, ya que la presencia de estos estados influye en la preparación y el manejo de dispositivos cuánticos, como veremos mas adelante.

## DETECCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE RESONANCIAS

Existe una gran variedad de métodos para la detección de resonancias, entre los que se encuentran el método de *complex scaling* [20], los potenciales absorbentes complejos [21], [22] y el estudio de densidad de estados [23], [24] del espectro del sistema. Estos métodos permiten, además de la detección de resonancias, obtener el valor de vida medio de estos estados ( $\tau$ ). La elección del método a utilizar para el estudio de estos estados depende tanto del sistema bajo estudio y de la información de la que disponemos sobre el mismo, como de la información que queremos obtener.

En sistemas con puntos cuánticos, el estudio de resonancias se centra en la identificación y la posibilidad de control de estos estados, siendo de gran interés las condiciones en que pueden convertirse en estados ligados. Si los puntos cuánticos se encuentran en estructuras semiconductoras, es posible acceder a una aproximación numérica de gran precisión de los autoestados del sistema. En estos casos, la detección de resonancias y su transición a estados ligados puede lograrse de manera fiable observando el espectro del sistema, sin necesidad de recurrir a los métodos mencionados.

Si estudiamos el espectro de un sistema en función de algún parámetro  $\alpha$  (como ser alguna dimensión espacial, un campo externo aplicado, etc.) utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz (ver Apéndice A), podemos obtener situaciones como la diagramada en el panel superior de la Figura 2.3. Allí podemos observar distintos niveles de energía, representados en distintos colores, y dos regímenes distintos. Para  $\alpha < \alpha_c$  los niveles de energía que se mantienen constantes como función de  $\alpha$  representan el continuo del espectro de energía, mientras que la energía representada en rojo corresponde a un estado ligado del sistema. En el punto  $\alpha = \alpha_c$ , el estado ligado pasa a ser un estado extendido, y para  $\alpha > \alpha_c$  el sistema no posee estados ligados con energías fuera del continuo. Sin embargo, como se puede observar en la figura, cuando el estado ligado entra en el continuo de energías se producen una serie de cruces evitados entre los estados del continuo, que forman una continuación a la energía del estado ligado dentro del continuo: esta sucesión de cruces es lo que señala la presencia de una resonancia. Hay que tener en cuenta, sin embargo, que no siempre la presencia de cruces evitados implica la presencia de resonancias, ya que pueden simplemente ser un efecto del método aplicado para obtener el espectro. Por esto, un análisis más profundo es necesario.

Cuando disponemos de las autofunciones  $\psi^i$  que se corresponden con los autovalores  $E^i$  del espectro, este análisis puede hacerse a través de la probabilidad de localización

$$p^i = \int_R |\psi^i|^2 dV, \quad (2.22)$$

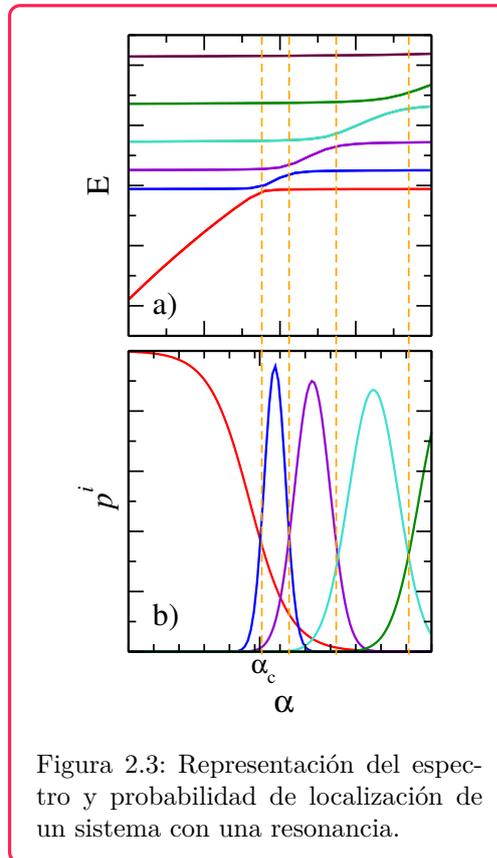


Figura 2.3: Representación del espectro y probabilidad de localización de un sistema con una resonancia.

donde  $R$  representa el dominio espacial donde se espera que un estado ligado esté localizado -un pozo de potencial, por ejemplo-. El panel inferior de la Figura 2.3 presenta esta cantidad, para los estados cuyas energías se muestran en el panel superior, siguiendo el mismo código de colores. Como podemos observar, para  $\alpha < \alpha_c$  la probabilidad de localización en  $R$  del estado ligado (en rojo) es máxima, y disminuye cuando este estado pasa a ser un estado extendido ( $\alpha > \alpha_c$ ). A medida que  $\alpha$  aumenta, podemos observar que los estados cuya energía se corresponde con la de la resonancia presentan valores altos de localización en  $R$ . Esta localización es evidencia de que los cruces evitados marcan, efectivamente, una resonancia, *i.e.*, un estado localizado con energías en el continuo.

## EFEECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO EN LAS RESONANCIAS

La presencia de resonancias en un dispositivo cuántico representa una pérdida de recursos, ya que implica el decaimiento de un estado que podría ser de utilidad para almacenar información. Afortunadamente, entre los efectos del campo magnético en el espectro de distintos sistemas, podemos encontrar el fenómeno de estabilización -o ligadura- de las resonancias.

Por ligadura de resonancias entendemos una reversión del proceso descrito en el apartado anterior, donde describimos el paso de un estado ligado a una resonancia. Aplicar un campo magnético -en determinadas configuraciones- permite revertir este proceso, y obtener así un estado ligado estable. Este fenómeno se analizó por primera vez en sistemas de tipo atómico: en 1977, Avron, Herbst y Simon [25] propusieron la existencia de iones negativos de Helio, posibilitados por la presencia de un campo magnético externo, hecho que fue comprobado numéricamente recién en el año 2014 [26].

El estudio de este fenómeno y los rasgos físicos que lo caracterizan, es de gran interés en nanoestructuras semiconductoras [15], [27]-[30]. En el Capítulo 5 de esta tesis nos centraremos en su estudio en puntos cuánticos embebidos en estos sistemas.

## 2.4. Efecto Hall Cuántico de Spin

La búsqueda por almacenar y transmitir información en sistemas cuánticos implica, en determinados escenarios, la necesidad producir y controlar corrientes estables. Las posibilidades que ofrece la mecánica cuántica van más allá de corrientes de carga, sino que permite disponer de corrientes polarizadas, topológicamente protegidas, como resultado del

Efecto Hall Cuántico de Spin.

Comencemos esta Sección con un breve repaso del Efecto Hall, descubierto por Edwin Hall en 1879 [31].

Este fenómeno se puede describir considerando una placa de algún material conductor o semiconductor, a la cual se le aplican una diferencia de potencial que genera una corriente en una dirección, digamos  $y$ , y un campo magnético perpendicular a la placa, digamos  $z$ . El efecto del campo magnético sobre las cargas en movimiento -corriente  $I_y$ - es el de desviar las mismas, lo que resulta en acumulación de cargas sobre una de las paredes paralelas a la corriente. La diferencia de cargas en las dos paredes del material genera un campo eléctrico,  $E_H$ , perpendicular a la corriente original, denominado campo Hall. Este nuevo campo genera, a su vez, una tensión en la dirección  $x$ , llamada tensión Hall.

La deducción teórica de este fenómeno permite relacionar al campo Hall, la corriente inducida y el campo magnético mediante el coeficiente Hall, comúnmente denominado  $R_H$ . Una consecuencia práctica de este efecto es la del desarrollo de *sensores Hall*, sistemas que utilizan este efecto para detectar campos magnéticos y eléctricos, y que tiene numerosas aplicaciones.

Si se realiza un experimento Hall en un sistema a bajas temperaturas con campos magnéticos de gran intensidad, las propiedades de la mecánica cuántica surgen y, como consecuencia, la resistividad del experimento Hall está cuantizada. Este efecto, conocido como efecto Hall Cuántico (QHE por sus siglas en inglés) fue propuesto por Ando, Matsumoto y Uemura en 1975, y comprobado experimentalmente en 1980 por Klaus von Klitzing [32].

A partir de este descubrimiento, varios autores propusieron la existencia del Efecto Hall Cuántico de Spin (QSHE por sus siglas en inglés), que propone una versión del QHE donde la corriente no es generada por portadores de carga, sino que es una corriente de spin en el borde de sistemas bidimensionales semiconductores. Los primeros trabajos prediciendo este efecto fueron publicados casi simultáneamente: el primero por Kane y Mele en 2005 [33], y el segundo un año después por Bernevig y Zhang [34]. Kane y Mele se enfocaron en el estudio en la interacción spin-órbita en el grafeno, mientras que Bernevig y Zhang se basaron en dicha interacción en materiales semiconductores. Lo que tienen en común estos enfoques, y es la base del efecto, es la interacción spin-órbita presente en determinados materiales.

En la búsqueda de demostrar este efecto de forma experimental, el sistema propuesto en [33] fue descartado debido a la débil interacción spin-órbita que presenta el grafeno. A partir de esto, los estudios de este fenómeno se basaron en la propuesta presentada en [34], donde los autores consideran un pozo cuántico compuesto por tres capas semiconductoras alternadas de CdTe/HgTe/CdTe.

En este sistema, las características de la estructura de bandas de los materiales involucrados y el espesor  $d$  de la capa intermedia de HgTe juegan un rol fundamental. El espectro del sistema en función del parámetro  $d$  puede describirse de la siguiente manera: para pozos cuánticos infinitos y espesores chicos de la capa intermedia, el sistema presenta un gap entre las bandas de valencia y conducción, y la energía de Fermi se encuentra dentro del mismo, por lo que el sistema se comporta como un aislante. Para espesores mayores el sistema presenta una inversión de bandas, cuando las energías de las sub-bandas de valencia y conducción se invierten a partir de un espesor dado,  $d_c$ . Si consideramos, en el régimen invertido, un pozo cuántico finito en alguna de las dimensiones transversales al mismo, esto mas la inversión de bandas, que cierra el gap, permite la presencia de estados de borde en el sistema, y un material que era aislante comienza a conducir. Es decir, un sistema que era aislante, cuando se lo confina en una dimensión pasa a tener estados conductores localizados en los bordes.

La diferencia entre el QHE y el QSHE es la fuente de las corrientes generadas. En el QHE, los responsables de la corriente medida son portadores de carga, al igual que en el efecto Hall clásico, que están cuantizadas. Estas corrientes se dan en direcciones opuestas en cada una de las paredes del sistema, y son robustos ante perturbaciones magnéticas. En el QSHE, las corrientes son corrientes de spin, es decir, están polarizadas. En este efecto, sobre las paredes del sistema se presentan dos corrientes, en direcciones opuestas y con componentes opuestas de spin. Estos

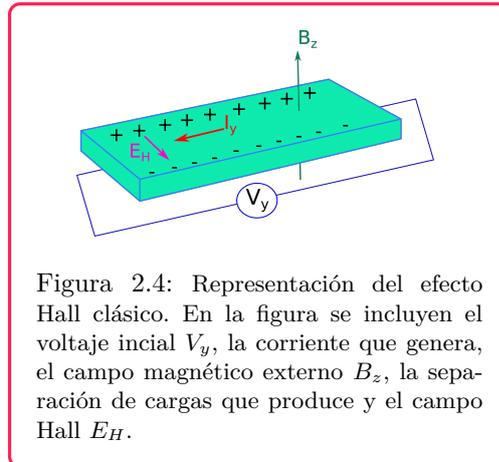


Figura 2.4: Representación del efecto Hall clásico. En la figura se incluyen el voltaje inicial  $V_y$ , la corriente que genera, el campo magnético externo  $B_z$ , la separación de cargas que produce y el campo Hall  $E_H$ .

estados helicoidales están topológicamente protegidos por la simetría de inversión temporal de los sistemas en que se presenta el fenómeno, por lo que no son robustos ante la presencia de impurezas magnéticas que rompen dicha simetría.

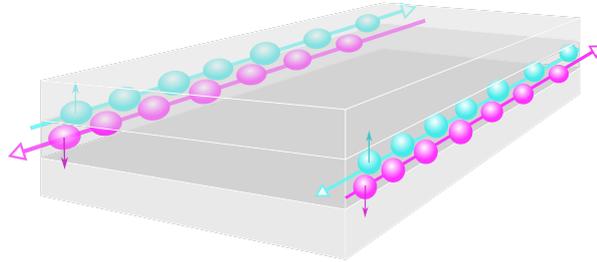


Figura 2.5: Representación esquemática del efecto Hall Cuántico de spin. En los bordes de la capa intermedia del pozo cuántico se pueden ver las corrientes polarizadas. Las cargas con spin opuesto se desplazan en dirección opuesta por cada una de los bordes del sistema. Las esferas rosas representan las cargas con spin *down*, y las celestes corresponden a spin *up*.

En definitiva, un sistema en el régimen QSH presenta dos ondas planas de spin definido en la dirección paralela al borde del sistema, como se puede ver en la Figura 2.5, y localizados en las otras direcciones sobre el mismo borde, que dan lugar a la conducción cuantizada en spin que lo caracteriza. La particularidad de estos estados en pozos cuánticos compuestos por HgTe/CdTe es que no requieren de la presencia un campo magnético externo, sino que son consecuencia directa de la inversión de bandas.

## Capítulo 3

# Propiedades de la entropía de von Neumann de la superposición de estados degenerados

Este Capítulo está dedicado al estudio de la superposición de estados degenerados a través de la entropía de von Neumann, con el objetivo de predecir y maximizar el contenido de entrelazamiento para los estados del sistema. En la Sección 3.1 se presentan la introducción, motivación y propuesta de trabajo, en la Sección 3.2 se presenta el criterio propuesto, en la Sección 3.3 se estudia la validez del mismo en distintos sistemas físicos, y por último la Sección 3.4 se discuten las conclusiones del trabajo.

### 3.1. Introducción

#### ANTECEDENTES

Los protocolos propuestos en Información Cuántica para el aprovechamiento de fenómenos cuánticos en el almacenamiento, procesamiento y transmisión de la información se basan en la disponibilidad de sistemas cuánticos en estados puros o casi-puros. Esto representa un obstáculo a la hora de implementar los protocolos por varios motivos. Uno de ellos es la posibilidad de interacción del sistema con su entorno y el fenómeno de decoherencia, dos procesos que disminuyen el intervalo temporal en que el sistema se mantiene en el estado en que fue preparado. Otro obstáculo son los requerimientos para lograr un estado puro experimentalmente: no siempre se puede obtener, ni certificar, la pureza del estado con que se llevará a cabo el protocolo deseado.

La necesidad de sobrepasar estos obstáculos y el avance en técnicas experimentales registrados en los últimos años, dieron lugar a una variedad de métodos para producir estados puros de forma fiable y repetitiva. Ejemplos de esto son los estados puros en Resonancia Magnética Nuclear [35]-[37], los estados de electrones acoplados en puntos cuánticos [38] y los estados en qubits superconductores [39]. A partir de esta búsqueda por generar estados con características determinadas, la generación de estados superpuestos –en configuraciones específicas– fue explorada, y para ciertos sistemas se descubrió que ofrecen una ventaja en determinadas tareas [40]-[43]. A lo largo de los años se han estudiado superposiciones de estados para distintos sistemas: en [44] se considera la superposición entre estados Gaussianos y estados de Laguerre-Gauss, en [45] se

estudian pares de fotones entrelazados en momento angular orbital y en [46] la superposición se da entre haces de Laguerre-Gauss compuestos, con intensidad y distribución de fase sintonizables.

Paralelamente, el estudio de la superposición de estados, es decir, de la capacidad de un sistema cuántico de estar en varios estados al mismo tiempo, es de gran importancia en sistemas de muchos cuerpos. En estos sistemas los autoestados del Hamiltoniano son, por lo general, degenerados en energía y, al estudiar su contenido de entrelazamiento, podríamos considerar una mezcla o la superposición de estos autoestados degenerados. En [47] Osborne y Nielsen discuten la diferencia entre estas dos opciones en el estudio del comportamiento del entrelazamiento en la transición de fase cuántica que aparece en el modelo de Ising transversal. A partir de ese trabajo, el contenido de entrelazamiento de los autoestados degenerados en problemas de muchos cuerpos se ha abordado para evaluar la relación entre las interacciones de largo alcance y el entrelazamiento de pares de espines separados a diferentes distancias [48], la relación entre el entrelazamiento y la simetría en estados simétricos ante permutación [49], la diferencia entre superposiciones simétricas y sin simetría de estados fundamentales, a través de la información mutua [50] y las propiedades de entrelazamiento del conjunto de autoestados de diferentes Hamiltonianos [51], [52], por nombrar algunos ejemplos.

## MOTIVACIÓN

Para un sistema cualquiera, consideremos todas las superposiciones de un conjunto de  $N$  estados puros degenerados, y una medida de entrelazamiento sobre los mismos definida por una función continua  $S$ . Dado que todas las superposiciones están contenidas en un espacio compacto, la función  $S$  sobre estos estados debe alcanzar un conjunto de extremos. Una pregunta natural a responder es: ¿Para qué superposición/es se alcanzan esos extremos? Podemos avanzar un paso más en esta dirección y preguntarnos si esta función tiene convexidad definida en función del parámetro de superposición de estados y, de ser así, si es posible predecirla.

Para el caso en que  $S$  es la entropía de von Neumann, poder predecir solo conociendo los estados involucrados en la superposición si su entropía es una función cóncava o convexa del parámetro de superposición, implicaría conocer de antemano cuál es la superposición de estados con mayor contenido de entrelazamiento: si la función es convexa los estados con mayor entropía, y mayor entrelazamiento, son los estados con que se realiza la superposición. Caso contrario, hay una superposición de estados que presenta más entrelazamiento.

Cuando hablamos de autoestados degenerados de un sistema, estamos considerando una de las posibles bases del espacio de Hilbert del mismo. Esto nos lleva a otra pregunta: la libertad sobre la elección de una base que expanda el subespacio de estos estados degenerados, ¿Tiene algún impacto a la hora de calcular alguna medida de entrelazamiento de la superposición de estados?. Es decir, ¿Depende la respuesta a la primera pregunta de la base utilizada?

Las preguntas formuladas fueron motivadas por el trabajo en la Referencia [53], donde los autores estudian el modelo Calogero [54]-[56]. Para el caso de dos partículas bidimensionales, el estado fundamental de este sistema es degenerado si la función de onda total es antisimétrica ante la permutación de las partículas. Consideremos una base formada por las autofunciones del operador de momento angular perpendicular al plano bidimensional donde habita el sistema. En esta base, las autofunciones del Hamiltoniano pueden ser designadas por  $\psi_{\pm}$ . Denotando por  $S(\psi)$  a la entropía de von Neumann del operador de densidad reducido, obtenido trazando una de las partículas del operador de densidad de dos partículas, los autores encuentran que  $S(\xi) \leq S(\psi_{+}) = S(\psi_{-})$  para todo  $\xi = \sqrt{\alpha}\psi_{+} + \sqrt{1-\alpha}\psi_{-}$ , donde  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Es decir, la entropía de la superposición de estos estados degenerados es menor a la de los estados superpuestos.

El objetivo que nos proponemos en este trabajo es estudiar si esta propiedad se extiende a distintos sistemas de interés, y generar un criterio que permita predecir este comportamiento sin tener que calcular  $S(\xi)$  para todas las superposiciones  $\xi$  posibles.

## PROPUESTA

Consideremos sistemas bipartitos en el espacio de Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , donde  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$  son los espacios de Hilbert de los subsistemas  $A$  y  $B$  de iguales dimensiones ( $\dim(\mathcal{H}_A) = \dim(\mathcal{H}_B) = d$ ). Vamos a restringir los sistemas a aquellos en que alguna componente del momento angular es una cantidad conservada, *i.e.*, tales que

$$[\mathbf{H}, \mathbf{L}_i] = 0, \quad (3.1)$$

donde  $\mathbf{H}$  es el Hamiltoniano y  $\mathbf{L}_i$  la componente  $i$  del momento angular, con  $i = x, y, z$ .

Para los autoestados degenerados de este Hamiltoniano,  $|\psi_j\rangle$ , tales que

$$\mathbf{L}_i |\psi_j\rangle = m_j |\psi_j\rangle. \quad (3.2)$$

nos centraremos en superposiciones de dos estados degenerados, que son también autoestados de la componente  $z$  componente del momento angular total,  $\mathbf{L}_z$ , con autovalores  $\pm \hbar m$ . En particular, si  $|\psi_0\rangle$  y  $|\psi_1\rangle$  son dos de estos autoestados, consideraremos la superposición

$$|\psi_\alpha\rangle = \sqrt{\alpha} |\psi_0\rangle + \sqrt{1-\alpha} |\psi_1\rangle \quad ; \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (3.3)$$

y la matriz densidad reducida asociada al subsistema  $A$ ,

$$\rho_{A,\alpha} = \text{Tr}_B |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha|, \quad (3.4)$$

para estudiar la entropía de von Neumann de dichos estados en función de  $\alpha$ , con el objetivo de obtener un criterio que nos permita identificar las superposiciones de estados que presenten la mayor cantidad de entrelazamiento. Para ello, será necesario resolver el problema de autovalores para los estados,

$$\rho_{A,\alpha} \varphi_j^\alpha = \lambda_j^\alpha \varphi_j^\alpha, \quad (3.5)$$

donde  $\{\varphi_j^\alpha\}$  y  $\{\lambda_j^\alpha\}$  son los autovectores y autovalores del estado  $\rho_{A,\alpha}$ .

La bipartición de los sistemas para obtener  $\rho_{A,\alpha}$ , en el caso de dos partículas, es una elección bastante natural: consideramos a las partículas 1 y 2 como los subsistemas  $A$  y  $B$  respectivamente, y la traza se realiza sobre el espacio Hilbert de una de las partículas. En modelos de una sola partícula esta elección no es posible, y consideramos a las partes del sistema como los grados de libertad espaciales. De esta manera,  $\rho_{A,\alpha}$  se obtiene trazando una de las direcciones espaciales. Este procedimiento se ha utilizado en otros trabajos, para evaluar la separabilidad de funciones de onda que pueden escribirse como el producto de dos funciones que dependen de variables separadas [15], y también para evaluar el entrelazamiento entre grados de libertad de sistemas de una partícula, por ejemplo entre la polarización y los grados de libertad espaciales de un fotón [13] o estados armónicos tipo Rydberg [57].

Para evitar las dificultades que surgen cuando se requieren soluciones numéricas, y los errores numéricos asociados, trabajamos con modelos con solución exacta: dos osciladores armónicos interactuantes (Sección 3.3.1), el spherium [58], [59], sistema que pertenece a la clase de sistemas cuasi-exactamente solubles (Sección 3.3.2), un fotón cuyo estado es solución de las ecuaciones electromagnéticas en la aproximación paraxial [60] (Sección 3.3.3) y un sistema de dos spines interactuantes (Sección 3.3.4).

## 3.2. Criterio para la convexidad de la superposición de estados degenerados del momento angular

Antes de introducir el criterio, consideremos conceptualmente el escenario que estamos estudiando...

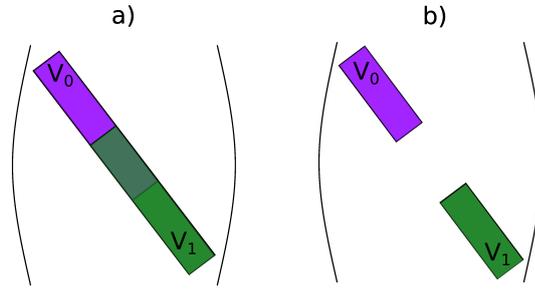
### Idea Cualitativa

Consideremos los subespacios  $V_0$  y  $V_1$  de  $\mathcal{H}_A$ , dados por

$$V_\alpha = \text{span}(\{\varphi_j^\alpha\}), \quad (3.6)$$

donde  $\varphi_j^\alpha$  son las autofunciones de la Ecuación 3.5, y consideramos los índices  $j$  tales que  $\lambda_j^\alpha > 0$ . Aquí  $\alpha = 0, 1$  indica los autoestados  $|\psi_0\rangle$  y  $|\psi_1\rangle$  en la Ecuación 3.3. Los espacios así definidos son los subespacios no nulos del espacio de Hilbert del subsistema para cada estado ( $\alpha = 0, 1$ ).

Teniendo en cuenta que  $V_0$  y  $V_1$  son subespacios del mismo espacio de Hilbert -el espacio de Hilbert del subsistema  $A$ - podemos representarlos gráficamente como los autovalores no nulos en la misma matriz densidad reducida, expresada en la base diagonal, de la siguiente manera:



donde el subespacio violeta representa a  $V_0$  y el verde a  $V_1$ . En esta Figura, dos de los posibles escenarios están representados. A la derecha, en b), se muestra uno de los casos en que la intersección de los espacios es nula. En este escenario, podemos ver que la superposición de los estados tiene un espacio no nulo significativamente mayor al de los estados por separado, lo que en términos de entropía implica un mayor entrelazamiento. Por lo contrario, cuando los subespacios tienen intersección no nula, como en el estado de la izquierda, en a), superponerlos no necesariamente va a aumentar la entropía. Si esto ocurre, va a depender fuertemente de cómo es la superposición de los estados, es decir, de  $\alpha$ . Las posibilidades para el estado de la izquierda en función del parámetro de superposición son que el contenido de entrelazamiento aumente o disminuya con respecto a los estados  $|\psi_0\rangle$  y  $|\psi_1\rangle$ .

Con este escenario en mente, buscamos un criterio que nos permita saber cuándo es una ventaja en cuanto a entrelazamiento superponer dos estados degenerados, sin tener que evaluar la entropía para cada posible valor de  $\alpha$ .

La idea presentada arriba es una imagen cualitativa del objetivo y motivación de nuestro trabajo. Para poder cuantificarla, y así poder predecir y comparar la cantidad de entrelazamiento presente en los distintos estados  $|\psi_\alpha\rangle$  considerados, es necesario considerar cantidades que contengan la información planteada en su desarrollo. Para ello definimos las entropías *not-shareable*, *not-shared* y *remaining*, que presentamos a continuación.

- Entropía *not-shareable* ( $S_{ns}$ ) del subsistema  $A$  entre  $|\psi_0\rangle$  y  $|\psi_1\rangle$ , dada por

$$S_{ns}(\rho_{A,0}) = - \sum_{\lambda_i^{A,0} > 0} \Theta \left[ \lambda_i^{A,0} - \langle \rho_{A,1} \rangle_i \right] \log_2(\lambda_i^{A,0}), \quad (3.7)$$

donde  $\langle \rho_{A,1} \rangle_i = \text{Tr}(P_i^{A,0} \rho_{A,1})$ ,  $P_i^{A,0}$  es un proyector unidimensional asociado al autovalor  $\lambda_i^{A,0}$ , y  $\Theta[x] = x \theta(x)$ , donde  $\theta(x)$  es la función escalón Heaviside.

Esta entropía busca seleccionar, a través de la función  $\Theta$ , los autovalores que corresponden a elementos de la base del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_A$  que las autofunciones  $|\psi_0\rangle$  y  $|\psi_1\rangle$  no comparten, es decir, representarían los elementos de la base que pertenecen a  $V_1$  pero no a  $V_0$ . Sin embargo, cuando los autovalores de  $\rho_{A,0}$  son degenerados, los proyectores  $P_i^{A,0}$  no están unívocamente definidos, y dependiendo de la elección de estos proyectores obtenemos diferentes valores de la cantidad  $S_{ns}$ . Como veremos en la Sección 3.3.4, este problema se evita descomponiendo la Ecuación 3.7 en términos de autovalores degenerados y no-degenerados. Haciendo esto obtenemos la expresión final para la entropía *not-shareable*:

$$S_{ns}(\rho_{A,0}) = - \sum_i \sum_{\nu=1}^{\text{deg}(\lambda_i^{A,0})} \Theta \left[ \lambda_i^{A,0} - \langle \rho_{A,1} \rangle_{i,\nu} \right] \log_2(\lambda_i^{A,0}), \quad (3.8)$$

donde la primera suma recorre los autovalores de diferente valor, y la segunda recorre la degeneración de dichos autovalores.

A partir de esto, podemos definir una segunda entropía:

**Entropía *Not-Shared***

$$S_{NS}(\rho_{A,0}) = - \sum_i \min \left\{ \sum_{\nu=1}^{\text{deg}(\lambda_i^{A,0})} \Theta \left[ \lambda_i^{A,0} - \langle \rho_{A,1} \rangle_{i,\nu} \right] \right\} \log_2(\lambda_i^{A,0}), \quad (3.9)$$

donde el mínimo se obtiene en *cada* subespacio asociado a los autovalores degenerados de  $\rho_{A,0}$ . Para degeneraciones bajas de los estados considerados, este mínimo puede obtenerse de manera analítica.

**La entropía *Not-Shared* contiene información de  $\rho_{A,0}$  que no se puede obtener del estado  $\rho_{A,1}$  midiendo al último en la base de autoproyectores del primero.**

Por último, consideramos la entropía del estado  $\rho_{A,0}$ ,  $S(\rho_{A,0})$ , para obtener otra entropía necesaria para nuestro criterio:

**Entropía *Remaining***

$$S_R(\rho_{A,0}) = S(\rho_{A,0}) - S_{NS}(\rho_{A,0}). \quad (3.10)$$

**La entropía *Remaining* cuantifica cuánta información se puede obtener sobre  $\rho_{A,0}$  cuando  $\rho_{A,1}$  se mide utilizando los proyectores asociados a  $\rho_{A,0}$ .**

Esto puede verse directamente cuando ambos estados,  $\rho_{A,0}$  y  $\rho_{A,1}$  tienen valores propios no degenerados y el mismo conjunto de vectores propios. En ese caso

$$S_R = - \sum_i \min(\lambda_i^{A,0}, \lambda_i^{A,1}) \log_2(\lambda_i^{A,0}), \quad (3.11)$$

y la suma corre sobre los valores propios  $\lambda_i^{A,0}$  cuyos vectores propios pertenecen a  $V_A \cap V_B$ .

Estas dos cantidades, las entropías *Remaining* (R) y *Not-Shared* (NS), representan entonces cuánto *comparten* o *no comparten*, respectivamente, los estados  $|\psi_0\rangle$  y  $|\psi_1\rangle$  en la base de  $\mathcal{H}_A$ . Es decir, son cantidades que pueden servir como indicadores de los escenarios planteados en el Cuadro 3.2. Como veremos en la Sección 3.3, a partir de estas cantidades se puede definir un criterio para predecir el comportamiento de la entropía en función de  $\alpha$ , y puede expresarse de la siguiente manera:

Dados dos autoestados degenerados de un sistema bipartito, con autoestados de una componente del momento angular dados por  $\pm\hbar m$ , la cantidad

$$Q_c = \text{sgn}(S_R(\rho_{A,0}) - S_{NS}(\rho_{A,0})), \quad (3.12)$$

donde  $S_{NS}$  y  $S_R$  están definidas en las Ecuaciones 3.9 y 3.10, cumple la propiedad

$$Q_c = \begin{cases} 1 & \text{cuando } S(\rho_{A,\alpha}) \text{ es convexa} \\ -1 & \text{cuando } S(\rho_{A,\alpha}) \text{ es cóncava.} \end{cases} \quad (3.13)$$

Nuestro criterio establece una relación entre la convexidad de la entropía de la superposición de estados degenerados en función del parámetro de superposición,  $\alpha$ , con una cantidad entrópica que depende sólo de los estados a partir de los cuales se hace la superposición.

Vale la pena señalar que el criterio se puede establecer también en términos del estado  $\rho_{A,1}$  con respecto al estado  $\rho_{A,0}$ , sin que las implicaciones del criterio propuesto se vean afectadas, así como utilizando  $\rho_{B,\alpha}$  como elemento de estudio, ya que el sistema bajo estudio es bipartito (ver Ecuación 2.15).

### 3.3. Testeando el criterio

En esta Sección se presentan los resultados obtenidos al testear el criterio propuesto en: dos osciladores armónicos interactuantes (3.3.1), el modelo spherium (3.3.2), la función de onda Laguerre-Gaussiana de un fotón (3.3.3) y las autofunciones de la suma de dos operadores de momento angular (Sección 3.3.4).

Los sistemas considerados fueron elegidos por ser modelos exacta o casi exactamente solubles, cuyos estados no requirieran una cantidad excesiva de cálculos a realizar, o tiempo de cómputo elevado. Cumpliendo estas condiciones encontramos algunos sistemas fuertemente correlacionados, y algunos que sirven como *toy models* para testear el criterio. Es notable que pudimos formular un criterio que nos brinde la información buscada en todos ellos.

#### 3.3.1. Autoestados de dos osciladores armónicos interactuantes

Entre los problemas bipartitos con solución exacta tenemos el de dos partículas confinadas en una trampa armónica, que interactúan armónicamente entre sí. En el caso bidimensional, el

Hamiltoniano de este sistema está dado por

$$H(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 + \frac{1}{2} |\vec{x}_1|^2 + \frac{1}{2} |\vec{x}_2|^2 + \lambda |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|^2, \quad (3.14)$$

donde  $\vec{x}_i = (x_i, y_i)$ ,  $\nabla_i^2$  es el Laplaciano bidimensional, e  $i = 1, 2$  es el índice que numera las partículas. Por simplicidad en la notación, trabajamos con unidades tales que  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ ,  $\omega = 1$ , donde  $m$  es la masa y  $\omega$  es la frecuencia de ambos osciladores. El parámetro  $\lambda$  permite pasar de un sistema no interactuante ( $\lambda = 0$ ), a uno interactuante ( $\lambda > 0$ ).

Este sistema puede mapearse a un sistema de dos osciladores no interactuantes, para cualquier valor de  $\lambda$ . Haciendo esto, es posible obtener los autoestados de cada oscilador, y los autoestados del sistema pueden escribirse como el producto de las soluciones para los sistemas de una partícula. Para ello se introducen las coordenadas *centro de masa* y *relativas* como

$$\vec{R} = \vec{x}_1 + \vec{x}_2 \quad \text{y} \quad \vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2, \quad (3.15)$$

respectivamente. Con este cambio de coordenadas, el Hamiltoniano de la Ecuación 3.14 puede escribirse como

$$\begin{aligned} H(\vec{R}, \vec{r}) &= H_{\omega_R}(\vec{R}) + H_{\omega_r}(\vec{r}) \\ &= -\nabla_R^2 + \frac{1}{4} |\vec{R}|^2 - \nabla_r^2 + \left(\frac{1}{4} + \lambda\right) |\vec{r}|^2, \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde  $H_\omega$  es el Hamiltoniano del oscilador armónico bidimensional con frecuencia  $\omega$  y masa  $m = 1/2$ . Como se puede ver en la Ecuación 3.16, el oscilador que depende de las coordenadas relativas tiene una frecuencia  $\omega_r = \sqrt{4\lambda + 1}$ , mientras que en las coordenadas centro de masa, la frecuencia es  $\omega_R = 1$ .

Las autofunciones y los autovalores de los Hamiltonianos de una partícula en la Ecuación 3.16 son conocidos en varios sistemas de coordenadas [61]. En coordenadas cilíndricas, las autofunciones  $|m, n\rangle$  del oscilador bidimensional en el plano  $(x, y)$  de una partícula que son, a su vez, autofunciones de la componente  $z$  del momento angular ( $L_z$ ), satisfacen

$$\begin{aligned} H_\omega |n, m\rangle &= (2n + |m| + 1)\omega |n, m\rangle, \\ L_z |n, m\rangle &= m |n, m\rangle, \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde  $\omega$  representa a las frecuencias  $\omega_R$  o  $\omega_r$  y  $n, m$  son los números cuánticos que determinan el estado.

Para el Hamiltoniano de dos partículas, Ecuación 3.16, tenemos entonces que los estados  $|n, m, l, p\rangle = |n, m\rangle |l, p\rangle$ , satisfacen

$$H |n, m, l, p\rangle = [(2n + |m| + 1)\omega_R + (2l + |p| + 1)\omega_r] |n, m, l, p\rangle, \quad (3.18)$$

y

$$L_z |n, m, l, p\rangle = (m + p) |n, m, l, p\rangle, \quad (3.19)$$

donde  $L_z = L_{z_R} + L_{z_r}$  es la suma de las componentes  $z$  del momento angular para los osciladores *centro de masa* ( $R$ ) y *relativo* ( $r$ ).

A partir de las Ecuaciones 3.18 y 3.19 podemos ver que, cuando  $\omega_r = \sqrt{4\lambda + 1}$  es un número natural, hay distintas formas de seleccionar los números cuánticos  $n, m, l$  y  $p$  para obtener autofunciones degeneradas con diferentes valores de número cuántico del momento angular, a partir

de las cuales se generará el estado superpuesto en la Ecuación 3.3. En particular, trabajaremos con la superposición de estados que posean la misma energía y autovalores opuestos para  $L_z$ .

Para definir los subsistemas  $A$  y  $B$  para este sistema, tomamos a las partículas 1 y 2. Por lo tanto, la matriz de densidad reducida de un determinado estado esta dada por

$$\rho_A(\vec{x}_1, \vec{x}'_1) = \int d^2 x_2 \psi_{n,m,l,p}^*(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \psi_{n,m,l,p}(\vec{x}'_1, \vec{x}_2). \quad (3.20)$$

Es decir, la traza se toma sobre los grados de libertad espaciales de la partícula 2. En la Ecuación 3.20, la función  $\psi_{n,m,l,p}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$  es la función de onda correspondiente al estado  $|n, m, l, p\rangle$ . La matriz densidad reducida para el estado mixto  $\rho_{A,\alpha}$  se define de manera análoga a la aquí presentada. Para mas detalles sobre una expresión explícita de las autofunciones del sistema, y de los cálculos necesarios para implementar el criterio en estos estados, ver el Apéndice B.

A continuación, veremos cómo actúa el criterio en este sistema para algunos casos particulares.

### Osciladores no interactuantes ( $\lambda = 0$ )

El sistema bajo estudio, cuyo Hamiltoniano se presentó en la Ecuación 3.14, admite dos regímenes en que las partículas interactúan entre sí, o no lo hacen. Comenzaremos analizando este último caso.

Para seleccionar estados a partir de los cuales construiremos el estado mixto, la única restricción sobre los números cuánticos fue impuesta para obedecer a la formulación del criterio. Tomamos estados con números cuánticos  $m$  y  $p$  tales que la superposición se dé entre estados con momento angular total opuesto, mientras que para  $n$  y  $l$  la condición está impuesta por la Ecuación 3.18, para que los autoestados sean degenerados.

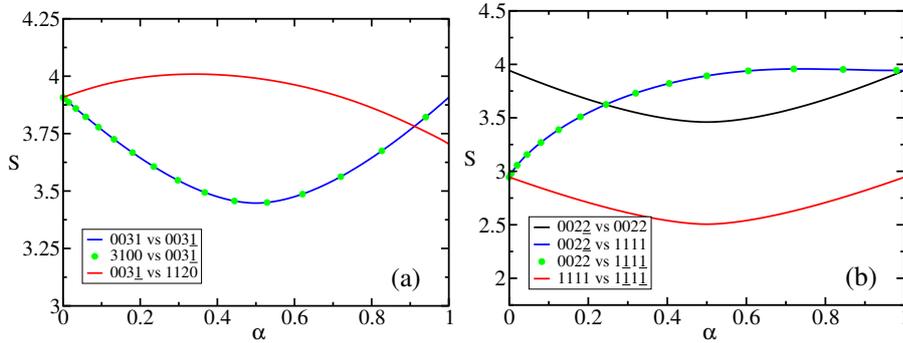


Figura 3.1: Entropía de von Neumann en función del parámetro de superposición  $\alpha$ , para los estados  $|\psi_\alpha\rangle = \sqrt{\alpha}|n, m, l, p\rangle + \sqrt{1-\alpha}|n', m', l', p'\rangle$  con  $\lambda = 0$  (osciladores no interactuantes). En las leyendas, los números cuánticos negativos,  $-n$ , están denotados por  $\underline{n}$ . (a) Para  $|m+p|=1$ , se muestran las superposiciones de los estados  $|1, 1, 2, 0\rangle$  con  $|0, 0, 3, -1\rangle$  (curva roja),  $|0, 0, 3, -1\rangle$  con  $|0, 0, 3, 1\rangle$  (curva azul) y  $|0, 0, 3, -2\rangle$  con  $|3, 1, 0, 0\rangle$  (puntos verdes). (b) Para  $|m+p|=2$ , se muestran las superposiciones de los estados  $|0, 0, 2, -2\rangle$  con  $|0, 0, 2, 2\rangle$  (curva negra),  $|0, 0, 2, -2\rangle$  con  $|1, 1, 1, 1\rangle$  (curva azul),  $|0, 0, 2, 2\rangle$  con  $|1, -1, 1, -1\rangle$  (puntos verdes) y  $|1, 1, 1, 1\rangle$  con  $|1, -1, 1, -1\rangle$  (línea roja). Ver los valores de  $Q_c$  correspondientes en la Tabla 3.1.

En la figura 3.1 se muestra el comportamiento de la entropía de von Neumann como función del parámetro de superposición  $\alpha$ , para estados de la forma

$$|\psi_\alpha\rangle = \sqrt{\alpha}|n, m, l, p\rangle + \sqrt{1-\alpha}|n', m', l', p'\rangle. \quad (3.21)$$

$nmlp$	$n'm'l'p'$	curvatura	$Q_c$	$S_{vn}$	$S_{NS}$	$S_R$
$ m+p  = 1$						
003 <u>1</u>	0031	convexo	+	3.907	0	3.907
003 <u>1</u>	3100	convexo	+	3.907	0	3.907
1120	003 <u>1</u>	cóncavo	-	3.704	1.959	1.745
$ m+p  = 2$						
002 <u>2</u>	0022	convexo	+	3.94	0	3.94
002 <u>2</u>	1111	cóncavo	-	3.94	2.85	1.09
0022	<u>1111</u>	cóncavo	-	3.94	2.85	1.09
1111	<u>1111</u>	convexo	+	2.94	0	2.94

Cuadro 3.1: Entropías, curvatura y el valor de  $Q_c$  para las superposiciones de estados consideradas en la Figura 3.1. Notar que los números cuánticos negativos,  $-n$ , están denotados por  $n$ .

Como primera observación, notamos que en los casos presentados la entropía de von Neumann en función de  $\alpha$  presenta una curvatura definida: dados dos estados, la entropía de superposición es cóncava o convexa como función de  $\alpha$ . ***Esto es así para todos los casos estudiados, en todos los sistemas***, y responde a una de las preguntas planteadas al iniciar el trabajo, permitiéndonos avanzar en la formulación del criterio.

Las distintas superposiciones de estados están representadas con distintos colores en la Figura 3.1, para  $|m+p| = 1$  en el panel a) y  $|m+p| = 2$  en el panel b). En los recuadros de las figuras se indica qué estados participan de cada superposición, utilizando la notación  $n$  cuando el número cuántico es negativo. En la Tabla 3.1 se presentan los valores de  $Q_c$  para los estados presentados en la Figura 3.1, así como la curvatura observada y el valor de las entropías involucradas en el cálculo de  $Q_c$ . En todos los sistemas que analizaremos, los valores de  $S_{vn}$ ,  $S_{NS}$  y  $S_R$  se incluyen para evidenciar su variabilidad, a pesar de la cual el criterio permite obtener una correcta predicción de la curvatura de la entropía *versus*  $\alpha$ .

En el desarrollo de este primer ejemplo podemos ver, contra nuestra intuición inicial, que los estados degenerados no siempre son iso-entrópicos. En este ejemplo encontramos que la condición para que dos estados tengan la misma entropía es  $n, l = n', l'$ . Encontramos además que esta característica, si bien no era esperada, no afecta a la definición del criterio.

### Osciladores interactuantes ( $\lambda \neq 0$ )

Si bien el sistema de dos osciladores armónicos interactuantes en una trampa armónica es exactamente soluble, la evaluación de los elementos de matriz necesarios para obtener los autovalores del operador densidad reducido es un proceso computacionalmente muy exigente (ver Apéndice B). Para evitar este problema, utilizamos autofunciones variacionales -muy precisas-, obtenidas a partir de método de Rayleigh-Ritz (ver Apéndice A) utilizando como base al conjunto de funciones que son producto de las autofunciones del oscilador armónico de una partícula. La precisión de este procedimiento se puede evaluar comparando los autovalores variacionales con los autovalores exactos calculados mediante la Ecuación 3.18. Para todos los casos que se discuten en esta Sección, estas dos cantidades difieren en menos de  $1 \times 10^{-4}$ .

Una vez obtenidas las autofunciones variacionales, se pueden utilizar para evaluar la representación matricial del operador densidad reducido, y obtener sus autovalores.

Trabajar con las autofunciones variacionales presenta, sin embargo, un problema: asignar números cuánticos a los estados así obtenidos es, en la mayoría de los casos, una tarea complicada. En el sistema bajo estudio, este inconveniente puede evitarse eligiendo un valor particular del parámetro de interacción,  $\lambda = 0, 7$ , que separa adecuadamente las frecuencias  $\omega_R = 1$  y  $\omega_r \simeq$

1,949, y utilizando en la base de funciones del método funciones con valores bien definidos de  $L_z$ . Para los estados de menor energía, es posible etiquetar inequívocamente la autofunción variacional utilizando el conjunto de números cuánticos en Ecuación 3.18.

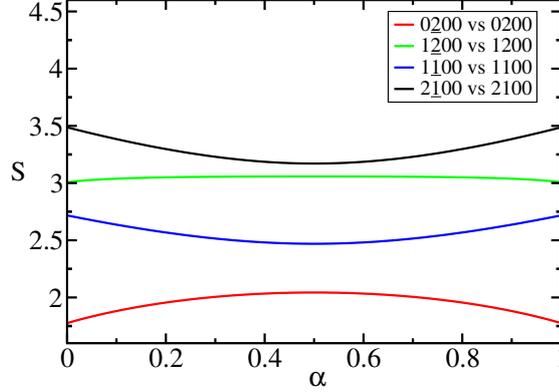


Figura 3.2: Entropía de von Neumann en función del parámetro de superposición  $\alpha$  para los estados  $|\psi_\alpha\rangle = \sqrt{\alpha}|n, m, l, p\rangle + \sqrt{1-\alpha}|n', m', l', p'\rangle$  de dos osciladores interactuantes con  $\lambda = 0,7$  y  $|m+p| = 1, 2$ . Las combinaciones de estados que se muestran son  $|0, -2, 0, 0\rangle$  con  $|0, 2, 0, 0\rangle$  (rojo),  $|1, -2, 0, 0\rangle$  con  $|1, 2, 0, 0\rangle$  (verde),  $|1, -1, 0, 0\rangle$  con  $|1, 1, 0, 0\rangle$  (azul), y  $|2, -1, 0, 0\rangle$  con  $|2, 1, 0, 0\rangle$  (negro). En la leyenda, los números cuánticos negativos,  $-n$ , están denotados por  $\underline{n}$ .

La entropía de von Neumann como función del parámetro de superposición se muestra en Figura 3.2 para distintas superposiciones de estados, cuya expresión esta dada en la Ecuación 3.21. Los valores correspondientes a las entropías de von Neumann, *not-shared* y *remaining* y a la cantidad  $Q_c$  se presentan en la Tabla 3.2. Aquí se puede observar que la curvatura obtenida para los distintos estados coincide con la predicción del criterio.

$nmlp$	$n'm'l'p'$	curvatura	$Q_c$	$S_{vn}$	$S_{NS}$	$S_R$
$ m+p  = 1$						
<u>1</u> 100	1100	convexo	+	2.717	1.034	1.683
<u>2</u> 100	2100	convexo	+	3.487	1.121	2.366
$ m+p  = 2$						
0 <u>2</u> 00	0200	cóncavo	-	1.776	1.123	0.653
<u>1</u> 200	1200	cóncavo	-	3.006	1.740	1.266

Cuadro 3.2: Entropías, curvatura y el valor de  $Q_c$  para los estados de dos osciladores interactuantes, con  $\lambda = 0,7$  y  $|m+p| = 1, 2$ , mostrados en la Figura 3.2.

Como veremos, este ejemplo muestra todos los rasgos característicos de lo que puede observarse en las superposiciones de estados degenerados. Tanto la posibilidad de que la entropía de von Neumann en función del parámetro pueda ser cóncava o convexa, como el hecho de que dos estados degenerados seleccionados con las condiciones impuestas pueden no ser iso-entrópicos, son características con las que no contábamos al iniciar este trabajo. Sin embargo, la curvatura de estos estados está bien definida, y sus cambios son predichos correctamente por el criterio presentado en Sección 3.2.

### 3.3.2. Autoestados del modelo Spherium

Como vimos en la Sección 2.1, el estudio de cantidades de información cuántica requiere el conocimiento del estado del sistema. En sistemas de dos partículas interactuantes, este trabajo esta limitado por la poca cantidad de modelos exactamente solubles disponibles. Es por esto que la mayor parte de trabajos en esta área se basa en el estudio de sistemas cuasi-exactamente solubles [62], [63], como el modelo Calogero -y sus variantes- [54]-[56].

Por modelos casi-exactamente solubles, entendemos a aquellos modelos para los cuales soluciones exactas pueden obtenerse para una porción finita del espectro de energías. Entre estos, se encuentra el modelo *Spherium*, que fue propuesto y ampliamente estudiado por Berry y colaboradores [64]-[67] para el estudio de estados y correlaciones de dos partículas confinadas en la superficie de una esfera  $\mathcal{D}$ -dimensional. Actualmente este modelo es uno de los mas completos para el estudio de correlaciones electrónicas [68]. En [58] se demostró que este modelo es exactamente soluble para combinaciones particulares del radio  $R$  y la dimensión  $\mathcal{D}$  de la esfera en cuya superficie las partículas están confinadas, encontrando además que para  $\mathcal{D} = 3$  se obtiene la mayor similitud a un sistema físico real. En esta Sección, nos enfocaremos en la descripción de este sistema y estudiaremos la aplicación de la conjetura propuesta en el mismo.

#### SISTEMAS DE DOS PARTÍCULAS EN UN POTENCIAL ESFÉRICO

Muchos métodos han sido desarrollados para el estudio de estados de uno o varios electrones en sistemas atómicos. En general, la solución a este problema se debe abordar de manera diferenciada para los distintos estados electrónicos posibles en un átomo. En el caso particular del átomo de Helio, el estudio de métodos para la obtención de sus estados data desde el trabajo de Hylleras en 1929 [69], donde se reduce el problema de autoestados para los niveles  $^1S^e$  y  $^3S^e$  a una ecuación que depende de las variables triangulares  $r_1$ ,  $r_2$  y  $r_{12}$ .

Desde esa fecha al presente, muchas aproximaciones han sido propuestas para atacar este problema en una manera más exacta. En particular, en el año 2008, Grzegorz Pestka publica un trabajo [70] en que reduce la solución de la ecuación de Shrödinger de dos partículas -no necesariamente idénticas- en un potencial esférico, a la solución de un sistema finito de ecuaciones.

El Hamiltoniano estudiado en [70], en coordenadas esféricas, está dado por:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + V(r_1, r_2, r_{12}), \quad (3.22)$$

donde  $\nabla_i^2$  es el Laplaciano en las coordenadas de la partícula  $i$ , y  $V$  es el potencial que depende únicamente de las coordenadas radiales de las partículas,  $r_1$  y  $r_2$ , y de la distancia entre las mismas,  $r_{12}$ . Esta coordenada, aunque redundante, se incluye porque simplifica el tratamiento de las autofunciones obtenidas [69], y es de particular interés en sistemas donde  $r_1$  y  $r_2$  son constantes, como es el caso del Spherium, representado en la Figura 3.3.

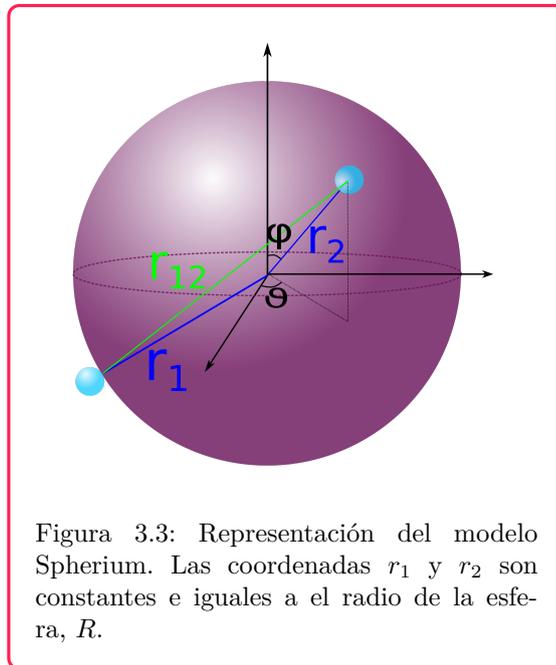


Figura 3.3: Representación del modelo Spherium. Las coordenadas  $r_1$  y  $r_2$  son constantes e iguales a el radio de la esfera,  $R$ .

Para el Hamiltoniano en la Ecuación 3.22, el autor busca autofunciones que sean, a su vez, autofunciones del momento angular orbital total y de una de sus componentes. Para ello, toma funciones que son un producto entre una función radial y una función angular,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(r_1, r_2, r_{12})\Omega_{l_1 l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2), \quad (3.23)$$

donde  $\Omega_{l_1 l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$  son las autofunciones del momento angular, con autovalor  $l_i$  para cada partícula.

A partir de esto, encuentra sistemas de ecuaciones a resolver para obtener los autoestados del sistema para distintos valores del momento angular total, y distintas paridades. Algunos detalles del procedimiento para obtener las autofunciones, para los casos que consideramos en este trabajo, se encuentran en el Apéndice C.

## AUTOESTADOS DEL SPHERIUM PARA $L = 2$

El Hamiltoniano de la Ecuación 3.22 puede reducirse al del modelo Spherium tomando

$$V(r_1, r_2, r_{12}) = \frac{1}{r_{12}}. \quad (3.24)$$

A partir de los cálculos presentados en el Apéndice C, se pueden obtener las autofunciones para este modelo. En particular, consideramos el caso en que el número de momento angular total es  $L = 2$ , y aquellos estados con paridad  $\pi = (-1)^{L+1}$ . Estas autofunciones dependen únicamente de dos funciones radiales,  $\Phi_{12}$  y  $\Phi_{21}$  (donde los subíndices indican los momentos angulares de las dos partículas,  $l_1, l_2 = 1, 2$ ) que son las soluciones al sistema de ecuaciones acopladas

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{4R^2 - r_{12}^2}{R^2 r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{6R^2 - 2r_{12}^2}{R^2 r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) + \frac{1}{r_{12}} - E \right] \Phi_{12} \\ & + \frac{1}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \Phi_{21} = 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{4R^2 - r_{12}^2}{R^2 r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{6R^2 - 2r_{12}^2}{R^2 r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right) + \frac{1}{r_{12}} - E \right] \Phi_{21} \\ & + \frac{1}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \Phi_{12} = 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

En las Ecuaciones 3.25 y 3.26 la única coordenada involucrada es  $r_{12}$ , ya que los radios de cada partícula son fijos ( $r_1 = r_2 = R$ ).

Una solución particular a estas ecuaciones es de la forma  $\Phi_{12} = \Phi_{21} = \Phi$ , con lo que las ecuaciones 3.25 y 3.26 se reducen a una única ecuación, dada por

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \left( \frac{4}{r_{12}} - \frac{3}{2R^2} r_{12} \right) \frac{\partial}{\partial r_{12}} - \frac{1}{r_{12}} + E \right] \Phi = 0. \quad (3.27)$$

Usando el ansatz

$$\Phi = 1 + r_{12}/\alpha, \quad (3.28)$$

encontramos que esta función es una solución exacta al problema para  $\alpha = 4$  y  $R^2 = 6$ , donde  $R$  es el radio de la esfera.

Con esto, y los resultados para las funciones  $\Omega_{l_1, l_2}$  de la Ecuación 3.23 (ver Apéndice C), obtenemos el conjunto de funciones de onda con  $L = 2$  y  $M = 0, \pm 1, \pm 2$  dadas por

$$\Psi_{2,M}(\Omega_1, \Omega_2, r_{12}) = (\mathcal{Y}_{1,2}^{2,M}(\Omega_1, \Omega_2) - \mathcal{Y}_{1,2}^{2,M}(\Omega_2, \Omega_1))(1 + r_{12}/4), \quad (3.29)$$

donde  $\mathcal{Y}_{1,2}^{2,M}(\Omega_1, \Omega_2)$  son las autofunciones habituales del momento angular total definidas en términos de los armónicos esféricos y los coeficientes de Clebsch-Gordan.

Para la superposición de estados, tomamos

$$\psi_\alpha^{|M|} = \sqrt{1-\alpha}\Psi_{2,|M|} + \sqrt{\alpha}\Psi_{2,-|M|}. \quad (3.30)$$

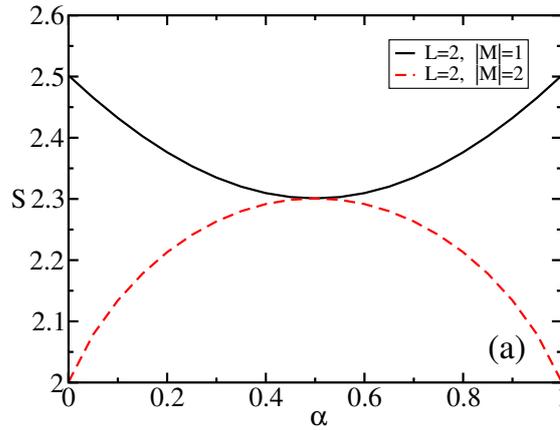


Figura 3.4: Entropía de von Neumann en función del parámetro de superposición  $\alpha$ , para el modelo Spherium con  $L = 2$ . Los estados presentados son combinaciones lineales de los estados en la Ecuación 3.30, con  $|M| = 1$  en negro y  $|M| = 2$  en rojo.

Como se puede ver en la Figura 3.4 para las dos elecciones posibles,  $|M| = 1, 2$ , la entropía de von Neumann es convexa para  $|M| = 1$  (curva negra) y cóncava para  $|M| = 2$  (curva roja). La cantidad  $Q_c$ , mostrada en Tabla 3.3, predice correctamente la convexidad en ambos casos.

$LM$	$LM'$	curvatura	$Q_c$	$S_{NS}$	$S_R$
21	<u>21</u>	convexo	+	0.917	1.584
22	<u>22</u>	cóncavo	-	1.422	0.578

Cuadro 3.3: Curvatura, entropías y el valor de  $Q_c$  para los estados incluidos en la Figura 3.4.

La complejidad en el cálculo de los estados, y en la implementación numérica para la obtención de los resultados, hace que probar el criterio para mas autoestados del sistema no sea una tarea redituable. Sin embargo, los casos analizados suman evidencia al correcto funcionamiento del criterio propuesto.

### 3.3.3. Estados de Laguerre-Gauss de un fotón

Otro candidato interesante para testear el criterio, es el estado de dos fotones entrelazados. Los estados de dos fotones pueden construirse, desde un punto de vista teórico, aplicando dos

operadores de creación al estado de vacío. Desde el punto de vista experimental, el método más utilizado es la conversión paramétrica descendente espontánea (SPDC por sus siglas en inglés) [60]. Es bien sabido que el mecanismo SPDC proporciona un par de fotones en un estado entrelazado, que puede ser utilizado para realizar diferentes tareas de información cuántica, convirtiendo un fotón de mayor energía (fotón de bombeo) en una pareja de fotones de menor energía.

Sin embargo, el estado de dos fotones depende del modo del fotón de bombeo y de las condiciones de conservación de la fase total. Por lo tanto, para analizar un caso más sencillo, nos centramos en los estados de un fotón y utilizamos el concepto de entrelazamiento de una sola partícula [13], donde se traza un grado de libertad de la función de onda del fotón.

Como estamos interesados en estados que son autoestados  $L_z$ , los estados Laguerre-Gaussianos de un fotón son una opción para probar el criterio. Estos estados, que son los modos transversales que describen la propagación libre de un fotón con energía  $\hbar\omega_k$  y son soluciones de la ecuación de Helmholtz en la aproximación paraxial, están dados por [13], [60]

$$u_{lm}^{LG}(k; \vec{r}, t) = \frac{4\pi(-1)^{l+|m|}l!}{s^{2(l+|m|+1)}(z)} r^{|m|} e^{im\phi} L_l^{|m|} \left( \frac{r^2}{s^2(z)} \right) e^{ikz - i\omega_k t - r^2/s^2(z)}, \quad (3.31)$$

donde  $r$ ,  $\phi$ ,  $z$  son las coordenadas cilíndricas,  $m$  es el número cuántico de la componente  $z$  del momento angular orbital,  $l \geq 0$  el índice radial,  $L_l^{|m|}$  son los polinomios de Laguerre modificados, y la función  $s(z)$  es una cantidad clásica que cuantifica el ancho del haz a lo largo de la dirección  $z$ :

$$s^2(z) = s_0^2 + i \frac{2z}{k}. \quad (3.32)$$

Las distintas combinaciones de los números cuánticos que definen a este estado, dan lugar a distintos perfiles del haz, algunos de los cuales se muestran en a Figura 3.5.

De aquí en adelante, suprimimos el superíndice en  $u_{lm}^{LG}$  para simplificar la notación y hacemos el cambio de variable  $x = r/s(z)$ .

Para una superposición dada por

$$|\psi_\alpha\rangle = \sqrt{\alpha} |u_{lm}\rangle + \sqrt{1-\alpha} |u_{l'm'}\rangle, \quad (3.33)$$

donde tanto  $l, m$  como  $l', m'$  son números cuánticos compatibles con la ecuación 3.31, calculamos la matriz de densidad reducida

$$\begin{aligned} \rho_{red}(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} dy & \{ \alpha u_{lm}^*(x, y, z) u_{lm}(x', y, z) \\ & + (1-\alpha) u_{l'm'}^*(x, y, z) u_{l'm'}(x', y, z) \\ & + \sqrt{\alpha(1-\alpha)} [u_{lm}^*(x, y, z) u_{l'm'}(x', y, z) \\ & + u_{l'm'}^*(x, y, z) u_{lm}(x', y, z)] \}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde  $z$  se considera un parámetro y  $x, y$  son las coordenadas cartesianas perpendiculares a  $z$ . La definición de la matriz densidad reducida en coordenadas cartesianas se debe a que en el caso

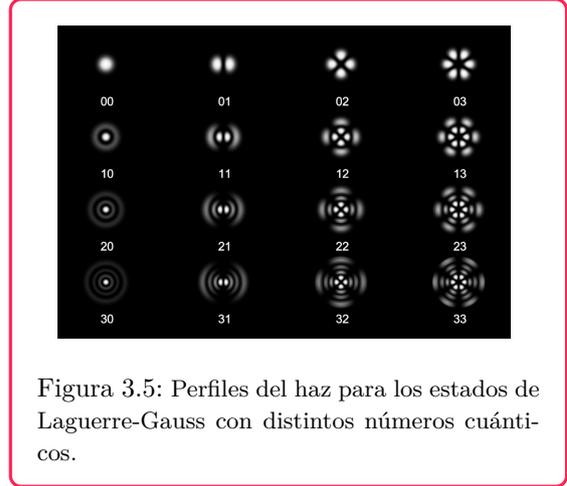


Figura 3.5: Perfiles del haz para los estados de Laguerre-Gauss con distintos números cuánticos.

de una única partícula, la partición del sistema debe ser sobre distintos grados de libertad del estado de la misma: una vez fijado  $z$ , consideramos a las coordenadas  $x$  e  $y$  como los subsistemas  $A$  y  $B$ , obteniendo así la entropía de espacio real (2.2.3). El cambio de coordenadas, de cilíndricas a cartesianas, obedece a la *necesidad* de que estos subsistemas estén correlacionados de alguna manera: como se puede ver en la Ecuación 3.31, en coordenadas cilíndricas a  $z$  fijo el estado del sistema es un estado producto  $\varphi(\phi)\psi(r)$ , con lo cual  $S(\rho_{A,0}) = S(\rho_{A,1}) = 0$  para cualquier combinación de estados. Este escenario no es de interés para comprobar el criterio ya que la única posibilidad es que la entropía del estado superpuesto sea mayor o igual a la de los estados considerados.

Consideramos matrices de densidad reducidas a valores constantes de  $z$ , ya que de lo contrario los estados LG en la Ecuación 3.31 no son funciones de cuadrado integrable. Esto podría evitarse si se implementa el cálculo de las matrices de densidad reducidas, y las correspondientes entropías, utilizando modos de LG en una cavidad [71], [72], que son estados de cuadrado integrable similares a los de la Ecuación 3.31, por lo que la dependencia de la variable  $z$  se puede trazar completamente. Sin embargo, no estudiaremos este caso por la dificultad analítica que estos estados representan, y porque consideramos que, desde el punto de vista del criterio propuesto, estos estados no representan un nuevo escenario.

Para testear el criterio es necesario obtener los elementos de la matriz

$$[\rho_{red}]_{ab} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' f_a(x) \rho_{red}(x, x') f_b(x'), \quad (3.35)$$

donde las funciones de una coordenada para la base variacional utilizadas son las funciones de Hermite

$$f_a(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^a a!}} H_a(x) e^{-x^2/2}, \quad a = 0, 1, 2, \dots \quad (3.36)$$

Una vez obtenida la expresión matricial del operador densidad reducido,  $\rho_{red}$ , podemos proceder a su diagonalización para obtener los autovalores y autofunciones necesarias para aplicar el criterio.

La figura 3.6 muestra los resultados obtenidos para distintas superposiciones  $|\psi_\alpha\rangle$ . Como se puede observar, los autoestados de un fotón no pueden proporcionar una superposición con una entropía de von Neumann mayor a la de los estados superpuestos. Esta conclusión, que podría considerarse erróneamente una consecuencia del muestreo de casos utilizado, se debe a que la función de onda de un fotón depende de las dos coordenadas transversales,  $x$  e  $y$ , exactamente de la misma manera. Queda claro a partir de la ecuación 3.31 que el estado con número cuántico  $m$  depende del mismo conjunto de polinomios de Laguerre que el estado con número cuántico  $-m$ . Así, al trazar una u otra coordenada las correspondientes matrices de densidad reducida que entran en el cálculo del criterio, ambas *ocupan* la misma porción del espacio de Hilbert de una coordenada ( $\dim(V_0) = \dim(V_1)$ ). En consecuencia, la entropía *Remaining* siempre supera a la entropía *Not-Shared*.

Como muestran los resultados incluidos en la Tabla 3.4, y acorde a las consideraciones expuestas en el párrafo anterior, el criterio predice correctamente la curvatura de las superposiciones consideradas.

Si bien en la formulación del criterio consideramos estados que sean autoestados del momento angular con autovalores opuestos, en este sistema incluimos algunas superposiciones con  $m \neq -m'$ . Como se puede ver en la Figura 3.6, si  $m = -m'$  la entropía es simétrica respecto a  $\alpha$ , propiedad que no se cumple si  $|m| \neq |m'|$ . Recordemos que el mismo comportamiento se observó para la autofunciones del oscilador armónico (Sección 3.3.1). En estos casos, que no están contemplados en las condiciones para establecer el criterio, podemos ver (Tabla 3.4) que el mismo funciona correctamente.

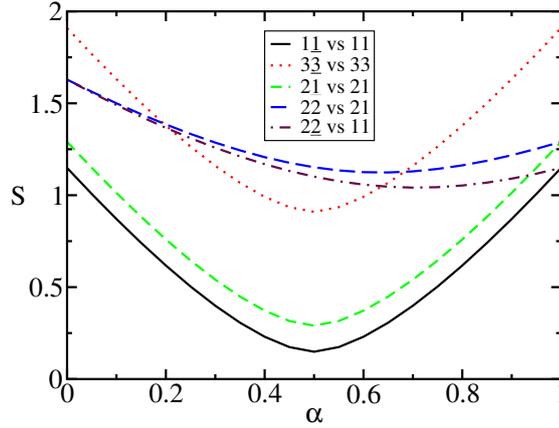


Figura 3.6: Entropía de von Neumann en función del parámetro de superposición  $\alpha$ , para los estados  $|\psi_\alpha\rangle$  de la Ecuación 3.33. Las superposiciones con  $l = l'$  y  $m = -m'$  para  $(l_{\alpha=0}, m_{\alpha=0}, l_{\alpha=1}, m_{\alpha=1}) = (1, -1, 1, 1), (3, -3, 3, 3)$  y  $(2, -1, 2, 1)$  se muestran con curvas negra, roja y verde respectivamente. Otras combinaciones, con  $(l_{\alpha=0}, m_{\alpha=0}, l_{\alpha=1}, m_{\alpha=1}) = (2, 2, 2, 1), (2, -2, 1, 1)$  se muestran en azul y marrón, respectivamente.

$lm$	$l'm'$	curvatura	$Q_c$	$S_{NS}$	$S_R$
11	$\underline{11}$	convexo	+	0	0.796
21	$\underline{21}$	convexo	+	0	0.894
21	22	convexo	+	0.194	0.700
11	$\underline{22}$	convexo	+	0.187	0.608
33	$\underline{33}$	convexo	+	0	1.323

Cuadro 3.4: Curvatura, entropías y el valor de  $Q_c$  para los estados incluidos en la Figura 3.6.

### 3.3.4. Autoestados del momento angular total de dos partículas

Los ejemplos analizados en las Secciones anteriores proporcionan una fuerte evidencia de la validez del criterio expuesto en este trabajo sobre la curvatura de la entropía de von Neumann de las superposiciones de estados degenerados. Estos ejemplos, además, representan sistemas relevantes en el estudio de sistemas cuánticos y sus propiedades. Sin embargo, las matrices de densidad reducidas,  $\rho_{A,\alpha}$ , presentan autovalores no degenerados en todos los casos. Dado que el criterio se basa en la comparación de los subespacios que expanden los autoestados de  $\rho_{A,0}$  y  $\rho_{A,1}$ , es crucial ver que ocurre cuando estos espacios tienen autovalores degenerados.

Un ejemplo exacto que muestra matrices de densidad reducida con autovalores degenerados puede construirse a partir de la suma de dos operadores de momento angular. Como es habitual, consideramos estados tales que

$$\mathbf{L}^2 |LM; l_1, l_2\rangle = L(L+1) |LM; l_1, l_2\rangle \quad ; \quad L_z |LM; l_1, l_2\rangle = M |LM; l_1, l_2\rangle, \quad (3.37)$$

donde  $\mathbf{L}^2 = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2$  y  $L_z = L_z^{(1)} + L_z^{(2)}$ . Para cada partícula, el cuadrado del operador de momento angular,  $\mathbf{L}_i^2$ , y su componente  $z$ ,  $L_z^{(i)}$ , tienen autofunciones en común, que satisfacen

$$\mathbf{L}_i^2 |l_i, m_i\rangle = l_i(l_i+1) |l_i, m_i\rangle \quad ; \quad L_z^i |l_i, m_i\rangle = m_i |l_i, m_i\rangle, \quad (3.38)$$

para  $i = 1, 2$ .

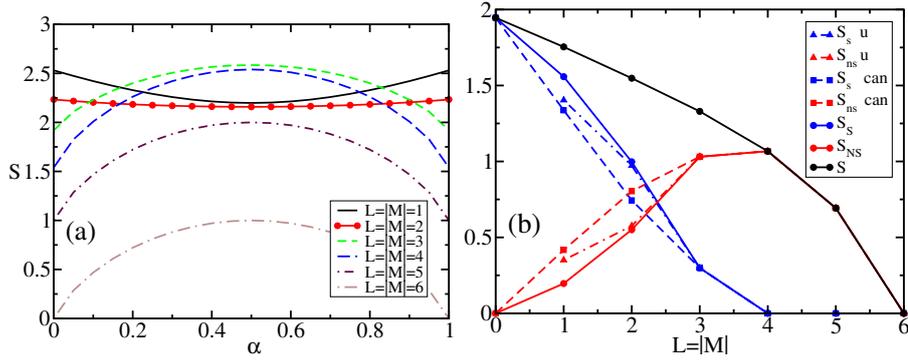


Figura 3.7: (a) Entropía de von Neumann en función del parámetro de superposición  $\alpha$ , para los estados de la Ecuación 3.42 con  $\ell = 3$  y  $L = |M|$ . Los valores de  $|M|$  y  $L$  correspondientes a cada curva se incluyen en la leyenda del panel. (b) Las entropías de von Neumann, *remaining* y *not-shared*, calculadas para los casos incluidos en el panel (a) usando puntos negros, rojos y azules respectivamente. Los cuadrados corresponden a la entropía *not-shareable* obtenida utilizando la base canónica del momento angular, y los triángulos corresponden al cálculo utilizando otra base.

Para fijar ideas, consideremos el Hamiltoniano para dos spines interactuantes, dado por

$$H = \mathbf{L}^2 - L_z^2 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 - L_z^2, \quad (3.39)$$

y consideramos dos spines con el mismo número cuántico angular,  $l_1 = l_2 = \ell$ , con lo cual  $0 \leq L \leq 2\ell$ .

Las autofunciones del Hamiltoniano en la Ecuación 3.39 están dadas por

$$\mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, \pm L} = \sum_{m_1, m_2} C(\ell, m_1; \ell, m_2; L, \pm L) Y_{\ell, m_1}(\Omega_1) Y_{\ell, m_2}(\Omega_2), \quad (3.40)$$

donde  $C(\ell, m_1; \ell, m_2; L, M)$  son los coeficientes de Clebsch-Gordan y  $Y_{\ell, m}$  los armónicos esféricos [73].

Los estados  $\mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, L}$  y  $\mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, -L}$  son degeneradas, ya que

$$H \mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, \pm L} = L \mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, \pm L}, \quad (3.41)$$

y para  $L$  fijo son los estados con mínima energía.

Para testear el criterio, consideramos las superposiciones dadas por

$$\psi_\alpha = \sqrt{\alpha} \mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, L} + \sqrt{1 - \alpha} \mathcal{Y}_{\ell, \ell}^{L, -L}. \quad (3.42)$$

La Figura 3.7(a) muestra la evaluación de  $S(\rho_{A, \alpha})$  para el caso  $\ell = 3$ ,  $|M| = L$  y  $L = 1, 2, 3, 4, 5$  y  $6$ . Se puede apreciar que los casos  $L = 3, 4, 5$  y  $6$  tienen una curvatura distinta a los casos  $L = 1$  y  $2$ . En la Figura 3.7(b) se analiza la diferencia entre las entropías *not shareable* y *not shared*, y el efecto que tienen la elección de dos bases distintas para resolver el subespacio degenerado. Recordemos que la entropía *not shared* se define para solventar el posible problema que puede representar tener autofunciones degeneradas de la matriz densidad reducida. En esta Figura se muestra, para los distintos valores de  $L$ , el valor de la entropía de von Neumann en puntos negros, la entropía *not shared* en puntos rojos, y las entropías *not shareable* en cuadrados rojos para la base canónica y en triángulos rojos para otra elección de base, discutida mas

$L$	$ M $	curvatura	$Q_c$	$S_{NS}$	$S_R$
1	1	convexo	+	0.196	1.558
2	2	convexo	+	0.550	0.997
3	3	cóncavo	-	1.031	0.299
4	4	cóncavo	-	1.067	0
5	5	cóncavo	-	0.693	0
6	6	cóncavo	0	0	0

Cuadro 3.5: Curvatura, entropías y el valor de  $Q_c$  para los estados incluidos en la Figura 3.7.

adelante. En azul, las curvas corresponden a las entropías *remaining* obtenidas a partir de las entropías *not shared* mencionadas anteriormente, utilizando el mismo código de iconos. Las líneas se incluyen para facilitar la comparación de casos. Es evidente que utilizando estas entropías el criterio detecta la convexidad correcta de todos los casos, como se muestra en Tabla 3.5, evidenciando que la entropía *not shared* es necesaria en los casos de degeneraciones en  $\rho_{A,0}$ .

Es interesante analizar con cierto detalle el caso  $\ell = 3$  y  $L = 2$ . Las matrices de densidad reducidas pueden calcularse explícitamente y, en la base de momento angular estándar de una partícula  $\{|m = 3\rangle, |m = 2\rangle, \dots, |m = -3\rangle\}$ , son matrices diagonales

$$\rho_{A,0} = \text{diag} \left\{ \frac{5}{42}, \frac{5}{21}, \frac{2}{7}, \frac{5}{21}, \frac{5}{42}, 0, 0 \right\}, \quad (3.43)$$

y

$$\rho_{A,1} = \text{diag} \left\{ 0, 0, \frac{5}{42}, \frac{5}{21}, \frac{2}{7}, \frac{5}{21}, \frac{5}{42} \right\}. \quad (3.44)$$

Como se puede observar, estas matrices tienen dos pares de autovalores degenerados, el primero y quinto son el primer par ( $\lambda = 5/42$ ), y el segundo y cuarto son el segundo ( $\lambda = 5/21$ ) para  $\rho_{A,0}$ .

Para degeneración dos de los autovalores, el mínimo involucrado en el cálculo de la entropía *not shared* se puede obtener analíticamente. Si  $\lambda$  es el autovalor degenerado de  $\rho_{A,0}$  y  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  son los autovalores de  $\rho_{A,1}$  tales que  $\lambda_i = \langle \rho_{A,1} \rangle_i$ , entonces el término

$$\tilde{S} = \min \left\{ \Theta [\lambda - \langle \rho_{A,1} \rangle_1] + \Theta [\lambda - \langle \rho_{A,1} \rangle_2] \right\} \log_2(1/\lambda), \quad (3.45)$$

se puede calcular explícitamente según

$$\tilde{S} = \begin{cases} (2\lambda - (\lambda_1 + \lambda_2)) \log_2(1/\lambda) & \text{if } \lambda > \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \\ 0 & \text{else} \end{cases}. \quad (3.46)$$

Con esto se puede obtener la entropía *not shared*, que en este caso es igual a

$$S_{NS} = \left( \frac{2}{7} - \frac{5}{42} \right) \log_2 \frac{7}{2} + \left( \frac{5}{21} \right) \log_2 \frac{21}{5}. \quad (3.47)$$

Es instructivo, y sencillo de hacer, comprobar qué ocurre si la minimización en la definición de la entropía *not shared* no se lleva a cabo, es decir qué valores se obtienen para diferentes elecciones de los proyectores unidimensionales asociados a los autovalores degenerados. Eligiendo la base canónica de momento angular de una partícula para generar los proyectores unidimensionales de la entropía *not shareable*

$$S_{ns} = - \sum_{\lambda_i^{A,0} \neq 0}^7 \Theta \left[ \lambda_i^{A,0} - \lambda_i^{A,1} \right] \log_2 \left( \lambda_i^{A,0} \right), \quad (3.48)$$

donde los valores propios, para el caso  $L = 2$ , son los de las ecuaciones 3.43 y 3.44. Los valores obtenidos utilizando la Ecuación 3.48 se muestran en la Figura 3.7(b) como cuadrados azules. No es de extrañar que los valores sean mayores que los de  $S_{NS}$ , pero es interesante que para  $L = 2$  la entropía *not shareable* es mayor que la *remainig*, lo que lleva a una predicción incorrecta de la curvatura. Una elección distinta de la base para obtener los proyectores  $P_i^{A,0}$  podría también dar buenos resultados para determinados valores de  $\ell$  y  $|M| = L$ . Por ejemplo, en la Figura 3.7 (b) los valores obtenidos utilizando otra base se muestran con puntos triangulares. Esta elección proporciona un valor de la entropía *not shareable* mayor que los de  $S_{NS}$ , y predice correctamente la curvatura. Es por esto que es necesaria la minimización en la entropía *not shared*: un buen criterio de predicción no puede depender de la base seleccionada.

### 3.4. Resumen y Conclusiones

En este trabajo nos propusimos encontrar una propiedad de la entropía de von Neumann de la superposición de estados degenerados, que implicara que su entropía sería una función convexa del parámetro de superposición. Esta propuesta se basó en el trabajo de la Referencia [53], donde esta característica se encontró en las soluciones del sistema Calogero. Desafortunadamente, un análisis teórico de la propiedad para estados arbitrarios de sistemas bipartitos es, como se puede suponer, una tarea de gran dificultad.

Comenzamos entonces con el estudio de casos particulares, que nos permitiesen formar una intuición de cómo sería la entropía de la superposición de estados. En el caso de dos osciladores armónicos bidimensionales interactuando armónicamente, encontramos que la propuesta original no era cierta, sino que la superposición de estados puede también presentar una entropía mayor a la de los estados superpuestos. Esto llevó a una primera reformulación del criterio propuesto, y el eje del trabajo cambió a poder *predecir la curvatura de la entropía en función del parámetro de superposición de los estados*.

El análisis de sistema con solución exacta o cuasi-exacta, además de presentarnos con un nuevo enfoque a este trabajo, nos hizo considerar el caso en que los autovalores de la matriz densidad reducida del sistema fueran también degenerados. Al analizar este escenario en los autoestados de la suma de dos momentos angulares, pudimos entender en profundidad cómo los autovalores de la matriz densidad reducida y sus degeneraciones influyen en la entropía de von Neumann de los estados.

La formulación original del problema suponía que para los estados considerados se cumple  $S(\rho_{A,0}) = S(\rho_{A,1})$ , y que esto era necesario para que la entropía de von Neumann  $S(\rho_{A,\alpha})$  tenga una curvatura bien definida. Encontramos, en el caso del oscilador armónico y para las funciones de Laguerre-Gauss con distintos autovalores de  $L_z$ , que esta no es una condición necesaria. Más aún, observamos que cuando  $\rho_{A,0}$  y  $\rho_{A,1}$  no son iso-espectrales el criterio predice correctamente la curvatura de la entropía, siendo indistinto si tomamos  $\rho_{A,0} = \text{Tr}_B(|\psi_L\rangle\langle\psi_L|)$  o  $\rho_{A,0} = \text{Tr}_B(|\psi_{-L}\rangle\langle\psi_{-L}|)$ , característica que hace al criterio más robusto.

Desde un punto de vista teórico, la cantidad de trabajo analítico que suponen los ejemplos presentados muestra la dificultad de construir casos exactos para probar el criterio de convexidad. Mas aún, como se puede ver para el caso del Spherium en el Apéndice C, esto se traduce en una dificultad numérica: todas las cantidades implicadas, en particular los elementos matriciales de los operadores densidad reducidos, implican un gran número de sumas anidadas, por lo que su

tiempo de evaluación crece como  $M^{nes+1}$ , donde  $nes$  es el número de sumas anidadas y  $M$  es el tamaño del conjunto de bases de una partícula que es necesario utilizar para garantizar la normalización de la matriz de densidad reducida.

Nuestros resultados sugieren que, muy probablemente, debería existir un teorema sobre la convexidad de la entropía de von Neumann de las superposiciones de estados puros pero, hasta ahora, no hemos podido formular las hipótesis precisas que lo hagan funcionar. Sabemos que las superposiciones de autoestados puros degenerados satisfacen los requisitos para tener una convexidad definida, pero no tenemos un algoritmo que nos permita generar un número de autovalores y autofunciones (o proyectores) para construir  $\rho_{A,0}$ ,  $\rho_{A,1}$  y  $\rho_{A,\alpha}$  y garantizar si  $S(\rho_{A,\alpha})$  será convexa o cóncava. En este sentido, las condiciones de que la superposición esté formada por dos estados degenerados con número cuántico  $\pm m$ , donde  $m$  es el número cuántico asociado a la componente  $z$  del momento angular total, parece ser suficiente para estados definidos sobre hipersferas o que tienen el mismo comportamiento asintótico que las autofunciones del oscilador armónico.

En el trabajo de la Referencia [53], donde surge la sospecha de la existencia del criterio, se presupone que el sistema bajo estudio presenta al menos dos cantidades conservadas. En este trabajo nos hemos restringido al caso en que esas cantidades son la energía y la componente  $z$  del momento angular total, lo cual es razonable para sistemas con una dirección preferente. En todos los casos estudiados en este trabajo, consideramos la superposición de dos estados degenerados con autovalores de la componente  $z$  del momento angular de la forma  $\pm \hbar m$ , y a partir del análisis de los resultados obtenidos logramos formular un criterio que permite predecir si  $S(\rho_{A,\alpha})$  es una función cóncava o convexa del parámetro  $\alpha$ , con lo cual sabremos si el máximo de esta función se encuentra en los extremos ( $\alpha = 0, 1$ ) o para alguna superposición de los estados considerados. Este criterio se deriva de un estudio exhaustivo de los estados de distintos sistemas físicos, lo que nos permitió definir las entropías necesarias, y entender qué significan estas cantidades desde un punto de vista físico sobre los estados involucrados.

Un siguiente paso para testear el criterio definido sería su aplicación a cadenas de spines. Esta propuesta es interesante, ya que pasaríamos a un modelo de muchos cuerpos que, en algunos casos, cuenta con solución exacta. Además, las matrices densidad reducidas pueden obtenerse utilizando las funciones de correlación de spin adecuadas para subsistemas pequeños. Sin embargo, como hasta ahora hemos estudiado sólo sistemas bipartitos formados por dos subsistemas cuyos espacios de Hilbert tienen las mismas dimensiones, no está claro si hay que hacer algunas modificaciones para que el criterio funcione en cadenas de spines.

## Capítulo 4

# Hamiltonianos multibanda y estructura de bandas en semiconductores

Las propuestas tecnológicas que utilizan como herramienta fenómenos cuánticos son cada vez más diversas y requieren de dispositivos cada vez más pequeños. La brecha entre lo que la teoría predice y la tecnología actual puede producir es cada vez menor, y los avances tanto teóricos como experimentales generan mucho dinamismo en el área.

La posibilidad de contar con nanoestructuras semiconductoras permite estudiar una gran variedad de fenómenos físicos, potencialmente aplicables a procesos de Información Cuántica. Estas nanoestructuras presentan gran maleabilidad en su construcción: pueden tener diferentes geometrías, estar constituidas de distintos materiales y los tamaños de las mismas son cada vez menores. La variedad en posibilidades para su construcción conlleva a modificaciones en la estructura de bandas del sistema, lo cual es de gran interés a la hora de satisfacer necesidades tecnológicas.

Este Capítulo está dedicado a presentar los modelos que se utilizan para estudiar nanoestructuras de materiales semiconductores, y los métodos numéricos necesarios. Los sistemas en que aplicamos estos métodos, y los resultados obtenidos, se presentan en Capítulos 5 y 6.

### 4.1. El Método $k.p$

En física de estado sólido, el estudio de la estructura de bandas y las propiedades electrónicas en sistemas semiconductores puede abordarse desde distintas aproximaciones al Hamiltoniano del sistema. Toda aproximación a un problema va a depender fuertemente de qué fenómeno se quiere estudiar, en qué rango de energías se lo quiere estudiar, para qué valores del vector de onda, etc. Por ejemplo, en el caso de nanoestructuras semiconductoras, su estudio utilizando la Aproximación de Masa Efectiva (AME) aporta una correcta descripción de los estados electrónicos de un nanohilo [74], pero no es capaz de predecir estados topológicos en pozos cuánticos semiconductores.

El método más completo del que se dispone para estudiar estos sistemas se conoce como método  $k.p$ , y se deriva de la ecuación de Schrödinger para un electrón en un potencial periódico, utilizando el teorema de Bloch y teoría de perturbación en el vector de onda  $\mathbf{k}$ . Combinando estas herramientas, es posible obtener un Hamiltoniano para sistemas de materiales semiconductores,

que incluye información de tantas bandas e interacciones como sea necesario para el problema bajo consideración.

La ventaja de este método sobre otros, como AME, es que permite tratar sistemas en que las bandas energéticas no están lejos entre sí, o son degeneradas, e incluye spin e interacciones relevantes como la interacción de spin-órbita, que da lugar a novedosos fenómenos.

### BREVE DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO *k.p*

Consideremos la ecuación de Schrödinger estacionaria,  $H\psi = E\psi$ , de un electrón en un potencial periódico, para un Hamiltoniano dado por

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p}. \quad (4.1)$$

Este Hamiltoniano está compuesto por un término de **energía cinética**, un **potencial periódico**, y la **interacción spin-órbita**. Los parámetros del Hamiltoniano son la masa del electrón libre,  $m_0$ , y la velocidad de la luz,  $c$ .

El teorema de Bloch para el movimiento de electrones en un sólido, nos permite expresar las soluciones de la ecuación de Schrödinger como

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

donde  $n$  es el índice de banda,  $\mathbf{k}$  es el vector de onda en la primer zona de Brillouin y las funciones de Bloch,  $u_{n,\mathbf{k}}$ , son funciones con la misma periodicidad que el potencial de la red.

En términos de las funciones de Bloch, la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$\mathcal{H}(\mathbf{k})u_{n,\mathbf{k}} = \mathcal{E}_n(\mathbf{k})u_{n,\mathbf{k}}, \quad (4.3)$$

donde

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2k^2}{2m_0} + V + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{k}. \quad (4.4)$$

La Ecuación 4.3 es la **ecuación *k.p***. Si las funciones  $u_{n,\mathbf{k}}$  forman una base ortonormal completa, entonces la diagonalización de la matriz

$$\langle u_{n,\mathbf{k}} | \mathcal{H} | u_{n',\mathbf{k}} \rangle \quad (4.5)$$

proporciona la relación de dispersión en la primer zona de Brillouin. Sin embargo, en la práctica este problema puede resolverse solo para subespacios finitos, lo cual lleva a relaciones de dispersión aproximadas.

Una alternativa mas simple a resolver la ecuación *k.p* para el Hamiltoniano de la Ecuación 4.4, es considerar primero el caso  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ . De esta forma, la Ecuación de Schrödinger se reduce a

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + V \right) u_{n,\mathbf{0}} = \mathcal{E}_n(\mathbf{0})u_{n,\mathbf{0}}, \quad (4.6)$$

es decir, una partícula en un potencial periódico. La soluciones a esta ecuación forman un conjunto completo y ortogonal de funciones, que pueden ser utilizadas para aplicar teoría de perturbaciones en  $\mathbf{k}$  sobre el resto de los términos del Hamiltoniano 4.4.

Otra simplificación al problema, que se suma a aplicar teoría de perturbaciones, es la de seleccionar la cantidad de bandas involucradas, es decir el tamaño de la expresión matricial de  $\mathcal{H}$ , a través de la elección de las funciones  $u_{n,\mathbf{k}}$ , como veremos en los ejemplos a continuación.

La elección de las funciones  $u_{n,\mathbf{k}}$  para que sea una cantidad determinada de bandas de energía del sistema, y aplicar teoría de perturbaciones -a cierto orden- en  $\mathbf{k}$  para resolver la ecuación  $k.p.$ , es lo que se conoce como **método  $k.p.$**

Un concepto que surge de esta descripción del método es el de **Hamiltoniano  $k.p.$**  El Hamiltoniano en la Ecuación 4.4 es el mas general para describir la estructura de bandas en un sistema que incluye la interacción spin-órbita. Ahora bien, como dijimos, su representación matricial va a depender, en primer instancia, de la cantidad de funciones  $u_{n,\mathbf{k}}$  que utilicemos. Para cada elección, y cada orden en la teoría de perturbación, la Ecuación 4.5 nos va a dar un Hamiltoniano  $k.p$  distinto. A continuación veremos algunos casos, que nos permitirán entender mejor el funcionamiento del método, y nos servirán para presentar los resultados de las siguientes Secciones.

#### 4.1.1. Aproximación de Masa Efectiva

El caso mas simple del método  $k.p$  se obtiene aplicando teoría de perturbaciones para una única banda, no degenerada y con un extremo en  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , para el Hamiltoniano de la Ecuación 4.4 sin interacción spin-orbita. Supongamos que la banda  $n$  cumple con estas características, y apliquemos teoría de perturbación a segundo orden en  $\mathbf{k}$ . La energía  $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$  en la Ecuación 4.3 en este escenario está dada por [61]

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n,\mathbf{0}} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n',\mathbf{0}} \rangle|^2}{\mathcal{E}_n(\mathbf{0}) - \mathcal{E}_{n'}(\mathbf{0})}. \quad (4.7)$$

A partir de esto, podemos definir la masa efectiva

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2 k^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n,\mathbf{0}} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n',\mathbf{0}} \rangle|^2}{\mathcal{E}_n(\mathbf{0}) - \mathcal{E}_{n'}(\mathbf{0})} \quad (4.8)$$

con lo cual la relación de dispersión toma la forma

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4.9)$$

que es precisamente la aproximación de masa efectiva para un electrón.

El estar considerando una única banda nos permite obtener la relación de dispersión simplemente aplicando teoría de perturbaciones, sin necesidad de plantear el Hamiltoniano  $k.p$  de este sistema. Sin embargo, las suposiciones para la validez de este caso son muchas. Además de las planteadas al inicio de esta Sección, se supone que el gap entre bandas es suficientemente grande.

Veamos qué ocurre si queremos considerar más bandas, que pueden ser degeneradas.

#### 4.1.2. Hamiltoniano de Luttinger-Kohn

El Hamiltoniano de Luttinger-Kohn es uno de los Hamiltonianos  $k.p$  mas utilizados cuando se quiere estudiar la estructura de bandas de nanoestructuras compuestas por Arsenuro de Galio (GaAs). En el estudio de estructuras compuestas por este material, son de interés las bandas de valencia y conducción, para lo que hay que tener en cuenta ocho bandas: la banda de conducción (BC) y las bandas Heavy Hole (HH), Light Hole (LH) y Split Off (SO) que componen

la banda de valencia (BV). La banda Split Off aparece en estos materiales como consecuencia de la interacción Spin-Órbita. Cada una de las cuatro bandas mencionadas tiene además dos componentes de spin, con lo cual la base de funciones  $u_{n,\mathbf{k}}$  tiene en este caso dimensión ocho.

El diagrama de la Figura 4.1 representa la estructura de bandas del GaAs que intervienen en el modelo  $k.p$  de ocho bandas. El punto  $\Gamma$ , para  $\mathbf{k} = 0$ , es donde las bandas de valencia y conducción alcanzan su valor máximo y mínimo respectivamente. El nombre de cada banda esta indicado a la izquierda de la figura, y a la derecha se muestran la energía del gap ( $E_g$ ), y la energía *split-off* ( $\Delta_0$ ).

Cada una de estas bandas es doblemente degenerada debido a la componente de spin por lo que, por ejemplo, la banda de conducción es descrita por los estados  $|BC_+\rangle$  y  $|BC_-\rangle$ , donde  $\pm$  indica spin  $\pm 1/2$ . Las funciones que representan a estas bandas de energía, en la base de momento angular  $|J, m_z\rangle$ , son:

$$\begin{aligned}
 |BC_+\rangle &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = |s; \uparrow\rangle \\
 |BC_-\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -|s; \downarrow\rangle \\
 |HH_+\rangle &= \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|x; \uparrow\rangle + i|y; \uparrow\rangle) \\
 |LH_+\rangle &= \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}(|x; \downarrow\rangle + i|y; \downarrow\rangle - 2|z; \uparrow\rangle) \\
 |LH_-\rangle &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}(|x; \uparrow\rangle - i|y; \uparrow\rangle + 2|z; \downarrow\rangle) \\
 |HH_-\rangle &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}(|x; \downarrow\rangle - i|y; \downarrow\rangle) \\
 |SO_+\rangle &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}(|x; \downarrow\rangle + i|y; \downarrow\rangle + |z; \uparrow\rangle) \\
 |SO_-\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}(|x; \uparrow\rangle - i|y; \uparrow\rangle - |z; \downarrow\rangle)
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

En esta base, ordenada de esta forma, el Hamiltoniano de Luttinger-Kohn esta dado por

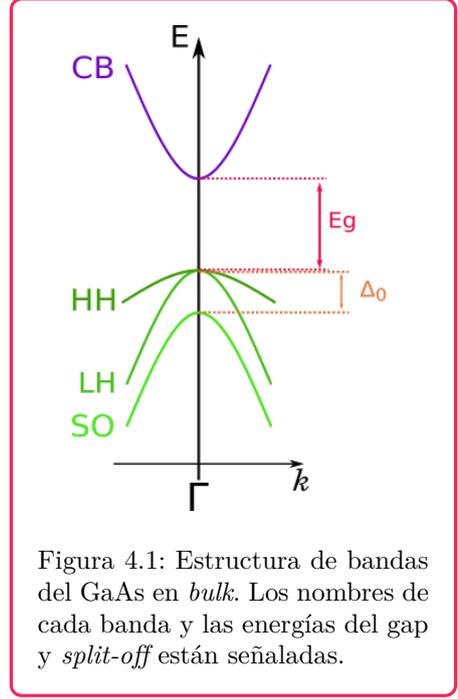


Figura 4.1: Estructura de bandas del GaAs en *bulk*. Los nombres de cada banda y las energías del gap y *split-off* están señaladas.

$$H_{KL} = \begin{pmatrix} E_{7-} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}}P^+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P^z & \sqrt{\frac{1}{6}}P^- & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}P^z & \sqrt{\frac{1}{3}}P^- \\ 0 & E_{7-} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{6}}P^+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P^z & \sqrt{\frac{1}{2}}P^- & \sqrt{\frac{1}{3}}P^+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}P^z \\ -\sqrt{\frac{1}{2}}P^- & 0 & E_{8+}^H & B & C & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}B & \sqrt{2}C \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P^z & -\sqrt{\frac{1}{6}}P^- & B^\dagger & E_{8+}^L & 0 & C & -\sqrt{2}A & -\sqrt{\frac{3}{2}}B \\ \sqrt{\frac{1}{6}}P^+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P^z & C^\dagger & 0 & E_{8+}^L & -B & -\sqrt{\frac{3}{2}}B^\dagger & \sqrt{2}A \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}P^+ & 0 & C^\dagger & -B^\dagger & E_{8+}^H & -\sqrt{2}C^\dagger & \sqrt{\frac{1}{2}}B^\dagger \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P^z & \sqrt{\frac{1}{3}}P^- & \sqrt{\frac{1}{2}}B^\dagger & -\sqrt{2}A^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}B & -\sqrt{2}C & E_{7+} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P^+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}P^z & \sqrt{2}C^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}B^\dagger & \sqrt{2}A^\dagger & \sqrt{\frac{1}{2}}B & 0 & E_{7+} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Los elementos de matriz de este Hamiltoniano son operadores que dependen de  $\mathbf{k}$ , y estan dados por

$$\begin{aligned} E_{7-} &= E_1 + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{2} \left( k_+ \frac{1}{m_0} k_- + k_- \frac{1}{m_0} k_+ \right) + k_z \frac{1}{m_0} k_z \right] \\ E_{8+}^H &= E_2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{1}{2} \left( k_+ (\tilde{\gamma}_1 + \tilde{\gamma}_2) k_- + k_- (\tilde{\gamma}_1 + \tilde{\gamma}_2) k_+ \right) + k_z (\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2) k_z \right] \\ E_{8+}^L &= E_2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{1}{2} \left( k_+ (\tilde{\gamma}_1 - \tilde{\gamma}_2) k_- + k_- (\tilde{\gamma}_1 - \tilde{\gamma}_2) k_+ \right) + k_z (\tilde{\gamma}_1 + 2\tilde{\gamma}_2) k_z \right] \\ C &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} (k_- \tilde{\gamma} k_- + k_+ \mu k_+) \\ B &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} (k_- \tilde{\gamma}_3 k_z + k_z \tilde{\gamma}_3 k_-) \\ E_{7+} &= E_2 - \Delta_{SO} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{1}{2} \left( k_+ \tilde{\gamma}_1 k_- + k_- \tilde{\gamma}_1 k_+ \right) + k_z \tilde{\gamma}_1 k_z \right] \\ A &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ 2k_z \tilde{\gamma}_2 k_z - \frac{1}{2} \left( k_+ \tilde{\gamma}_2 k_- + k_- \tilde{\gamma}_2 k_+ \right) \right] \\ P^\pm &= P k_\pm \\ P^z &= P k_z \\ P &= \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_x | iX \rangle \\ E_P &= \left( \frac{2m_0}{\hbar^2} \right) P^2. \end{aligned} \quad (4.12)$$

donde, en coordenadas cilíndricas,  $k_\pm = e^{\pm i\varphi} (-i(\partial_\rho \pm \frac{i}{\rho} \partial_\varphi) \pm i \frac{\rho}{2l_B^2})$  y  $k_z = -i\partial_z$ . Los parámetros involucrados en este Hamiltoniano son los parámetros de Luttinger modificados,  $\tilde{\gamma}_i$ , la energía de Kane,  $E_P$  y el parámetro de Kane,  $P$ . Las energías  $E_1$  y  $E_2$  son las energías del fondo de la banda de conducción, y del tope de la banda de valencia, respectivamente, ( $E_g = E_1 - E_2$ ) y  $\Delta_{SO}$  es la energía de *split-off*. Los parámetros  $\tilde{\gamma}$  y  $\mu$  están dados por  $\tilde{\gamma} = (\tilde{\gamma}_2 + \tilde{\gamma}_3)/2$  y  $\mu = (\tilde{\gamma}_2 - \tilde{\gamma}_3)/2$ .

## INCORPORACIÓN DE UN CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

Para aplicar un campo magnético al sistema, es necesario modificar el Hamiltoniano en la Ecuación 4.11 [75]. Por un lado, se debe agregar un término Zeeman

$$H_z = \mathbf{I}_{8 \times 8} g \mu_B \kappa B, \quad (4.13)$$

donde  $\mathbf{I}_{8 \times 8}$  es la matriz identidad  $8 \times 8$ ,  $\mu_B$  es el magnetón de Borh, y  $g$  son los factores Landé dados por

$$g_{BC} = 2 - \frac{2E_g \Delta_{SO}}{3E_g(E_g + \Delta_{SO})} \quad (4.14)$$

para la banda de conducción, y

$$g_{BV} = \gamma_3 + \frac{2}{3}\gamma_2 - \frac{1}{3}\gamma_1 - \frac{2}{3} \quad (4.15)$$

para la banda de valencia. Los parámetros  $\gamma_i$  son los parámetros de Lüttinger y el parámetro  $\kappa$  es  $\pm 1$  para electrones,  $\pm 3$  para heavy holes,  $\pm 1$  para light holes y  $\pm 2$  para las bandas split-off. El signo de  $\kappa$  se corresponde con la orientación de spin de cada banda (ver Ecuación 4.10).

Además, el vector de onda debe ser modificado mediante la substitución de Peierls

$$\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}, \quad (4.16)$$

donde  $\mathbf{A}$  es el potencial vector del campo magnético  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ .

## INCORPORACIÓN DE UN POTENCIAL EXTERNO

Si se quiere agregar un potencial externo  $\tilde{V}$  al sistema, distinto al potencial de la red  $V$  en la Ecuación 4.4, entonces una nueva modificacion sobre el Hamiltoniano es necesaria.

En el caso de un potencial electrostático, que es el caso que estudiaremos en la Sección 5, el efecto del mismo sobre la estructura de bandas modifica la energía las bandas de valencia y conducción. Por lo tanto, el Hamiltoniano LK se ve afectado por el cambio

$$E_i \rightarrow E_i + \tilde{V}, \quad (4.17)$$

donde  $i = 1, 2$  indica las energías correspondientes a los bordes de la banda de conducción y valencia, como definimos anteriormente. Sin embargo, las energías  $E_g$  y  $\Delta_{SO}$  permanecen constantes. Esto significa que un potencial espacialmente constante no afecta a la estructura de bandas del sistema, sino a la energía de cada banda. Lo interesante de aplicar un potencial externo es que éste dependa de alguna -o varias- direcciones espaciales.

### 4.1.3. Hamiltoniano de Kane

Como definimos anteriormente, existe una gran variedad de Hamiltonianos  $k.p$ , que se diferencian unos de otros en la cantidad de bandas consideradas, el orden de la perturbación, e incluso el método empleado para realizar perturbación. Otro factor en la variabilidad de los Hamiltonianos  $k.p$  son las propiedades particulares que tienen los distintos materiales, debido a las distintas estructuras cristalinas que pueden presentar.

En este sentido, presentamos otro Hamiltoniano de ocho bandas muy utilizado en la descripción de sistemas semiconductores: el Hamiltoniano de Kane.

Este Hamiltoniano, escrito también en la base de la Ecuación 4.10, está dado por

$$H = \begin{pmatrix} T & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & T & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}k_-P & 0 & U+V & -\bar{S}_- & R & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}\bar{S}_- & -\sqrt{2}R \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & -\frac{1}{\sqrt{6}}k_-P & -\bar{S}_-^\dagger & U-V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_- \\ \frac{1}{\sqrt{6}}k_+P & \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & R^\dagger & C^\dagger & U-V & \bar{S}_+^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+ & -\sqrt{2}V \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_+P & 0 & R^\dagger & \bar{S}_+ & U+V & \sqrt{2}R^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_+ \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}k_zP & -\frac{1}{\sqrt{3}}k_-P & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_-^\dagger & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+^\dagger & \sqrt{2}R & U-\Delta_{SO} & C \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}k_+P & \frac{1}{\sqrt{3}}k_zP & -\sqrt{2}R^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_-^\dagger & -\sqrt{2}V & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_+^\dagger & C^\dagger & U-\Delta \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Los elementos de matriz están dados por los operadores

$$T = E_1(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(2F+1)(k_x^2 + k_y^2) + k_z(2F+1)k_z], \quad (4.19)$$

$$U = E_2(z) - \frac{\hbar^2}{2m_0} [\gamma_1(k_x^2 + k_y^2) + k_z\gamma_1k_z], \quad (4.20)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) - 2k_z\gamma_2k_z], \quad (4.21)$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\sqrt{3}}{2} [(\gamma_3 - \gamma_2)k_+^2 - (\gamma_3 + \gamma_2)k_-^2], \quad (4.22)$$

$$\bar{S}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3}k_\pm [\{\gamma_3, k_z\} + \{\kappa, k_z\}], \quad (4.23)$$

$$\tilde{S}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3}k_\pm \left[ \{\gamma_3, k_z\} - \frac{1}{3}\{\kappa, k_z\} \right], \quad (4.24)$$

$$C = \frac{\hbar^2}{m_0} k_- [\kappa, k_z]. \quad (4.25)$$

con

$$k_\pm = k_x \pm ik_y, \quad (4.26)$$

$$k_z = -i\partial_z. \quad (4.27)$$

En la Ecuación 4.26,  $k_x$  y  $k_y$  pueden ser operadores diferenciales, o vectores en la primera zona de Brillouin, dependiendo de si el sistema tiene condiciones de contorno en las coordenadas correspondientes o no, respectivamente. Los parámetros presentes en el Hamiltoniano son característicos del material bajo estudio.  $E_1(z)$  y  $E_2(z)$  son las energías del borde de las bandas de conducción y valencia,  $\gamma_1, \gamma_2$  y  $\gamma_3$  son los parámetros de Luttinger,  $\Delta_{SO}$  es la energía de split-off,  $\kappa$  y  $F$  tienen información de la interacción con bandas energéticas lejanas y  $P$  es el parámetro de Kane. Como es usual,  $[A, B]$  y  $\{A, B\}$  son el conmutador y anticonmutador entre  $A$  y  $B$  respectivamente.

#### 4.1.4. Hamiltonianos Efectivos

Los Hamiltonianos presentados en las Secciones anteriores permiten obtener la estructura de bandas de diferentes nanoestructuras semiconductoras, pero tienen también sus limitaciones.

En particular, el Hamiltoniano de Kane permite obtener, de manera relativamente sencilla, la estructura de bandas de *bulk* de un sistema virtualmente infinito en un plano, digamos el plano  $(x, y)$ . Si a este sistema se le agregan condiciones de contorno en una coordenada, digamos en la dirección  $y$ , el vector de onda pasa a ser  $\mathbf{k} = (k_x, -i\partial_y, -i\partial_z)$ , lo cual implica que para resolver la ecuación  $k.p$  se deben considerar dos conjuntos de funciones base, una en cada dirección, para resolver el Hamiltoniano utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz (ver Apéndice A). Esto implica que el tamaño de la matriz a diagonalizar pasa de ser  $8 \times M$  cuando tenemos una sola dimensión relevante con una base de tamaño  $M$  a  $8 \times M \times N$ , donde  $N$  es el tamaño de la base en la nueva dirección. El valor necesario de elementos de esta nueva base dependerá de la base elegida y de las dimensiones del sistema, pero es de esperar un valor  $N > 100$ . Este aumento en la dimensión de la matriz aumenta el tiempo de cálculo necesario para resolver el problema.

Sumando a esto, el tratamiento de sistemas bidimensionales con Hamiltonianos tipo Kane presenta otro problema. En determinados sistemas bidimensionales, como ser un nanohilo de sección rectangular, los estados de interés se encuentran en la superficie de la estructura. Cuando esto ocurre, es posible que las dimensiones de interés sean significativamente menores a las dimensiones de la estructura total. El tamaño de la base necesaria para poder obtener con precisión estos estados crece considerablemente, haciendo que este problema sea computacionalmente muy costoso.

Cabe aclarar en este punto que estos problemas no están presentes en todos los sistemas, o para todos los Hamiltonianos. El caso del Hamiltoniano de Luttinger-Kohn plantea un escenario distinto: este Hamiltoniano permite obtener estados localizados en un nanohilo cilíndrico con gran precisión. La diferencia aquí es que las dimensiones de localización y las dimensiones del sistema son del mismo orden, y que estos problemas tienen -en general- invariancia en el ángulo  $\phi$ , con lo cual el tamaño de la base se mantiene acotado.

Teniendo en cuenta las consideraciones mencionadas, una alternativa a resolver Hamiltonianos de ocho bandas en sistemas 2D de dimensiones *grandes* es necesaria para estudiar estos sistemas.

## HAMILTONIANO BHZ

En el estudio de pozos cuánticos compuestos por Teluro de Mercurio (HgTe) y Teluro de Cadmio (CdTe), que estudiaremos en la Sección 6, las predicciones teóricas en la transición de fase que presenta este sistema se basan en el modelo 2D propuesto por Bernevig-Hughes-Zhang: el Hamiltoniano BHZ [34]. La idea detrás de la obtención de este Hamiltoniano efectivo es la siguiente:

- Se resuelve el Hamiltoniano de Kane en una dimensión,  $H_0(0, 0, k_z)$ , que da como resultado los autoestados del sistema en función de la coordenada relevante -en este caso, la coordenada  $z$ -.
- Se seleccionan, de estos estados, los correspondientes a las sub-bandas de interés para formar una base.
- A partir de la base seleccionada, se procede a aplicar el método perturbativo para considerar a la nueva dimensión -digamos  $y$ -. Es decir, se toma al Hamiltoniano de Kane,  $H_1(0, k_y, k_z)$ , como una perturbación y se obtiene como solución estados que ahora dependen de las coordenadas  $y, z$ .

De este proceso, cuya descripción puede encontrarse en gran detalle en la Referencia [76] y el material suplementario de la misma, deriva en un Hamiltoniano efectivo cuya dimensión es la de la base seleccionada para aplicar teoría de perturbaciones. El caso BHZ, primer Hamiltoniano

así obtenido y crucial para el entendimiento del Efecto Hall Cuántico de Spin, resulta en un Hamiltoniano de dos dimensiones, lo cual significa una disminución significativa en la dimensión a la hora de obtener estados bidimensionales.

### HAMILTONIANO EFECTIVO $4 \times 4$

Las diferencias entre los Hamiltonianos obtenidos a partir del proceso descrito anteriormente surgen de la elección de funciones que se seleccionen para aplicar el método perturbativo. Resolver al Hamiltoniano de Kane en dos dimensiones brindará siempre la solución que mejor aproxima al espectro y los estados de determinados sistemas, pero el Hamiltoniano BHZ es una muy buena aproximación a las mismas para valores chicos de  $\mathbf{k}$  [77]. Para lograr una aproximación válida para un rango mayor de valores del vector de onda, Krishtopenko y colaboradores [77] obtuvieron un Hamiltoniano efectivo en la base

$$|E1, +\rangle |H1, +\rangle |H2, -\rangle |E2, -\rangle |E1, -\rangle |H1, -\rangle |H2, +\rangle |E2, -\rangle, \quad (4.28)$$

dado por

$$\mathbf{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}(+k) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}^*(-k) \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

donde

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} + d_3(\mathbf{k}) & -Ak_+ & R_1k_-^2 & S_0k_- \\ -Ak_- & \epsilon_{\mathbf{k}} - d_3(\mathbf{k}) & 0 & R_2k_-^2 \\ R_1k_+^2 & 0 & \epsilon_{H2}(\mathbf{k}) & A_2k_+ \\ S_0k_+ & R_2k_+^2 & A_2k_- & \epsilon_{E2}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

y

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y), \quad (4.31)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = C - D(k_x^2 + k_y^2), \quad (4.32)$$

$$\epsilon_{H2} = C - M - \Delta_{H1H2} + B_{H2}(k_x^2 + k_y^2), \quad (4.33)$$

$$\epsilon_{E2}(\mathbf{k}) = C + M + \Delta_{E1E2} + B_{E2}(k_x^2 + k_y^2). \quad (4.34)$$

El parámetro  $\Delta_{H1H2}$  ( $\Delta_{E1E2}$ ) es el gap de energía entre las sub-bandas  $H1$  y  $H2$  ( $E1$  y  $E2$ ) para  $\mathbf{k} = 0$ . El resto de los parámetros se derivan del método de obtención del Hamiltoniano efectivo, y deben ser calculados para cada material, y cada geometría del sistema.

### INCORPORACIÓN DE UN CAMPO MAGNÉTICO AL HAMILTONIANO EFECTIVO

Para estudiar los estados del sistema cuando se le aplica un campo magnético, se debe agregar esta información en el Hamiltoniano. Además de aplicar la substitución de Peierls, (Ecuación 4.16), el término Zeeman que debe agregarse a este Hamiltoniano efectivo esta dado por

$$\mathcal{H}_Z = \frac{\mu_B}{2} \begin{pmatrix} g_e^\perp B_z & 0 & g_e^\parallel B_- & 0 \\ 0 & g_h^\perp B_z & 0 & g_h^\parallel B_+ \\ g_e^\parallel B_+ & 0 & -g_e^\perp B_z & 0 \\ 0 & g_h^\parallel B_- & 0 & -g_h^\perp B_z \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

donde  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr,  $g_{e,h}^{\parallel,\perp}$  son las contribuciones de las bandas incluidas en el Hamiltoniano (Ecuación 4.28) al factor de Landé,  $B = (B_x, B_y, B_z)$  es el campo magnético y  $B_\pm = B_x \pm iB_y$ . Para los sistemas que estudiaremos, con  $B = (0, 0, B_z)$ , los parámetros necesarios son  $g_e^\perp = 22$  y  $g_h^\perp = -1$  [78].

## 4.2. Autoestados del Hamiltoniano $k.p$

En el Apéndice A se detalla el método variacional de Rayleigh–Ritz, utilizado en varias etapas de los trabajos aquí presentados. Este método se utiliza para resolver el problema de autovalores

$$\mathcal{O}\psi = \epsilon\psi \quad (4.36)$$

para el operador  $\mathcal{O}$ , y se basa en escribir la expresión matricial del mismo en alguna base de funciones adecuada según las características del operador (ver Apéndice A para los detalles).

Para resumir, dada una base  $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ , se obtiene la matriz con elementos  $\mathcal{O}_{ij} = \langle \phi_i | \mathcal{O} | \phi_j \rangle$  que al diagonalizarla da  $N$  autovalores  $\epsilon_n$ , con sus correspondientes autovectores  $c^n$  tales que las funciones construidas según

$$\psi_n = \sum_{i=1}^N c_i^n \phi_i \quad (4.37)$$

son autofunciones del operador  $\mathcal{O}$ , y  $\epsilon_n$  la energía variacional asociada.

En el caso de los Hamiltonianos  $k.p$ , que como vimos se representan como una matriz de operadores, este procedimiento debe realizarse, simultáneamente, para cada uno de estos operadores. El problema a resolver es ahora

$$\mathcal{H}_{d \times d} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_d \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_d \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

donde  $d$  es la dimensión del Hamiltoniano  $k.p$  y  $\mathcal{E}$  la energía variacional del autoestado variacional asociado, dado por

$$\Psi = \sum_{i=1}^d f_i |i\rangle. \quad (4.39)$$

En esta última expresión, el estado  $|i\rangle$  representa la base del Hamiltoniano  $k.p$  utilizado. En el caso de los Hamiltonianos LK y Kane, esta base son las funciones de la Ecuación 4.10.

El proceso para obtener las funciones  $f_i$  es el descrito para el operador  $\mathcal{O}$ , y detallado en el Apéndice A, pero ahora la matriz a diagonalizar tiene elementos de matriz dados por

$$\mathcal{H}_{ab}^{ij} = \langle \phi_a | \mathcal{H}^{ij} | \phi_b \rangle \quad (4.40)$$

donde  $\mathcal{H}^{ij} = \langle i | \mathcal{H} | j \rangle$  es el elemento  $i, j$  del Hamiltoniano  $k.p$ . Así, se obtiene una matriz de dimensión  $d \times N$ , donde  $d$  es la dimensión del Hamiltoniano  $k.p$  y  $N$  el tamaño de la base variacional  $\{\phi_a\}$ .

al diagonalizar esta matriz, obtenemos autovectores de dimensión  $d \times N$  que podemos denotar

por

$$c = \begin{pmatrix} c_1^1 \\ c_2^1 \\ \vdots \\ c_N^1 \\ c_1^2 \\ \vdots \\ c_N^2 \\ \vdots \\ c_1^d \\ \vdots \\ c_N^d \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

donde el supraíndice numera la base del Hamiltoniano  $k.p$ ,  $|i\rangle$ , y el subíndice la base  $\phi_a$ . Con esto, las autofunciones de la Ecuación 4.39 toman la forma

$$\Psi = \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^N c_n^i \phi_n |i\rangle. \quad (4.42)$$

Estas autofunciones, que no son vectores de onda ni autofunciones sino que están dadas por *spinors*, presentan un desafío, a la vez que nuevas posibilidades, en el estudio de cantidades de información. A la hora de biparticionar un sistema, la base del Hamiltoniano  $k.p$  -que contiene información sobre el spin y ciertas simetrías de los estados- juega con rol fundamental en la posibilidad de escribir al espacio de Hilbert de los estados como un espacio producto. Un ejemplo de esto se incluye en el Apéndice E para el Hamiltoniano de Kane.

Cuando se trabaja con estos autoestados, las funciones que forman la base del Hamiltoniano  $k.p$  se tienen en cuenta únicamente por lo que aportan al mismo, es decir, se consideran las propiedades de las distintas bandas o sub-bandas para obtener los elementos de matriz del Hamiltoniano. Esto significa que al construir los estados, o para el cálculo de la matriz densidad reducida, u otras cantidades de interés, estas funciones entran únicamente a través de sus relaciones de ortogonalidad. Este detalle es de crucial importancia para un buen tratamiento de los estados del sistema.



## Capítulo 5

# Estudio de la transición entre estados ligados y resonancias en un punto cuántico

Este Capítulo está dedicado al estudio de la estructura de bandas de nanohilos semiconductores con puntos cuánticos embebidos. Consideramos puntos cuánticos de dos tipos: uno definido mediante potenciales electrostáticos, y otro generado a partir de la combinación de distintos materiales que forman el nanohilo. A partir del estudio de la estructura de bandas de estos sistemas, logramos setearlos para lograr distintos escenarios, siendo de particular interés la posibilidad de transformar estados ligados en resonancias, y viceversa, mediante un campo magnético aplicado.

### 5.1. Introducción

#### ANTECEDENTES

El estudio de la estructura de bandas de nanohilos semiconductores ha tomado una relevancia significativa en los últimos años. Una de las principales razones es que, gracias a los avances en técnicas experimentales logrados, estas estructuras se pueden fabricar de diversas maneras: cambiando y combinando distintos materiales constitutivos, cubriendo un gran rango de longitudes características en la nano escala, o recubriéndolos con otros materiales para cambiar su funcionalidad, entre otras alternativas. Cada nueva configuración, o cambio de los materiales utilizados, da lugar a diferentes propiedades de sistema, y así la estructura de bandas de estas nanoestructuras puede *seleccionarse* para satisfacer diferentes necesidades tecnológicas.

A partir del estudio de distintos materiales y sistemas, la descripción de la estructura de bandas, y la predicción teórica de la misma, se acerca cada vez más a los resultados experimentales. El estudio de las propiedades ópticas y electrónicas de nanohilos cuya estructura cristalina es de tipo *zincblende*, muestra que la energía del estado más bajo de la banda de conducción tiene una dependencia fuertemente no lineal con la intensidad de un campo magnético externo, apartándose del comportamiento simple de los niveles de Landau. En su lugar podemos ver, en algunos sistemas, oscilaciones de Aharonov-Bohm [75], [79]. Cuando se estudia la estructura de banda de estos nanohilos a campo nulo, también aparecen los llamados *camel-backs* en la estructura de banda [80]. Una estructura *camel-back* de la banda de valencia (conducción) significa que el valor

máximo (mínimo) de la energía de la banda no se encuentra en el centro de la zona de Brillouin, sino para valores no triviales del vector de onda. Estos y otros fenómenos, algunos de los cuales estudiaremos en este capítulo, se observan en nanohilos formados por materiales semiconductores de los grupos III-V [75], y dependen fuertemente del radio del nanohilo que puede ser simple (de un material) o del tipo *core-shell* (dos materiales, uno recubierto por el otro).

La posibilidad de modificar la estructura de bandas de los nanohilos mediante la introducción de puntos cuánticos o la aplicación de potenciales electrostáticos externos también ha suscitado un gran interés. Una nanoestructura de estas características puede dar lugar a estados ligados, asociados a niveles de energía dentro del gap entre las bandas de valencia y conducción, y a resonancias que no existen en el nanohilo no estructurado. Además, si se aplican campos magnéticos externos -independientes del tiempo y espacialmente constantes-, es posible transformar las resonancias en estados ligados y viceversa. Este proceso, conocido como *ligadura de resonancias*, es el descrito en la Sección 2.3, y será el objeto de estudio en este Capítulo.

Desde un punto de vista teórico, la mayoría de los estudios que demuestran la posibilidad de ligadura de resonancias en este tipo de nanoestructuras se han realizado utilizando la Aproximación de Masa Efectiva (AME), presentada en la Sección 4.1.1. En esta aproximación, la energía de los estados de la banda de conducción se comporta básicamente como los estados de Landau, es decir, su energía aumenta cuando lo hace la intensidad del campo magnético, y para campos magnéticos suficientemente fuertes el comportamiento es lineal [15].

## MOTIVACIÓN

El trabajo de la Referencia [15] aborda el estudio de la ligadura de resonancias en un punto cuántico electrostático, utilizando la AME. En este trabajo nos planteamos estudiar un sistema similar, pero utilizando el método *k.p* con un Hamiltoniano de 8 bandas.

La propuesta de trabajo tiene dos objetivos principales. En primer lugar, lograr una descripción adecuada del proceso de ligadura de resonancias, así como identificar bajo qué configuraciones se obtienen resonancias o estados ligados en nanohilos semiconductores. En segundo lugar, estamos interesados en escenarios con características físicas diferentes a las encontradas en los nanohilos cuya fenomenología se modela adecuadamente con AME. Para ello comparamos los resultados obtenidos utilizando ambos métodos en escenarios similares lo cual, de haber diferencias significativas, permitiría una descripción mas exhaustiva del fenómeno.

La sospecha sobre una diferencia entre los dos métodos se basa principalmente en que el método *k.p* diferencia de forma natural la componente de spin de los estados, de estar definida. Esto significa que a partir de este estudio se podría obtener información sobre la presencia de resonancias polarizadas. Por otro lado, puede ser interesante disponer de estados con polarización bien definida, y poder identificarlos en el sistema bajo estudio.

## PROPUESTA

En las siguientes Secciones, estudiaremos el confinamiento de un electrón en un punto cuántico generado de dos maneras: un punto cuántico definido electrostáticamente dentro del nanohilo semiconductor, y un punto cuántico generado a partir de la combinación de distintos materiales intercalados con el material del nanohilo.

En el primer modelo -Sección 5.2- estudiaremos un nanohilo de GaAs, con un potencial electrostático que se asemeje al estudiado en [15]. Trabajamos con este modelo por dos razones. En primer lugar, permite una comparación fidedigna con el modelo estudiado en [15]. En segundo lugar, las posibilidades tecnológicas para implementar un punto cuántico de dimensiones en el rango de los pocos nanómetros son mayores utilizando un potencial externo, que implementando un modelo como el propuesto a continuación.

En el segundo modelo -Sección 5.3- al nanohilo de GaAs se le intercalan segmentos compuestos por otros materiales,  $\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$  y  $(\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5})_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$ , que generan un punto cuántico debido a la diferencia de energía de la estructura de bandas de los distintos materiales. Este modelo presenta un escenario interesante desde un punto de vista tecnológico pero, si bien estructuras de este tipo se realizan a escalas nanométricas, su producción presenta aún varios desafíos experimentales. De todas formas, nos interesa estudiar este caso y compararlo con el primer modelo propuesto, para analizar el comportamiento del método  $k.p$  frente a sistemas con interfaces presentes a distancias cortas.

Para nanohilos cilíndricos de los materiales mencionados, la estructura de bandas puede obtenerse con muy buena precisión [75] utilizando el Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, descrito en la Sección 4.1.2. Los valores de los parámetros involucrados en este Hamiltoniano, para todos los materiales utilizados en este trabajo, se incluyen en el Apéndice D.

Para proceder ordenadamente, el estudio de los sistemas se llevará a cabo de la siguiente manera:

**Modelo 1** Se estudiará la estructura de banda cerca del fondo de la banda de conducción, en función de los parámetros del potencial que define el punto cuántico: la longitud y la profundidad del pozo de potencial, y la longitud y la altura de las barreras de potencial.

**Modelo 2** Aquí, los niveles de energía que definen el punto cuántico quedan fijos una vez seleccionados los materiales, por lo que los únicos parámetros que se pueden cambiar son las longitudes y el radio característicos del sistema. Se estudiará la estructura de banda cerca del fondo de la banda de conducción en función de estos parámetros.

En ambos modelos, utilizamos los parámetros mencionados para regular el número de estados en el gap entre las bandas de valencia y conducción, buscando escenarios con estados de resonancia bien aislados que estuvieran cerca del fondo de la banda de conducción.

Mostraremos cómo se puede detectar una resonancia utilizando la *probabilidad de localización* [15], [24], y cómo la presencia de un campo magnético afecta a los estados degenerados y a las resonancias del sistema.

## 5.2. Punto Cuántico inducido Electrostáticamente

En esta sección estudiaremos las propiedades de un punto cuántico inducido electrostáticamente en un nanohilo semiconductor de un único material.

### 5.2.1. Modelo

La nanoestructura estudiada en esta Sección es un nanohilo cilíndrico de radio  $R$  y longitud  $L$ , hecho de un solo material semiconductor: el Arsenurio de galio (GaAs).

Consideramos un sistema de coordenadas cilíndricas, donde la coordenada longitudinal,  $z$ , coincide con el eje del nanohilo, y un potencial de confinamiento dado por

$$V(\rho, z) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |z| \leq z_1 \text{ y } \rho \leq R_w \\ V_1 & \text{si } z_1 < |z| \leq z_2 \end{cases} \quad (5.1)$$

y  $V(\rho, z) = 0$  en el resto del dominio. Es decir,  $V$  consiste en un pozo de potencial cilíndrico de radio  $R_w < R$ , longitud  $2z_1$  y profundidad  $-V_0$ , y dos barreras de potencial de radio  $R$ , longitud  $z_2 - z_1$  y altura  $V_1$ , a ambos lados del pozo de potencial.

En la Figura 5.1, se puede observar el perfil de potencial en función de la coordenada longitudinal  $z$ , para a)  $\rho > R_w$  y b)  $\rho \leq R_w$ . Como se puede apreciar en la figura, el potencial define un punto cuántico en el interior del nanohilo.

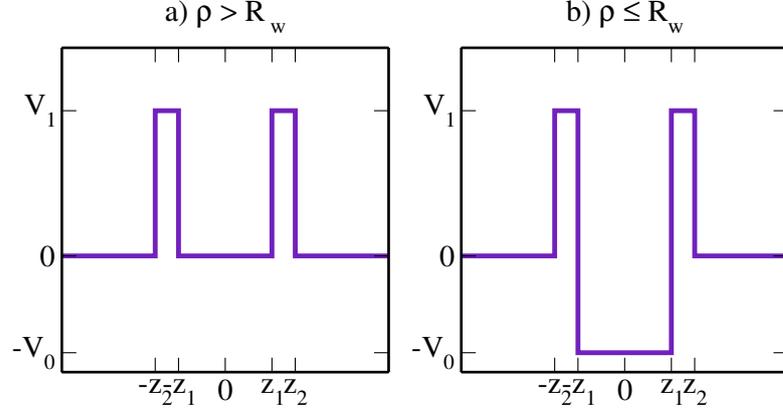


Figura 5.1: Perfil del potencial de confinamiento  $V$  en función de la coordenada  $z$ , coincidente con el eje del nanohilo, para a)  $\rho > R_w$  y b)  $\rho \leq R_w$ .

## 5.2.2. Resultados

Para estudiar el espectro del sistema buscamos autofunciones variacionales al Hamiltoniano LK, utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz descrito en el Apéndice A. Para ello, en los dos modelos considerados, utilizamos como base para escribir el Hamiltoniano a las funciones

$$\psi_{nml}(\rho, \varphi, z) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2}}{R J_{m+1}(\alpha_{ml})} J_m\left(\alpha_{ml} \frac{\rho}{R}\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(n\pi \frac{2z}{L}\right), \quad (5.2)$$

donde  $J_m$  son las funciones de Bessel de primera especie,  $\alpha_{ml}$  es el  $l$ -ésimo cero de la función  $J_m(\rho)$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M$ ,  $l = 1, 2, \dots, N_z$  y  $n = 1, 2, \dots, N$ .

Para obtener la estructura de bandas calculamos primero el espectro para  $N_z = 10$  y  $M = 4$ , basándonos en la Referencia [75], donde los autores aseguran que estos valores son suficientes para la convergencia de los niveles de energía en nanohilos con invarianza traslacional en la coordenada  $z$ . Hemos repetido los cálculos allí presentados para probar nuestros algoritmos, y observamos que los estados cercanos al fondo de la banda de conducción pueden ser obtenidos con gran precisión utilizando sólo estados de base de momento angular cero, es decir,  $M = 0$ . Como los estados que nos interesan son precisamente los cercanos al fondo de la banda de conducción, adoptamos para los cálculos posteriores  $N_z = 10$  y  $M = 0$ . Para estudiar los sistemas sin invarianza traslacional en  $z$ , hay que incluir funciones del conjunto de bases que dependen de esta coordenada: las funciones coseno incluidas en la Ecuación 5.2. Calculando el espectro de los sistemas en función del tamaño de esta base,  $N$ , encontramos que para  $N \geq 80$  el cambio en los niveles de energía al aumentar  $N$  es menor que  $10^{-5}$ , con lo cual utilizamos una base de  $N = 80$  elementos.

### ESPECTRO EN FUNCIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL SISTEMA PARA $B = 0$

En esta Sección nos centraremos en el espectro aproximado que se obtiene resolviendo la ecuación  $k.p$ . En particular, buscamos valores de la profundidad del pozo de potencial ( $V_0$ ) y

de la altura de las barreras ( $V_1$ ) que den lugar a la aparición de estados localizados por debajo de la banda de conducción, y de resonancias. Los parámetros geométricos del potencial ( $R_w$ ,  $z_1$ ,  $z_2$  y  $L$ ) se mantendrán constantes para la obtención de los resultados presentados. Al tener dos parámetros para variar, comenzamos buscando estados ligados en un pozo sin barreras ( $V_1 = 0$ ), y una vez obtenidos estos estados estudiamos su comportamiento al agregar barreras al potencial.

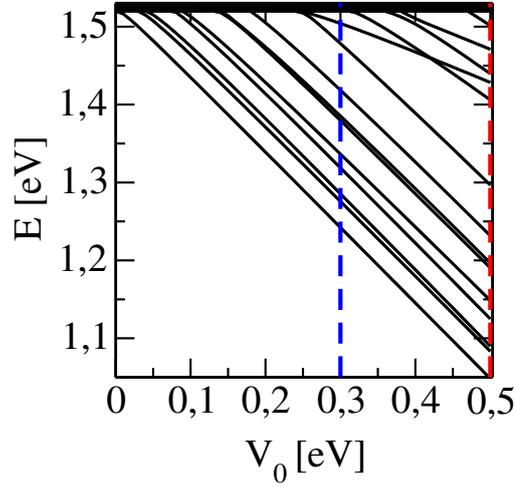


Figura 5.2: Espectro de energía en función de la profundidad del pozo,  $V_0$ , para un nanohilo de GaAs de radio  $R = 15$  nm, y parámetros del potencial dados por  $z_1 = 3,5$  nm,  $z_2 = 4,75$  nm,  $R_w = 5$  nm y  $V_1 = 0$  eV. Las líneas discontinuas verticales muestran los valores de  $V_0$  para los cuales se continuará con el estudio del sistema. la línea azul corresponde a  $V_0 = 0,3$  eV, y la roja a  $V_0 = 0,5$  eV.

La Figura 5.2 muestra el espectro del sistema, para energías cercanas al fondo de la banda de conducción,  $E \sim 1,52$  eV, como función de la profundidad del pozo de potencial. En esta instancia las barreras del potencial no han sido aplicadas. El radio del nanohilo para los resultados presentados es  $R = 15$  nm, mientras que  $R_w = 5$  nm,  $z_1 = 3,5$  nm y  $z_2 = 4,75$  nm. Las líneas verticales discontinuas marcan valores particulares de la profundidad del pozo de potencial, que se analizarán al aplicar barreras a los lados del pozo. Como puede observarse, al aumentar la profundidad del pozo de potencial aumenta la cantidad de estados ligados con energías dentro del gap. Estos estados pueden dividirse en dos grupos con pendientes marcadamente distintas en función de  $V_0$ .

La Figura 5.3 muestra el espectro como función del alto de las barreras de potencial,  $V_1$ , para  $V_0 = 0,3$  eV en el panel izquierdo (azul), y  $V_0 = 0,5$  eV en el panel derecho (rojo). Como se puede apreciar en el panel derecho, hay una serie de autovalores que pertenecen al espectro discreto cuando  $V_1 = 0$ , y que entran en la banda de conducción (BC) para algún valor de  $V_1$ . Estos autovalores son de especial interés, ya que dan origen a resonancias una vez que entran en la BC, por lo que la vecindad de estos valores particulares de  $V_0$  y  $V_1$  es un lugar apropiado para estudiar la ligadura de resonancias cuando se aplica un campo magnético externo. Uno de estos puntos de interés se encuentra para  $V_0 = 0,5$  eV y  $V_1 = 0,36$  eV, y se estudiará en la siguiente Sección.

Es interesante observar que los autovalores dentro del gap de energías varían casi linealmente en función de  $V_1$ , pero se pueden identificar grupos con pendientes significativamente distintas. Esto se debe a las diferentes simetrías de los estados correspondientes, lo que hace que algunos de ellos sean más susceptibles al cambio en la altura de la barrera de potencial que los otros.

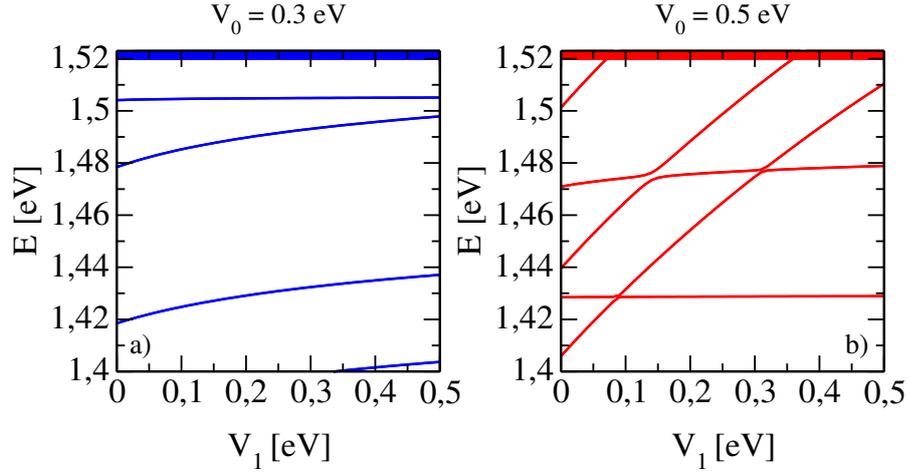


Figura 5.3: Espectro de energías en función del alto de las barreras,  $V_1$ , para un nanohilo de GaAs de radio  $R = 15$  nm, y parámetros del potencial dados por  $z_1 = 3,5$  nm,  $z_2 = 4,75$  nm,  $R_w = 5$  nm y  $V_1 = 0$  eV. El panel izquierdo, en azul, corresponde a un potencial con  $V_0 = 0,3$  eV, mientras que en el derecho, en rojo,  $V_0 = 0,5$  eV.

Como muestran nuestros resultados, el número de estados localizados puede controlarse fácilmente eligiendo valores adecuados para  $V_0$  y  $V_1$ . Se podría argumentar, sin embargo, que la proximidad entre los autovalores que se encuentran por debajo del fondo de la banda de conducción (FBC) y su, relativamente, gran número, podría oscurecer el análisis de los fenómenos físicos resultantes. Afortunadamente, el número de autovalores discretos por debajo de la BC puede reducirse aún más eligiendo radios más pequeños para el pozo, manteniendo los valores de  $V_0$  y  $V_1$  en el mismo rango que los utilizados para obtener los datos en las Figuras 5.2 y 5.3.

### LIGADURA DE RESONANCIAS APLICANDO UN CAMPO MAGNÉTICO

Como vimos en la Sección 2.3, existen varios métodos que permiten identificar resonancias, como la rotación compleja, los potenciales absorbentes complejos y la densidad de estados. Sin embargo no existen, que sepamos, implementaciones de estos métodos a sistemas cuya descripción se basa en el método  $k.p$ , tarea no trivial debido a las características de las autofunciones que brinda este método (ver Sección 4.2). Por este motivo, para detectar la presencia de resonancias utilizaremos la probabilidad de localización, descrita en la Sección 2.3.

Definimos a la probabilidad de localización,  $P_w$ , según

$$P_w(\psi^v) = \int_w |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}, \quad (5.3)$$

donde  $|\psi(\mathbf{x})|^2$  es el módulo cuadrado del espinor de ocho componentes, que es solución a la ecuación  $k.p$ , y  $w$  representa el dominio espacial del punto cuántico.

Anteriormente vimos que, para  $V_0 = 0,5$  eV, un estado en el gap entra en la banda de conducción para  $V_1 \sim 0,36$  eV. Esto sugiere que para valores ligeramente mayores de  $V_1$  debe haber una resonancia que se encuentre muy cerca del fondo de la banda de conducción. La figura 5.4 (a) muestra el comportamiento del espectro variacional cerca del fondo de la banda de conducción en función de la intensidad de campo  $B$ , para  $V_0 = 0,5$  eV y  $V_1 = 0,36250$  eV. Se puede observar, en primer lugar, que los autovalores son doblemente degenerados para  $B = 0$ , y

esta degeneración se rompe cuando se aplica el campo magnético. De cada uno de los autovalores doblemente degenerados en  $B = 0$  surgen dos curvas, una creciente y otra decreciente como funciones de la intensidad de campo, según su componente de spin.

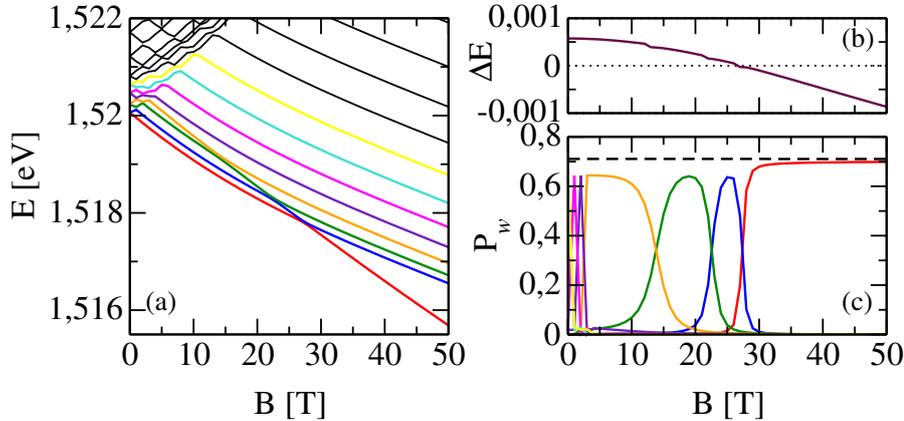


Figura 5.4: (a) Espectro de energía en función del campo magnético aplicado,  $B$ , para un nanohilo de GaAs de radio  $R = 15$  nm un potencial con parámetros  $z_1 = 3,5$  nm,  $z_2 = 4,75$  nm,  $R_w = 5$  nm,  $V_0 = 0,5$  eV y  $V_1 = 0,3625$  eV. (b) Diferencia de energía,  $\Delta E$ , entre el estado de mayor localización cercano al FBC y es estado del FBC, en función de  $B$ . (c) Probabilidad de localización en función de  $B$  para los estados en el panel (a). Los colores utilizados en ambos paneles representan a los mismos estados. La línea discontinua negra es la probabilidad de localización del estado ligado de mayor energía dentro del gap.

El espectro del sistema en función del campo, panel (a) de esta Figura, presenta además un grupo de curvas *paralelas*, que corresponden a energías decrecientes, que no presentan cruces evitados entre sí. Por otro lado, para energías mayores y campos chicos, cerca del eje vertical, se observan curvas con numerosos cruces evitados, que se producen entre los autovalores crecientes y decrecientes. Además de estos dos comportamientos, se puede ver una curva decreciente, prácticamente recta, que muestra un comportamiento diferente a las demás: esta curva se corresponde al estado de resonancia que se convierte en un estado ligado para  $B \sim 25$  T. Para campos chicos esta curva es difícil de distinguir a simple vista, pero a medida que el campo aumenta puede observarse en el tramo amarillo-verde-azul-rojo. Este cambio de color del estado obedece al método variacional, que acomoda las energías en orden creciente para cada valor de  $B$ .

En el panel (c) de la Figura 5.4 se presenta la probabilidad de localización definida en la Ecuación 5.3. Para poder analizar esta información, hay que tener en cuenta que las dimensiones del sistema fueron definidas para que la longitud total del nanohilo satisfaga  $L \gg z_1, z_2$ , con lo cual un estado extendido tendrá una probabilidad de localización en el pozo dada por  $P_w^{ext} \sim 0$ . Aclarado esto, vemos que los únicos estados con probabilidad de localización *no nula*, son los estados que forman parte de la línea recta que representa a la resonancia para  $B < 25$  T, y a un estado ligado para  $B < 25$  T. La línea de segmentos negra indica la probabilidad de localización del estado con mayor energía dentro del gap.

De los resultados obtenidos con el método *k.p.*, se puede concluir que  $P_w$  actúa de forma muy similar a un parámetro de orden: es capaz de detectar cuando aparece un estado localizado por debajo del fondo del continuo de energías, señalando así la ligadura de una resonancia cuando se aplica un campo magnético creciente a un sistema con un estado de resonancia. Sin embargo, desde el punto de vista de la probabilidad de localización, no hay diferencia entre un estado

de resonancia y un estado ligado aislado. La diferencia entre estos estados viene dada por la existencia, o no, de un estado extendido por debajo del mismo. El panel (b) de la Figura 5.4 muestra la diferencia de energía entre el estado cercano al fondo de la banda de conducción (FBC) que posee una alta probabilidad de localización,  $E_{APL}$ , y el estado extendido de menor energía,  $E_{FBC}$ . Esta diferencia de energía,  $\Delta E$ , puede definirse como

$$\Delta E = E_{APL}(B) - E_{FBC}(B) = \begin{cases} E_{res}(B) - E_{FBC}(B), & \text{si el estado localizado esta en la banda} \\ E_{loc}(B) - E_{FBC}(B), & \text{si el estado localizado esta en el gap} \end{cases} \quad (5.4)$$

Si bien el sistema presenta otros estados ligados en el gap, la diferencia de energía con respecto al fondo de la banda de conducción son mayores de  $0,01\text{eV} \gg \Delta E$ , *i.e.*, cuando la resonancia se convierte en estado ligado este está bien aislado de otros estados ligados dentro del gap. Además, está bien aislado de otras resonancias que pueden estar presentes en el sistema cuando se produce la transición. La transición de la resonancia ( $\Delta E > 0$ ) al estado ligado ( $\Delta E < 0$ ) se puede apreciar claramente en la Figura 5.4 (b).

Los resultados presentados corresponden a un potencial de confinamiento con  $R_w = 5\text{nm}$ , y  $z_1 = 3,5\text{ nm}$ , y  $z_2 = 4,75\text{ nm}$ , pero también hemos realizado cálculos para muchos otros conjuntos de estas cantidades. En particular, hemos analizado diferentes radios del pozo de potencial, como  $R_w = 7\text{nm}$  y  $R_w = 9\text{nm}$ . Para estos otros casos la ligadura de una resonancia también está presente. Los valores de los parámetros  $V_0$ ,  $V_1$ , son similares a los utilizados para el caso  $R_w = 5\text{nm}$ . Con respecto a los parámetros del nanohilo, en todos los casos tomamos  $L = 200\text{ nm}$ , para asegurarnos que el sistema se comporte como un sistema infinito en la dirección  $z$ , y variamos el radio del nanohilo para valores de  $R \in [10, 20]\text{ nm}$ .

### 5.3. Punto Cuántico definido por una Heteroestructura

Abordamos ahora el estudio del fenómeno de ligadura de resonancias para el segundo modelo propuesto: un punto cuántico generado por la combinación de distintos materiales semiconductores.

Este modelo, además de ser mas difícil de implementar experimentalmente que el modelo presentado anteriormente, implica cálculos mas complicados para la resolución del Hamiltoniano  $k.p$ . Esto se debe a la dependencia de los parámetros incluidos en el Hamiltoniano con los materiales que componen la nanoestructura. Los detalles de las consideraciones a hacer para incluir cambios de material en el modelo, y algunos cálculos necesarios, se presentan en el Apéndice D.

#### 5.3.1. Modelo

El segundo sistema consiste en un nanohilo compuesto por seis cilindros semiconductores intercalados. Los cilindros son de tres materiales diferentes, y se intercalan en una configuración que imita el perfil de potencial de la Ecuación 5.1, mediante los desplazamientos de banda entre los materiales implicados. En la Figura 5.5 se muestra una representación del sistema, donde cada color representa un material diferente. El nanohilo tiene un radio total  $R$  y longitud  $L$ , y esta compuesto por: un cilindro que llamaremos *núcleo*, representado en verde, que tiene radio  $R_c$  y longitud  $2z_1$ , dos cilindros que llamaremos *barreras*, representados en rosa, que tienen radio  $R$  y longitud  $z_2 - z_1$ , y los cilindros azules, de radio  $R$ , que completan la estructura del nanohilo. Para poder simular el potencial de la Ecuación 5.1 el nanohilo (azul) es de  $\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$ , el núcleo es de  $\text{GaAs}$  y las barreras de  $(\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5})_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$ .

La figura 5.6 muestra los perfiles de los fondos de la banda de conducción (en azul) y los topes de las bandas de valencia (en naranja) para b)  $\rho > R_c$  y c)  $\rho \leq R_c$ . Comparando los perfiles

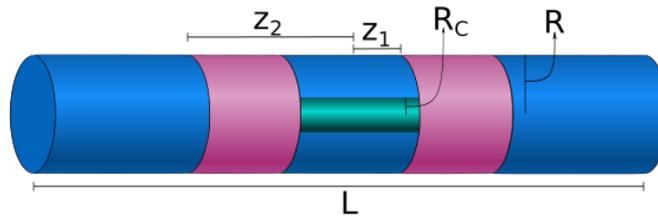


Figura 5.5: Representación del sistema estudiado. El nanohilo está representado por el cilindro azul, de radio  $R$  y largo total  $L \gg z_1, z_2$ . Intercalados en este cilindro se encuentran el cilindro núcleo, en verde, de radio  $R_c$  y largo  $2z_1$ , y los cilindros barrera, en rosa, de radio  $R$  y longitud  $z_2 - z_1$ . Cada color representa un material distinto, elegidos para definir un punto cuántico generado a partir de la diferencia de energía en las estructuras de banda entre estos materiales.

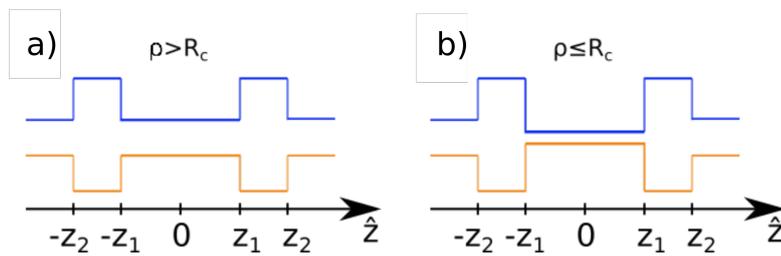


Figura 5.6: Representación de las energías del fondo de la banda de conducción (azul) y el tope de la banda de valencia (naranja) en función de la coordenada  $z$ , transversal al nanohilo, para a)  $\rho > R_c$  y b)  $\rho \leq R_c$ .

de potencial en la Figura 5.1 y los perfiles de la banda de conducción en la Figura 5.6, queda claro que un electrón en la banda de conducción experimenta un confinamiento similar en ambos sistemas.

### 5.3.2. Resultados

De manera análoga al caso de un punto cuántico definido por un potencial electrostático, estudiamos la estructura de bandas del punto cuántico definido por una combinación de diferentes materiales semiconductores (Figura 5.6). Presentamos los resultados para un nanohilo de radio total  $R = 15$  nm,  $R_c = 5$  nm y  $L = 200$  nm, pero los mismos cálculos fueron implementados para distintas combinaciones de estos valores y de  $R = 10$  nm,  $R = 15$  nm,  $R_c = 7$  nm, manteniendo siempre la misma longitud total del sistema,  $L = 200$  nm.

Como ya hemos mencionado, la diferencia entre los niveles energéticos de las bandas de los materiales utilizados define la energía del punto cuántico, y son cantidades fijas. Por lo tanto, para estudiar distintos escenarios que den lugar a estados de interés, estudiaremos el espectro del sistema en función de dos parámetros geométricos: el ancho del núcleo, a través de la cantidad  $z_1$ , y el ancho de las barreras, a través de la cantidad  $z_2$ .

La base de funciones utilizada para obtener el espectro y los estados del sistema fue presentada en la Ecuación 5.2.

### ESPECTRO EN FUNCIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL SISTEMA PARA $B = 0$

La Figura 5.7 muestra los niveles de energía cercanos al fondo de la banda de conducción en función de  $z_1$ , para un sistema sin barreras ( $z_2 = z_1$ ). La dependencia de los niveles de energía dentro del gap, al igual que en el caso del punto cuántico producido electrostáticamente, responde a dos comportamientos diferentes según las simetrías de los estados.

Para seleccionar estados de interés en este sistema es importante tener en cuenta que, para poder lograr una implementación experimental, las dimensiones de las distintas componentes del sistema deben ser lo mas grandes posibles. Sin embargo, también se quiere limitar el tamaño por dos razones: una es que se requiere de dispositivos chicos para el desarrollo de nuevas tecnologías, y otra es que si las dimensiones crecen lo suficiente, los estados ligados no estarán lo suficientemente aislados unos de otros, con lo cual su control se torna imposible.

Evaluando un compromiso entre estos requerimientos, seleccionamos para el ancho del núcleo el valor  $z_1 = 3$  nm, indicado por la línea vertical azul en la Figura 5.7, para añadir barreras al sistema.

En el panel izquierdo de la Figura 5.8 se muestra el espectro del sistema en función de  $z_2$ , para  $z_1 = 3$  nm. El panel derecho de esta figura es un zoom de la zona contenida en el recuadro fucsia del panel de la izquierda, y muestra cómo el estado localizado de mayor energía entra en la banda de conducción para  $z_2 \sim 3,47$  nm. Cuando este estado ingresa al continuo de energía, se producen una serie de cruces evitados que evidencian la presencia de una resonancia para  $z_2 \gtrsim 3,48$  nm. En particular, estudiaremos qué pasa con este estado para  $z_2 = 3,5$  nm, valor señalado por la línea punteada azul, cuando aplicamos un campo magnético al sistema.

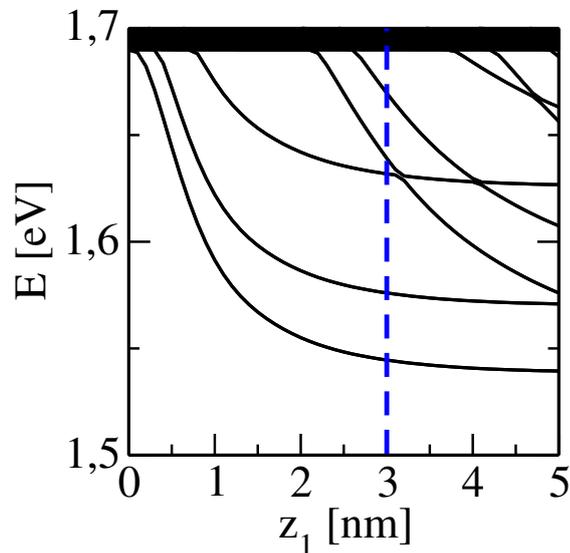


Figura 5.7: Espectro de energías en función del ancho del núcleo,  $z_1$ , para un nanohilo de  $\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$  de radio  $R = 15$  nm, y un núcleo de GaAs de radio  $R_c = 5$  nm. El sistema no presenta barreras. La línea discontinua azul indica el valor  $z_1 = 3$  nm, seleccionado para seguir con el estudio del sistema.

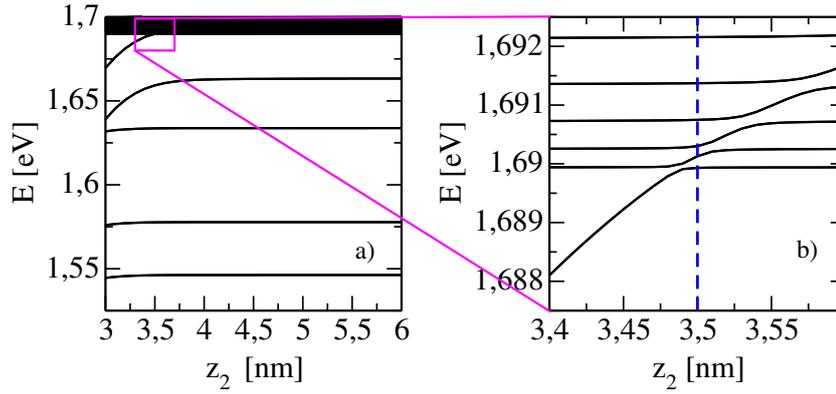


Figura 5.8: a) Espectro de energía en función de  $z_2$ , para un nanohilo de  $\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$  de radio  $R = 15$  nm, un núcleo de GaAs de  $R_c = 5$  nm y ancho  $z_1 = 3$  nm, y barreras de  $(\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5})_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$ . b) Zoom del panel a) cerca de la zona de ionización. La línea discontinua azul indica el valor  $z_2 = 3,5$  nm, seleccionado para seguir estudiando el sistema.

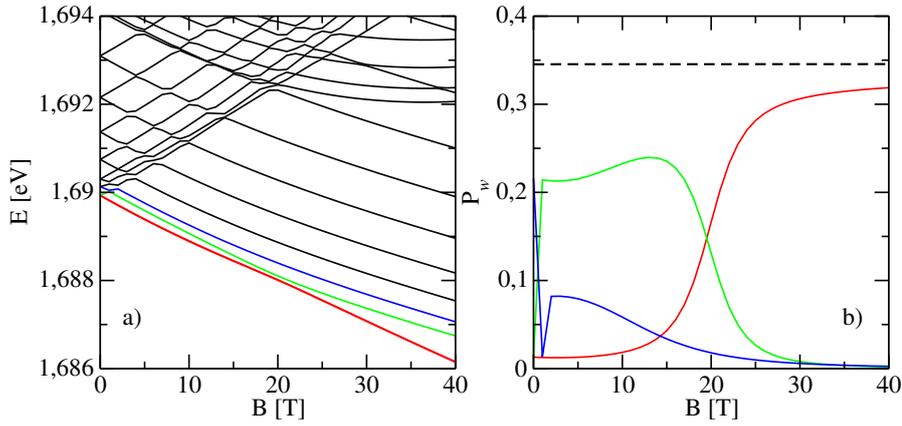


Figura 5.9: a) Espectro de energía en función de la intensidad del campo magnético,  $B$ , para un nanohilo de  $\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$  de radio  $R = 15$  nm. El núcleo de GaAs es de radio  $R_c = 5$  nm y las barreras son de  $(\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5})_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$ . Los anchos respectivos están dados por  $z_1 = 3$  nm y  $z_2 = 3,5$  nm. b) Probabilidad de localización en función de  $B$  para los estados incluidos en el panel a). Los colores utilizados corresponden a los mismos estados en ambos paneles. La línea discontinua negra en el panel b) es la probabilidad de localización en el núcleo del estado ligado con mayor energía. Para  $B = 0$  la energía de este estado es  $E \sim 1,66$  eV.

## LIGADURA DE RESONANCIAS APLICANDO UN CAMPO MAGNÉTICO

Consideremos ahora el efecto de aplicar un campo magnético externo para el sistema con  $z_1 = 3$  nm y  $z_2 = 3,5$  nm. La Figura 5.9 muestra que el comportamiento de los autovalores es cualitativamente igual al descrito con respecto a la Figura 5.4 para el punto cuántico electrostático. En el panel de la izquierda, que presenta el espectro en función del campo magnético, se observa un estado que depende casi linealmente de la intensidad de campo, cuya energía decrece cruzando a los estados de menor energía. Este estado es una resonancia, que sale de la banda de

conducción, transformándose en un estado ligado, para  $B \sim 20$  T. El panel derecho muestra la probabilidad de localización de este estado en función de  $B$ , cantidad definida en la Ecuación 5.3, donde ahora  $w$  es la región del núcleo del sistema. Como se puede observar, la probabilidad de localización del estado de interés aumenta con la intensidad de campo, y es menor a la del estado de mayor energía dentro del gap, representada por una línea negra discontinua.

## 5.4. Resumen y Conclusiones

En este trabajo, estudiamos el espectro de energías para dos nanoestructuras semiconductoras, una de ellas una heteroestructura, y la otra compuesta por un único material pero afectada por un potencial electrostático. Estas características inducen puntos cuánticos en las estructuras, donde se localizan estados ligados y resonancias. El objetivo del trabajo era el de poder caracterizar sistemas con resonancias en su espectro, y estudiar el fenómeno de ligadura de resonancias mediante un campo magnético externo. Más allá de la posibilidad de implementación de los sistemas propuestos, que modelamos de la manera mas realista posible de acuerdo a las capacidades experimentales actuales, el método  $k.p$  -utilizado para obtener los resultados presentados- muestra que este efecto está presente en los sistemas considerados.

Como primer conclusión, podemos destacar que nuestros resultados muestran que la ligadura de resonancias puede implementarse de forma efectiva en nanoestructuras semiconductoras embebidas en nanohilos en los dos casos considerados, y para distintos parámetros de cada sistema. El efecto parece similar al encontrado utilizando la AME en [15], al menos para los materiales que hemos considerado en este trabajo. Sin embargo, la inclusión del spin añade escenarios novedosos en los que algunas resonancias hacen la transición a estados ligados, o viceversa, dependiendo de la orientación del mismo.

De nuestros resultados se desprende que, si para  $B = 0$  un estado ligado degenerado se encuentra lo suficientemente cerca del fondo de la banda de conducción, entonces para  $B \neq 0$  el estado cuya energía crece con la intensidad del campo ingresará a la banda de conducción para algún valor de  $B$ , convirtiéndose entonces en una resonancia. Por otro lado, los estados que tienen una energía decreciente en función de la intensidad de campo, aumentará su distancia con la banda de conducción. Este escenario, y la transición de resonancia a estado ligado que discutimos ampliamente, podrían proporcionar técnicas de control para los electrones en puntos cuánticos.

En cuanto a la caracterización de las resonancias presentes en estos sistemas, encontramos que determinar el ancho de las mismas en función del campo cuando se utiliza el método  $k.p$  es una tarea aún mas complicada que en el caso de utilizar la AME. Para empezar, tenemos que considerar ocho ecuaciones acopladas en lugar de una sola. El tamaño de la matriz del Hamiltoniano implicada es entonces, al menos, 8 veces mayor, lo cual implica una pérdida de precisión numérica a la hora de calcular los autovalores y autoestados. Sin embargo, introduciendo una *pared de potencial blanda* [22], situada a distancias variables del punto cuántico, y utilizando esta distancia como parámetro variacional para obtener una densidad de estados, hemos estimado un ancho de resonancia de  $\Gamma \sim 10^{-6}$  eV. Estos resultados, sin embargo, no presentan la convergencia numérica necesaria para considerarlos confiables, por lo que buscamos otras formas de determinar esta cantidad. Otra herramienta de implementación relativamente sencilla en el contexto Hamiltonianos  $k.p$  es el método de densidad de estados para determinar el ancho de una resonancia [23]. Este enfoque supone que la densidad de estados tiene una forma Lorentziana cerca del pico asociado a la energía de la resonancia. Hasta ahora, nuestros resultados no muestran la forma Lorentziana requerida para proceder al ajuste necesario para determinar  $\Gamma$ . Consideramos necesario explorar el tratamiento de este problema para resonancias obtenidas

utilizando Hamiltonianos  $k.p$ , ya que esta caracterización de las mismas es de gran interés para evaluar la posible utilidad de estos estados.

La combinación de materiales que hemos considerado tenía múltiples propósitos. En primer lugar, permitirnos comparar nuestros resultados numéricos con resultados anteriores obtenidos para sistemas similares [75], [80], lo que nos permitió corroborar el correcto funcionamiento de los códigos realizados para obtener nuestros resultados. En segundo lugar, buscamos utilizar una combinación de materiales que son experimentalmente aptos para formar nanohilos y otras nanoestructuras. Y por último, para poder comparar con resultados anteriores calculados utilizando prácticamente los mismos materiales, pero utilizando la AME [15]. Antes de calcular el espectro de los nanohilos con pozo de potencial y barreras, calculamos el espectro para nanohilos tipo *core-shell*, como los considerados en la Referencia [75], y encontramos una excelente concordancia entre ambos conjuntos de resultados. Además, encontramos que para los nanohilos de un solo material la energía de los estados cercanos al fondo de la banda de conducción se puede obtener con una muy buena aproximación considerando sólo funciones de conjunto de bases con componente de momento angular  $L_z = 0$ , lo cual disminuye el tamaño de las matrices a diagonalizar, reduciendo el tiempo de cómputo.

En el futuro, sería interesante considerar combinaciones de otros materiales, con una mayor diferencia energética entre sus bandas. Esto daría lugar a una mayor probabilidad de localización y, presumiblemente, a una localización más fuerte de la resonancia. Además, permitiría utilizar mayores longitudes en la dirección  $z$  para el núcleo y las barreras, y un mayor radio del núcleo, lo que haría que los valores de longitudes y radios fueran más fáciles de implementar experimentalmente.

Por último, para los puntos cuánticos electrostáticos, los detalles experimentales para generar el potencial de confinamiento no parecen ser importantes, siempre y cuando la localización en un pozo con un radio efectivo menor que el radio externo del nanohilo sea factible. La ligadura de resonancias se ha encontrado para distintos potenciales de confinamiento y, para sistemas de un electrón, la única condición necesaria es la presencia de un pozo de potencial y de barreras. Por lo tanto, no es necesario considerar un potencial constante a trozos, sino que por simplicidad analítica es el potencial más sencillo con un perfil similar al de la banda de conducción considerado en lo que llamamos modelo dos. Asumir un pozo de potencial con simetría cilíndrica es necesario para simplificar el conjunto de bases necesario para implementar el método de Rayleigh-Ritz.



## Capítulo 6

# Estados de borde helicoidales en pozos cuánticos

En este Capítulo abordamos el estudio y caracterización de estados topológicos en pozos cuánticos semiconductores. Para ello calculamos el contenido de información de los estados de un electrón en este sistema, en el régimen invertido donde los estados de borde, topológicamente protegidos, son responsables de la conducción en los experimentos de Efecto Hall Cuántico.

### 6.1. Introducción

#### ANTECEDENTES

Desde los experimentos realizados por Klaus von Klitzing, que condujeron al descubrimiento del Efecto Hall Cuántico [32], los pozos cuánticos semiconductores se han convertido en un escenario ideal para estudiar una gran variedad de fenómenos: el Efecto Hall Cuántico (QHE, por sus siglas en inglés) [81], Efecto Hall Cuántico de Spin (QSHE, por sus siglas en inglés) [33], [34], [82] y la condensación de excitones y polaritones [83], [84], por nombrar algunos. En particular, en pozos cuánticos compuestos por Teluro de Mercurio (HgTe) y Teluro de Cadmio (CdTe), el QHSE es el responsable de las propiedades de conductancia características del sistema. Esto se debe a que se inducen en los bordes del sistema estados de borde helicoidales, topológicamente protegidos.

El estudio de estados topológicos, y su caracterización, es un campo de muchos avances en determinados sistemas. Hay dos herramientas principales en la caracterización de estos estados, que permiten identificarlos y diferenciarlos de estados *comunes*: una se basa en el cálculo de cantidades topológicas, como el número de Chern o el número  $Z_2$  [33], [85]-[87], mientras que en la otra se estudian la entropía o el espectro de entrelazamiento del estado de interés [16], [17], [88]. La diferencia entre estos enfoques se basa en la información con que se cuenta. El primero puede aplicarse cuando se dispone de la estructura de bandas, mientras que el segundo se ha utilizado sobre todo para estudiar modelos de muchos cuerpos cuando la matriz de densidad reducida de un subsistema bipartito puede calcularse de manera eficaz.

Tanto la entropía de entrelazamiento como el espectro de entrelazamiento, captan el carácter no local de un estado topológico, y se han utilizado para el estudio de estados en cadenas de spin [89]-[92] y para los estados de Laughlin, que se utilizan como aproximaciones del estado fundamental del efecto Hall cuántico para muchos electrones [88], [93]-[95]. Por otra parte, una

gran cantidad de trabajos se han dedicado al estudio de las propiedades generales del espectro de entrelazamiento de estados topológicos en diferentes escenarios físicos y geometrías [96]-[101], y este estudio ha sido de utilidad para revelar la presencia de una fase Haldane en aislantes topológicos [102], [103].

## MOTIVACIÓN

Nuestro interés en el estudio de estados helicoidales en pozos cuánticos semiconductores viene de encontrar una caracterización de los mismos utilizando cantidades entrópicas que permitan distinguirlos del resto de los estados del sistema. Los estados topológicos son de gran interés actualmente, ya que se cree que almacenar información en este tipo de estados puede resolver problemas de implementación en distintos protocolos. Además, el QSHE implica tener una corriente polarizada en el sistema, lo que permite un mayor control en comparación a corrientes no polarizadas, y abre la puerta a afectar por separado a las corrientes con polarización opuesta. Mas allá de estas características, que hacen necesario el estudio de estos estados, la sofisticación de los mismos y el hecho de que su obtención sea una tarea no trivial nos lleva a preguntarnos si hay alguna forma sencilla de detectarlos y caracterizarlos, y nos interesa en particular estudiar si poseen alguna característica en términos de información que los distinga de otros estados de interés.

Dado que las propiedades de los electrones en pozos cuánticos semiconductores están bien descritas mediante el método  $k.p$ , es natural preguntarse si los estados de borde de un electrón obtenidos de esta manera pueden ser analizados mediante las técnicas desarrolladas para el estudio de los estados cuánticos topológicos en cadenas cuánticas de spin. De ser así, o de encontrar alguna cantidad similar que permita caracterizarlos, estaríamos en condiciones de detectar estos estados mediante un procedimiento relativamente sencillo. Hay, sin embargo, dos dificultades principales para proceder con esta idea. La primera tiene que ver con la dificultad en obtener los estados de borde de un electrón y, principalmente, que los estados obtenidos sean realistas. Suponiendo que contamos con estos estados, brindados por el método  $k.p$ , la segunda dificultad es: ¿Cuál es el subsistema que hay que trazar para obtener la matriz de densidad reducida necesaria para calcular las entropías y el espectro del entrelazamiento?.

Con respecto a la posibilidad de obtener estados de borde realistas en pozos cuánticos, esta no es una tarea sencilla, a diferencia de calcular el espectro de estos sistemas [104]. Esto se debe a que estos estados dependen de, al menos, dos coordenadas, hay condiciones de contorno, tanto en los bordes del sistema como en las interfases entre los materiales que lo componen, que deben satisfacerse y los regímenes físicos de interés surgen cuando hay varias bandas que interactúan, lo que hace obligatorio el cálculo en términos de Hamiltonianos  $k.p$  de muchas bandas. Recientemente, varios trabajos han abordado esta cuestión y es posible obtener estos estados ya sea con o sin un campo magnético externo aplicado [76], [77], [105], [106]. Disponer de estos estados, aproximados pero realistas, nos motiva a utilizarlos para el estudio de medidas de información que ayuden a la descripción de estados topológicos en estos sistemas.

Por otro lado, el problema de biparticionar el espacio de Hilbert de estos estados es un tanto mas complejo para las herramientas con que contamos. Como mencionamos en la Sección 4.2, y mostramos en el Apéndice D, la base del Hamiltoniano  $k.p$  podría ser una herramienta de gran interés para estudiar entropías de entrelazamiento entre, por ejemplo, polarización y simetrías de los estados. Sin embargo, las dificultades para obtener estados realistas obligan a usar Hamiltonianos  $k.p$  que no permiten esta separación del sistema. Una alternativa a esto, es el uso de la entropía de espacio real [16], introducida en la Sección 2.2.3.

## PROPUESTA

Nuestro objetivo es estudiar y caracterizar -mediante cantidades entrópicas- los estados de borde presentes, bajo ciertas configuraciones, en pozos cuánticos compuestos por HgTe/CdTe .

Para ello, es necesario contar con los autoestados de este sistema bidimensional. Como vimos en la Sección 4.1.4, este problema se puede abordar utilizando el Hamiltoniano efectivo  $4 \times 4$ , propuesto por Krishtopenko y colaboradores en la Referencia [77]. A partir de la solución del Hamiltoniano de Kane (Sección 4.1.3) para obtener los estados de *bulk* del sistema, y la consecuente resolución del Hamiltoniano efectivo (Sección 4.1.4), se obtienen los estados de borde en dos dimensiones. Utilizaremos estos estados para el cálculo de diferentes entropías, para obtener información de los mismos.

En cuanto a las cantidades a estudiar, como vimos anteriormente, la entropía de espacio real es un buen candidato debido a las características de los estados obtenidos. Sin embargo, veremos que es posible definir otras entropías que agregan información a esta última.

Los parámetros necesarios para escribir los Hamiltonianos para el sistema bajo estudio, e información adicional sobre la base variacional utilizada para resolver el Hamiltoniano de Kane, se derivan al Apéndice D.

## 6.2. Modelo

El sistema bajo estudio es un pozo cuántico cuyas capas externas están compuestas por CdTe, mientras que la capa interna es de HgTe. Más específicamente, consideramos un pozo cuántico infinito en la dirección  $x$ , de ancho  $L = 1000$  nm en la dirección  $y$  y con un alto de la capa intermedia  $d = 7$  nm o  $d = 9$  nm en la dirección  $z$ . La elección del espesor de la capa intermedia es un factor no menor, ya que el QSHE depende de la inversión de bandas que presentan estos materiales para ciertas configuraciones (ver Sección 2.4). Para los materiales seleccionados, esta inversión de bandas se da para espesores mayores a  $d_c \sim 6,3$  nm. En la Figura 6.1 podemos ver una representación esquemática del sistema, junto con el sistema de coordenadas empleado.

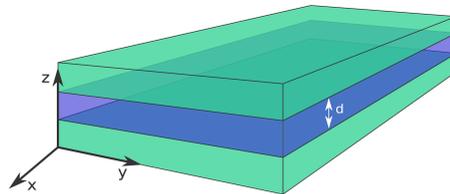


Figura 6.1: Representación esquemática de un pozo cuántico. Las capas externas, en verde, corresponden a CdTe, mientras que la capa violeta interna es de HgTe. El espesor del pozo cuántico está dado por  $d$ , el alto de la capa interna, y el sistema de coordenadas es el utilizado en el Hamiltoniano y para todos los cálculos realizados en este sistema.

## 6.3. Estados de un pozo cuántico compuesto por HgTe/CdTe

### ESTADOS DE *BULK*

Si el pozo cuántico es infinito, o más exactamente, si no hay condiciones de contorno en valores finitos de las coordenadas  $x$  o  $y$ , la estructura de banda electrónica del pozo cuántico puede calcularse utilizando el Hamiltoniano de Kane, descrito en la Sección 4.1.3. Los paráme-

tros involucrados en el Hamiltoniano, para los materiales utilizados, son los presentados en las Tablas D.3 y D.4.

Siguiendo el procedimiento descrito en la Sección 4.2 para obtener los estados aproximados de este Hamiltoniano, utilizamos la base de funciones  $B$ -Spline [107], [108] como base variacional para escribir la expresión matricial del mismo. Estas funciones, definidas como polinomios de soporte compacto, son idóneas para este tipo de sistemas, ya que permiten una simple implementación de las condiciones de contorno en las interfaces entre materiales. Detalles sobre las mismas pueden encontrarse en el Apéndice D, y en las referencias allí mencionadas.

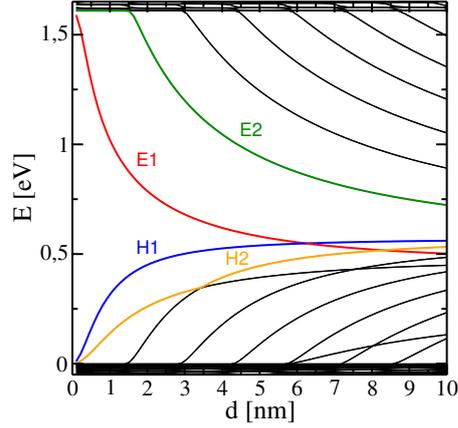


Figura 6.2: Espectro de energías en función del espesor de la capa intermedia para un pozo cuántico de HgTe/CdTe. En  $d \sim 6,3$  nm se puede apreciar la inversión de bandas, entre las sub-bandas  $E_1$  y  $H_1$ , fenómeno que posibilita el QSHE.

La Figura 6.2 muestra el espectro de este sistema en función del espesor de la capa intermedia  $d$ , y el efecto sobre la estructura de bandas que tiene este parámetro. Para  $d \simeq 0$  el sistema está compuesto únicamente por CdTe, y se pueden apreciar, por debajo del cero de energía y por encima de  $E \sim 1,53$  eV, las bandas de valencia y de conducción, respectivamente, del semiconductor (adoptamos la convención de que la parte superior de la banda de valencia para este material corresponde a 0 eV). A medida que el espesor de la capa de HgTe aumenta, el ancho del gap entre estas bandas para el sistema se mantiene prácticamente constante. Hay, sin embargo, niveles de energía que se desprenden de ambas bandas, y que son más numerosos para valores crecientes del espesor  $d$ . La convención utilizada para nombrar estos estados es la siguiente: los que se desprenden de la banda de conducción se denotan como  $En$ , donde  $n$  es un número natural que corresponde al orden de desprendimiento. Los niveles que se desprenden de la banda de valencia se denotan por  $Hn$ , donde  $n$  tiene el mismo significado, pero para los estados  $H$ .

Para campo nulo estos estados son doblemente degenerados, y cada valor de energía en el espectro se corresponde con los estados de spin positivo y negativo, es decir, la energía representada en rojo en la Figura 6.2 se corresponde con los estados  $|E1, +\rangle$  y  $|E1, -\rangle$ .

Como se puede observar, a partir de  $d \simeq 6,3$  nm se producen una serie de cruces entre los niveles de energía, evidenciando la inversión de bandas que da lugar al QSHE.

## ESTADOS DE BORDE

Los estados  $|En, \pm\rangle$  y  $|Hn, \pm\rangle$  del espectro de *bulk* presentado, son los estados mencionados en la Sección 4.1.4 para definir el Hamiltoniano efectivo,  $\mathbf{H}_{eff}$ , que utilizaremos para obtener los

estados de borde del sistema, cuando lo consideramos finito en la dirección  $y$ .

Para escribir la expresión matricial del Hamiltoniano efectivo, utilizamos la base de funciones

$$\psi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right), \quad (6.1)$$

donde  $L$  es el ancho del sistema en  $y$ , y  $n = 1, 2, \dots, N$ . Notar que las funciones  $\psi_n$  satisfacen condiciones de contorno homogéneas en  $y = -L/2$  y  $y = L/2$ . El valor de  $N$  va a depender de las dimensiones del sistema, y encontramos que el valor óptimo es  $N = 1950$  para  $d = 7$  nm y  $N = 2500$  para  $d = 9$  nm. Para encontrar estos valores, comparamos el espectro obtenido con el espectro que se obtiene si se resuelve el Hamiltoniano de Kane bidimensional.

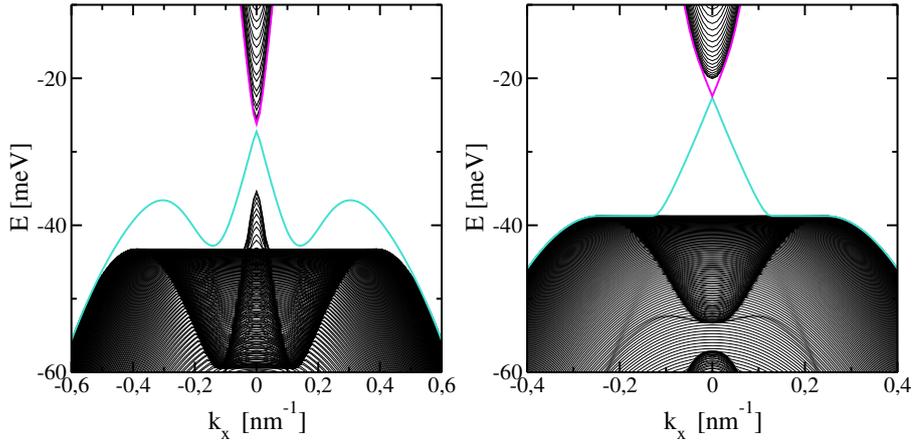


Figura 6.3: Espectro de  $\mathbf{H}_{eff}$  para el pozo cuántico con  $d = 7$  nm (panel izquierdo) y  $d = 9$  nm (panel derecho), en función de  $k$ . Los autovalores del continuo están representados por curvas negras, mientras que la energía de los estados de borde corresponde a las líneas rosa y celeste. Como se puede observar, en  $k_x = 0$  el gap entre las sub-bandas se cierra.

La figura 6.3 muestra el espectro del Hamiltoniano efectivo en función de  $k_x$  para  $d = 7$  nm (panel izquierdo) y  $d = 9$  nm (panel derecho). Como puede observarse, en ausencia de un campo magnético externo los espectros son simétricos en función de  $k$ , es decir,  $E(+k) = E(-k)$ . Los autovalores del Hamiltoniano correspondientes a valores positivos de  $k_x$  se obtienen a partir de  $\mathcal{H}$ , mientras que los correspondientes a valores negativos de  $k_x$  se obtienen con  $\mathcal{H}^*$  (ver Sección 4.1.4). Los estados de bordes helicoidales se representan con líneas de color celeste y rosa en la Figura 6.3. Estos estados pueden ser identificados con facilidad, ya que aparecen en el gap entre las sub-bandas  $H1$  y  $E1$  para  $d = 7$  nm, y entre  $H1$  y  $E2$  para  $d = 9$  nm.

La presencia de estos estados hace que, para  $k_x = 0$ , el gap entre estas sub-bandas se cierre, formándose un *cono de Dirac* en el espectro del sistema. La presencia de este fenómeno es reconocida como un indicativo de la presencia de estados topológicos [109].

## ESTADOS BIDIMENSIONALES DEL POZO CUÁNTICO

Estamos ahora en condiciones de escribir los autoestados del pozo cuántico bidimensional, en función de las coordenadas  $y, z$ . A continuación presentamos una recapitulación de cómo se obtienen estos estados, a partir de los procedimientos descritos en el Capítulo 4.

A partir del Hamiltoniano de Kane, obtuvimos los estados de *bulk* del sistema, que podemos

expresar según

$$\Psi(z) = \sum_{i=1}^8 \sum_{p=1}^M c_p^i B_p(z) |i\rangle, \quad (6.2)$$

donde  $B_p$  son las funciones  $B$ -Spline,  $|i\rangle$  es la base del Hamiltoniano de Kane y  $c_p^i$  son los coeficientes obtenidos con el método de Rayleigh-Ritz.

Algunos de los estados así obtenidos, denominémoslos  $|j\rangle = \Psi_j(z)$  con  $j = 1, \dots, 8$ , pasan a ser la base del Hamiltoniano efectivo utilizado, cuyas soluciones pueden escribirse según

$$\Phi_{\pm,j} = \sum_{n=1}^N d_n^{i,\pm} \psi_n(y) |j\rangle, \quad (6.3)$$

donde  $\pm$  indica si el autoestado corresponde a  $k_x$  positivo o negativo,  $\psi_n$  son las funciones definidas en la Ecuación 6.1 y  $j$  hace referencia a los estados base del Hamiltoniano efectivo.

Combinando estas soluciones, obtenemos los estados bidimensionales del sistema, dados por

$$|\phi(y, z)\rangle_{\pm} = \sum_{i,k,n,p} \alpha_{n,p}^{i,k,\pm} \psi_n(y) B_p(z) |k\rangle, \quad (6.4)$$

donde  $i = 1, \dots, 4$  y  $\pm$  corresponden a los autoestados del Hamiltoniano efectivo y  $|k\rangle$  para  $k = 1, \dots, 8$  es la base del Hamiltoniano de Kane. Los coeficientes  $\alpha_{n,p}^{i,k,\pm}$  agrupan a los coeficientes de las Ecuaciones 6.2 y 6.3.

En lo que sigue, nos centraremos en la caracterización de los estados de borde localizados,  $|\phi(y, z)\rangle_{\pm}$ , para determinados valores  $k_x$  y  $B$ , la intensidad del campo magnético aplicado en la dirección  $z$ . Esta elección para la dirección del campo magnético no es la más general, pero corresponde a las configuraciones experimentales más comunes. Además, presenta varias ventajas analíticas, ya que el Hamiltoniano efectivo dependiente del campo magnético mantiene la estructura de bloques de la ecuación 4.29.

## 6.4. Resultados

La intrincada forma en que los autoestados variacionales dependen de diferentes coeficientes, funciones base y parámetros del sistema (ver Ecuación 6.4), conduce a una serie de posibles particiones del espacio de Hilbert, cada una de las cuales daría lugar a una caracterización diferente de los estados. A continuación estudiaremos algunas de estas posibilidades.

### 6.4.1. Caracterización de los estados de borde mediante entropías de espacio real

Como hemos mencionado, no es posible escribir al espacio de Hilbert de los autestados de la Ecuación 6.4 como un espacio producto para obtener una bipartición natural del sistema. Vimos también que para sistemas bidimensionales en el plano  $(y, z)$ , una herramienta que permite una bipartición del sistema es la llamada entropía del espacio real, que podemos definir para este sistema eligiendo

$$A = \mathcal{D}, \quad B = \text{eje } z \text{ de coordenadas}, \quad (6.5)$$

donde  $\mathcal{D}$  es un dominio definido en la coordenada  $y$ . A partir de esta definición, se puede calcular la entropía de von Neumann de la matriz de densidad reducida correspondiente, como describimos en las Secciones 2.2.2 y 2.2.3.

Para las autofunciones de la Ecuación 6.4,  $|\phi(y, z)\rangle$  -donde omitimos el índice  $\pm$  por simplicidad en la notación-, procedemos a calcular la entropía de von Neumann de espacio real,  $S_{vn}$ , a partir del estado bidimensional para electrones

$$\rho = |\phi\rangle \langle \phi|, \quad (6.6)$$

trazando el dominio espacial  $\mathcal{D}$ . De este modo, construimos una matriz de densidad reducida en una coordenada

$$\rho_{\mathcal{D}}(z, z') = \frac{1}{N} \int_{\mathcal{D}} |\phi(y, z)\rangle \langle \phi(y, z')| dy, \quad (6.7)$$

donde

$$N = \int \int_{\mathcal{D}} |\phi(y, z)\rangle \langle \phi(y, z)| dy dz. \quad (6.8)$$

Los autovalores,  $\lambda_{\ell}$ , del operador de densidad reducido en la Ecuación 6.7, necesarios para calcular la entropía del estado de borde, se obtienen resolviendo la ecuación integral

$$\int \rho_{\mathcal{D}}(z, z') \varphi_{\ell}(z') dz' = \lambda_{\ell} \varphi_{\ell}(z), \quad (6.9)$$

donde  $\varphi_{\ell}(z)$  son las autofunciones de la matriz de densidad reducida. Este problema se puede convertir en un problema algebraico de autovalores, eligiendo un conjunto de funciones base y diagonalizando la matriz de densidad reducida. Notar que, una vez que se ha trazado el subsistema  $B$ , el operador de densidad resultante depende únicamente de las funciones  $B$ -Spline y de la base del Hamiltoniano de Kane, por lo que estos dos conjuntos de funciones son la elección natural de una base para escribir la matriz de densidad reducida. Las entradas de esta matriz están dadas por

$$[\rho_{\mathcal{D}}]_{ka, lb} = \frac{1}{N} \sum_{i, n, p} \sum_{j, m, q} (\alpha_{n, p}^{i, k, \pm})^* \alpha_{m, q}^{j, l, \pm} I_{nm}^{\mathcal{D}} S_{a, p} S_{q, b}, \quad (6.10)$$

donde  $k$  y  $l$  son los índices de la base de Kane,  $a$  y  $b$  corresponden a la base de  $B$ -Splines,

$$N = \sum_{i, k} \sum_{n, m} \sum_{p, q} (\alpha_{n, p}^{i, k, \pm})^* \alpha_{m, q}^{j, l, \pm} S_{p, q} I_{nm}^{\mathcal{D}}, \quad (6.11)$$

y

$$I_{nm}^{\mathcal{D}} = \int_{\mathcal{D}} \psi_n^*(y) \psi_m(y) dy \quad ; \quad S_{p, q} = \langle B_p | B_q \rangle. \quad (6.12)$$

Cuando el dominio  $\mathcal{D}$  es toda la coordenada  $y$ , entonces

$$I_{nm}^{\mathcal{D}} = \delta_{n, m}, \quad (6.13)$$

donde  $\delta$  es la función de Kronecker.

En cuanto a la localización de las autofunciones  $|\phi(y, z)\rangle$ , estas se extienden a lo largo del pozo cuántico en la dirección  $y$ , o están fuertemente localizadas en sus bordes. Esto implica que no hay una elección natural para el dominio  $\mathcal{D}$  si se quiere emplear la entropía de von Neumann de espacio real para distinguir entre los diferentes estados del sistema. Consideramos entonces dos escenarios distintos: por un lado, tomamos a  $\mathcal{D}$  como toda la coordenada  $y$ , y por el otro definimos una serie de dominios distintos, para estudiar la entropía en función de sus tamaños. Los resultados obtenidos en cada caso se comentan a continuación.

## LOS SUBSISTEMAS SON LAS COORDENADAS $y, z$

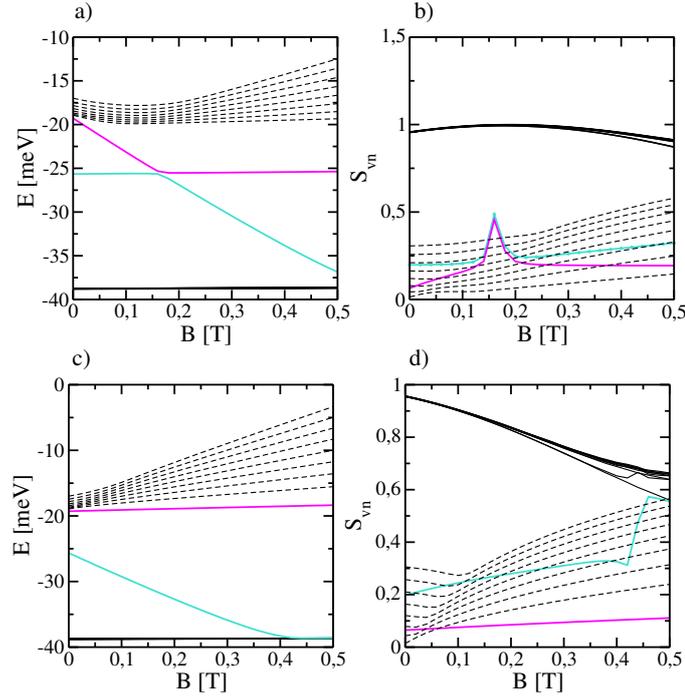


Figura 6.4: a) Espectro de energías del Hamiltoniano efectivo para un pozo cuántico de espesor  $d = 9$  nm en función de la intensidad del campo magnético  $B$ , para  $k_x = 0,02 \text{ nm}^{-1}$ . Las curvas negras continuas representan los estados de mayor energía de la banda de valencia, las curvas negras discontinuas son los estados de menor energía de la banda de conducción, y los estados representados en rosa y celeste corresponden a los dos estados de borde. b) Entropía de espacio real tomando al eje  $y$  como el dominio  $\mathcal{D}$ , para los estados en el panel a). Los paneles c) y d) presentan la misma información que los paneles a) y b), respectivamente, para el mismo sistema con  $k_x = -0,02 \text{ nm}^{-1}$

A continuación consideramos la entropía de espacio real cuando la matriz densidad reducida se obtiene trazando sobre toda la coordenada  $y$ .

La Figura 6.4 a) muestra el espectro del Hamiltoniano efectivo, para un pozo cuántico de espesor  $d = 9$  nm, como función de la intensidad del campo magnético  $B$ , para  $k_x = 0,02 \text{ nm}^{-1}$ . Esta Figura muestra algunos autovalores variacionales de las bandas de conducción y valencia, mediante curvas negras discontinuas y continuas, respectivamente. Los estados helicoidales se representan con las curvas celeste y rosa, utilizando el mismo código de colores de la Figura 6.3. El panel b) muestra el comportamiento de la entropía del espacio real,  $S_{vn}$ , para los estados incluidos en el panel a). Los paneles c) y d) son equivalentes a los paneles a) y b), respectivamente, pero corresponden a  $k_x = -0,02 \text{ nm}^{-1}$ . Las curvas de los paneles b) y d) muestran un *ordenamiento invertido* con respecto a los paneles a) y c), es decir, los estados de la banda de valencia tienen entropías mayores que los estados en la banda de conducción.

Los valores de la entropía de espacio real de los estados considerados, muestran que los estados helicoidales tienen las mismas simetrías que los estados de la banda de valencia, que corresponden a la sub-banda  $H1$ , es decir, son estados tipo agujero. Este comportamiento se encontró para varios valores de  $k_x$  y  $d$ . Es necesario tener en cuenta que para los valores estudiados de estos parámetros, la parte inferior a la banda de conducción es siempre la sub-banda *bulk*  $H1$ . Este no es el caso de la parte superior de la banda de valencia, que es la sub-banda  $E2$  para  $d = 7, 8$  nm

y  $H2$  para  $d = 9$  nm [77].

### ENTROPÍA DE ESPACIO REAL EN FUNCIÓN DEL DOMINIO $\mathcal{D}$

Para explorar el comportamiento espacial de los autoestados  $|\phi\rangle_{\pm}$ , calculamos la entropías de espacio real para tres dominios diferentes, definidos según

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_1 & : y \in \left[ \frac{L}{2} - \Delta, \frac{L}{2} \right], \\ \mathcal{D}_2 & : y \in \left[ \frac{L}{2}, \frac{L}{2} + \Delta \right], \\ \mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2 & : y \in \left[ \frac{L}{2} - \Delta, \frac{L}{2} + \Delta \right],\end{aligned}\tag{6.14}$$

donde  $\Delta \in [0, \frac{L}{2}]$ . A partir de estos dominios, podemos calcular las matrices densidad reducidas definidas en la Ecuación 6.7,  $\rho_{\mathcal{D}_1}$ ,  $\rho_{\mathcal{D}_2}$  y  $\rho_{\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2}$ , y calculamos sus autovalores y las correspondientes entropías de espacio real  $S(\rho_{\mathcal{D}_1})$ ,  $S(\rho_{\mathcal{D}_2})$  y  $S(\rho_{\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2})$  como funciones de  $\Delta$ . Además, calculamos la información mutua [110], definida por  $S(\rho_{\mathcal{D}_1}) + S(\rho_{\mathcal{D}_2}) - S(\rho_{\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2})$ .

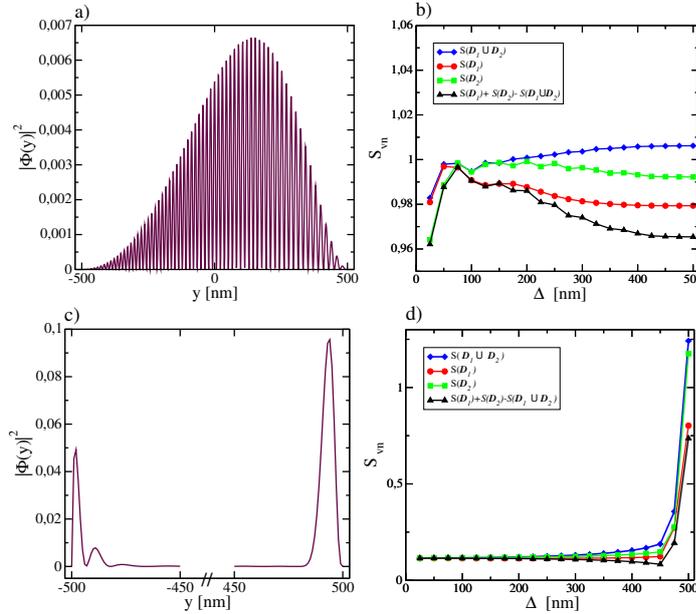


Figura 6.5: a) Probabilidad de densidad  $|\Phi(y)|^2$  para el primer estado inmediatamente debajo del gap, en función de la coordenada  $y$ . b) Entropía de espacio real de las matrices densidad reducidas  $\rho_{\mathcal{D}}$ , en función de  $\Delta$ , para los dominios  $\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2$  (azul),  $\mathcal{D}_1$  (rojo) y  $\mathcal{D}_2$  (verde), y la cantidad  $S(\rho_{\mathcal{D}_1}) + S(\rho_{\mathcal{D}_2}) - S(\rho_{\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2})$  (negro). Los paneles c) y d) muestran las mismas cantidades que los paneles a) y b), para el estado de borde, dentro del gap. Los parámetros del sistema son  $d = 7$  nm,  $B = 0,3$  T y  $k_x = -0,29$  nm $^{-1}$ .

Como se ha señalado anteriormente, la energía del estado de borde se encuentra dentro del gap entre dos sub-bandas. Este autovalor es degenerado si no se aplica ningún campo magnético,  $B$ , al sistema, y esta degeneración se rompe para  $B \neq 0$ . En lo que sigue nos concentraremos en los estados en el gap y los inmediatamente superiores e inferiores que pertenecen al continuo, para distintos valores del campo magnético.

Los paneles a) y b) de la Figura 6.5 corresponden a los resultados obtenidos para el estado de mayor energía por debajo del gap. El panel a) muestra el comportamiento de  $|\Phi(y)|^2$  (Ecuación 6.3) en función de la coordenada  $y$ . El panel b) muestra las entropías de espacio real  $S(\rho_{\mathcal{D}_1})$ ,  $S(\rho_{\mathcal{D}_2})$  y  $S(\rho_{\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2})$  y la cantidad  $S(\rho_{\mathcal{D}_1}) + S(\rho_{\mathcal{D}_2}) - S(\rho_{\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2})$  para este estado, todas como funciones de  $\Delta$ . Los datos mostrados en la Figura 6.5 se obtuvieron para  $k_x = -0,29 \text{ nm}^{-1}$ , un campo magnético  $B = 0,3 \text{ T}$ , para un pozo cuántico con  $d = 7 \text{ nm}$  y  $L = 1000 \text{ nm}$ . La naturaleza extendida del estado en el panel a) se manifiesta claramente en  $|\Phi(y)|^2$ . Las entropías correspondientes (panel b)) muestran un pequeño cambio cuando  $\Delta$  pasa de cero a  $L/2$  (notar la escala de el eje vertical). Curiosamente, los mayores cambios en las entropías se muestran para valores relativamente pequeños de  $\Delta$ , alrededor de  $100 \text{ nm}$  frente a una longitud total  $L = 1000 \text{ nm}$ . Este comportamiento es atribuible al efecto de las condiciones de contorno homogéneas sobre las funciones envolventes. Los paneles c) y d) de la Figura 6.5 muestran las mismas cantidades que los paneles a) y b), para los mismos parámetros del sistema, pero para el único estado de borde presente en esta configuración. La fuerte localización del estado cerca de los bordes del pozo cuántico, panel c), da lugar a un comportamiento muy pronunciado de las entropías, como puede verse en el panel d). A pesar de esto, no es claro si esta cantidad permite diferenciar estados de borde topológicos de estados localizados.

#### 6.4.2. Caracterización de los estados de borde mediante la entropía *edge*

Los resultados obtenidos respecto a la entropía de espacio real que se muestra en las Figuras 6.4 y 6.5, sugieren que se necesita otra cantidad para medir la localización en la coordenada  $y$  y la fuerte polarización de los estados de borde helicoidales.

Como se ha dicho antes, las elecciones que se pueden hacer de dos subsistemas para obtener una entropía similar a las utilizadas en teoría de la información son varias. Sin embargo, las características matemáticas de los estados de borde obtenidos mediante los métodos descritos limitan la cantidad de opciones factibles. Una alternativa para este tratamiento es considerar una cantidad tipo entropía que se obtenga sin trazar sobre una parte del espacio de Hilbert. Muchas de estas cantidades fueron consideradas en este trabajo, en el que calculamos la entropía de von Neumann teniendo en cuenta diferentes particiones de los coeficientes de los estados propios obtenidos.

En este sentido, la cantidad mas simple que se puede considerar es

$$S^{edge} = - \sum_n \sum_i |d_n^{i,\pm}|^2 \log(|d_n^{i,\pm}|^2), \quad (6.15)$$

donde la suma en  $n$  es sobre la base en la dirección  $y$ , y la suma sobre  $i$  es en la base del Hamiltoniano efectivo. Recordemos que los coeficientes  $d_n^{i,\pm}$  corresponden a la solución del Hamiltoniano efectivo (Ecuación 6.3). La entropía  $S^{edge}$  puede considerarse una simplificación de la entropía de espacio real si se toma traza sobre la coordenada  $z$ .

Las Figuras 6.6 a) y c) muestran los espectros de energía de un pozo cuántico de espesor  $d = 9 \text{ nm}$  en función del campo magnético, para  $k = 0,01 \text{ nm}^{-1}$  y  $k = -0,01 \text{ nm}^{-1}$  respectivamente. La banda de valencia se representa con líneas negras, mientras que la banda de conducción está en líneas negras discontinuas. Las líneas celestes y rosas son los estados de borde helicoidal en esta configuración. Los paneles b) y d) de la Figura 6.6 muestran la entropía  $S^{edge}$  para los estados de los paneles a) y c) respectivamente. La fuerte polarización de los estados helicoidales de borde se pone claramente de manifiesto con esta medida, ya que presentan entropías mayores que cualquiera de los estados de *bulk* cercanos en energía. Una clara diferenciación de los estados

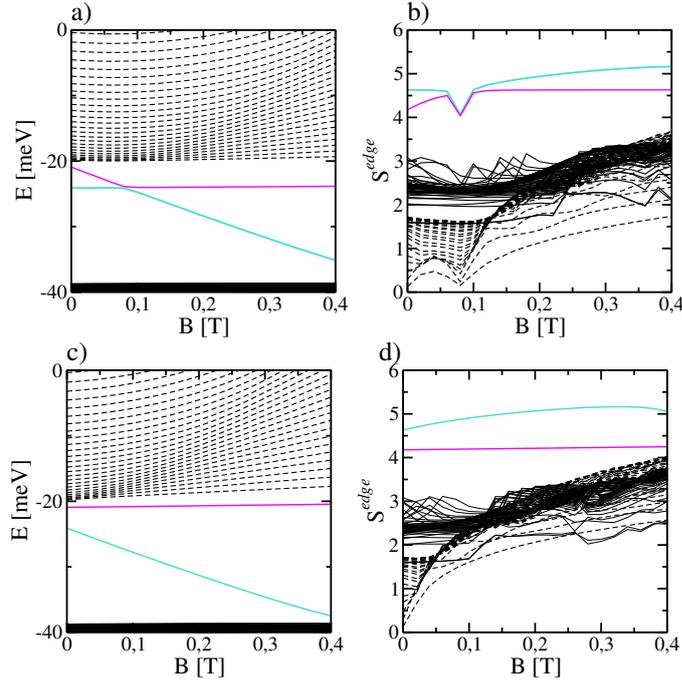


Figura 6.6: a) Espectro de energía del Hamiltoniano efectivo para un pozo cuántico de espesor  $d = 9$  nm en función de la intensidad del campo magnético,  $B$ , para  $k_x = 0,01 \text{ nm}^{-1}$ . La banda de valencia está representada por curvas negras continuas, las curvas negras discontinuas corresponden a la banda de conducción y la energía de los estados de borde se muestra en las curvas rosa y celeste. b) La entropía  $S^{edge}$  para los estados cuyas energías se muestran en a). Los paneles c) y d) muestran la misma información que los paneles a) y b), para  $k_x = -0,01 \text{ nm}^{-1}$

de borde helicoidal de los estados normales se obtiene de esta cantidad, que prácticamente no cambia para estos dos estados en el intervalo de parámetros mostrado.

## 6.5. Resumen y Conclusiones

En este trabajo, a partir del cálculo numérico de autofunciones que describan de manera realista los estados helicoidales de borde de un pozo cuántico HgTe/CdTe, investigamos las propiedades de los mismos, y maneras de distinguirlos de otros estados del sistema a través de distintas entropías. Una de las entropías utilizadas es la entropía de espacio real, a partir de distintas definiciones de los *subsistemas espaciales*, y la otra fue una entropía propuesta de manera *ad hoc* en vista de las dificultades de poder identificar efectivamente los estados de interés.

Incluso a pesar de la simplificación que supone tratar el problema bidimensional utilizando un Hamiltoniano efectivo, que reduce en forma significativa la dimensión de los problemas de autovalores a resolver, todo el procedimiento es bastante exigente e involucra un tiempo de cómputo alto. Esto se debe, en gran parte, al tamaño de las bases necesarias para escribir el Hamiltoniano para captar los estados localizados en regiones significativamente menores al tamaño del sistema. Para lograr esto han sido necesarias del orden de  $N \sim 2000$  funciones base para cada elemento del Hamiltoniano efectivo. No obstante, hemos estudiado la caracterización de los estados de borde utilizando las diferentes entropías para diferentes valores del espesor la

capa intermedia del sistema, tomando  $d = 7$  nm,  $d = 8$  nm y  $d = 9$  nm, y para una variedad de valores de  $k$  y  $B$  para cada valor de  $d$ . En todos los casos analizados, el comportamiento observado fue, cualitativamente, el mismo que el mostrado en Figuras 6.4, 6.6 y 6.5.

Está claro que diferentes elecciones para el subespacio que se traza dan lugar a una caracterización diferente de los estados helicoidales de borde. En particular, encontramos que la entropía  $S^{edge}$  identifica claramente los estados de borde, siendo estos los que poseen más información en comparación al resto de los estados que están cerca del gap entre las bandas de valencia y conducción del sistema. Además, encontramos que esta información es prácticamente independiente de la intensidad del campo magnético externo. Sería interesante estudiar si este rasgo se mantiene frente a la presencia de impurezas no-magnéticas en el sistema, ya que los estados helicoidales están topológicamente protegidos frente a las mismas.

Para la caracterización y comparación entre los estados del sistema, no incluimos estados que se encuentren demasiado lejos del gap de energía. Hay al menos dos razones que justifican el proceder de esta manera. La primera tiene que ver con que la energía de las bandas forma un continuo, y esto hace difícil prever cómo se puede separar un estado dado de otro que se encuentra cerca de él en energía. El método de Rayleigh-Ritz representa las bandas continuas con un conjunto discreto de autovalores, cuya densidad es una buena aproximación a la densidad ideal de estados, pero la relación entre los estados continuos y los variacionales se hace más difícil de entender cuando se consideran los estados que se encuentran lejos del gap.

La segunda razón que apoya que los estados alejados en energía del gap no deben ser considerados, proviene del hecho de que el Hamiltoniano efectivo se obtiene utilizando una expansión perturbativa, utilizando los estados de *bulk* de las sub-bandas  $E1$ ,  $E2$ ,  $H1$  y  $H2$ . En las bandas de conducción y de valencia, especialmente en la última, hay una fuerte mezcla entre las sub-bandas asociadas a  $E1$  y  $H2$ , lo que lleva a un espectro variacional lleno de cruces y cruces evitados que hacen muy difícil identificar y seguir el estado correspondiente a un autovalor en función de algún parámetro, como el campo magnético, o incluso al mismo autovalor. Este fenómeno es bien conocido y ha sido señalado en diferentes estudios relativos a sistemas con campos magnéticos externos aplicados, donde los cruces evitados provienen de estados del continuo asociados a diferentes Niveles de Landau [15], [24], [75].

Como puede verse en la Figura 6.5, el estudio del entrelazamiento en el espacio real por medio de la entropía de von Neumann, es capaz de cuantificar y caracterizar la fuerte localización de los estados de borde. El comportamiento de la entropía de von Neumann separa claramente los estados de borde -localizados- de los estados extendidos. Incluso aunque el cálculo de los diferentes pasos necesarios para obtener la entropía de von Neumann representa una gran complejidad, es interesante que la diferencia entre cada tipo de estados se pueda apreciar tan claramente. La cantidad  $S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{A \cup B})$ , estudiada en este trabajo, ha sido propuesta para analizar correlaciones de largo alcance y estados topológicos [111], motivo por el cual la incorporamos a nuestro estudio. Sin embargo, creemos que esta cantidad no distingue de forma clara entre estados de *bulk* y de borde.

Cabe aclarar que los resultados presentados en este Capítulo corresponden a un conjunto muy reducido de parámetros ( $k$ ,  $d$  y  $B$ ), sin embargo son representativos de los rasgos físicos que se observan para otros valores de dichos parámetros. Para la elección de los parámetros del pozo cuántico hay que tener en cuenta algunas consideraciones. En primer lugar, de la Figura 6.3 se desprende que para valores muy pequeños de  $k$ , los estados helicoidales están más alejados de las bandas de conducción y valencia. Además, las distintas perturbaciones realizadas para obtener los Hamiltonianos de Kane y efectivo, dan lugar a soluciones precisas para valores pequeños de este parámetro. En segundo lugar, cuando se aplica un campo magnético externo los estados helicoidales acaban entrando en las bandas de conducción o de valencia. El valor real de los campos magnéticos para los que los estados helicoidales entran en las bandas depende de  $k$ , el

espesor  $d$ , etc. El valor de  $k$  y la magnitud del campo magnético son proporcionalmente inversos, por lo que hay que hacer algún compromiso al elegir el valor de  $k$ , para no precisar de campos muy intensos.

Los dominios que elegimos para calcular las matrices de densidad reducida no son las únicas opciones posibles. Elegir segmentos disjuntos  $A$  y  $B$  es una posibilidad que consideramos puede brindar mas información sobre estos estados. Estamos trabajando en esta línea de investigación. Otras cuestiones que merecen ser investigadas son el efecto de los campos magnéticos externos con componentes en el plano  $(x, y)$ , los Hamiltonianos efectivos de mayor dimensión y la posibilidad de considerar un tratamiento bidimensional completo del Hamiltoniano de Kane.



## Capítulo 7

# Conclusiones generales

Todo el trabajo aquí presentado gira en torno al estudio de cantidades de información cuántica para lograr una descripción y caracterización de distintos estados de particular interés en sistemas cuánticos.

En general, cuando hablamos de cantidades de información, pensamos en medidas que distingan la capacidad de almacenamiento de información de determinados estados. A partir de los sistemas estudiados, y los distintos problemas abordados, es claro que las cantidades de información utilizadas, ya conocidas o definidas en estos trabajos, son de gran utilidad para obtener información de los estados, mas allá de su capacidad de almacenamiento. Sin embargo, al ser cantidades no espectrales, requieren del conocimiento exacto de los estados, o de una aproximación precisa y realista a los mismos. En sistemas de muchos cuerpos, estos estados pueden obtenerse mediante la aplicación de diversos métodos, como el grupo de renormalización de la matriz de densidad (DMRG). En sistemas de variables continuas no existen aún formas sistemáticas de obtener los estados de un sistema y, como se ilustra en el desarrollo de la tesis, en particular en los Apéndices incluidos, esto implica en la mayoría de los casos una gran cantidad de cálculos.

La complejidad de algunas expresiones involucradas al cálculo de las cantidades estudiadas -entropías, matrices densidad reducidas, autofunciones.- se vuelve mas evidente a la hora de implementar códigos que brinden o procesen la información deseada. El problema mas frecuente en este sentido fue el de balancear entre la simplicidad del código y el tiempo de CPU que requiere, cuando el mismo puede ser implementado en diferentes maneras. Todos los códigos utilizados fueron implementados en *Fortran*, *Matlab* o *Mathematica*, siendo esta ultima de gran utilidad en el cálculo sistemático de integrales y sus expresiones generales en función de los parámetros de los sistemas. En el estudio de nanoestructuras semiconductoras, la cantidad de cálculos intermedios y la necesidad de obtener resultados con alta precisión llevó a que la mayor parte de los códigos implementados se realizaran parte en Matlab y parte en Fortran, eligiendo uno u otro según las características del problema puntual.

Dentro de los temas estudiados surge una división natural en dos partes: por un lado planteamos el estudio de las propiedades de una cantidad de información, independientemente del sistema, y por el otro utilizamos diversas medidas de información para obtener resultados específicos al problema de interés.

En la primer parte encontramos que un enfoque puramente teórico al problema planteado, sin utilizar modelos simples o de juguete, es virtualmente imposible. El estudio de estos modelos fue lo que nos permitió ver que la propuesta original (la entropía de von Neumann de la superposición de estados degenerados como función convexa del parámetro de superposición) no era correcta: encontramos que esta función, aunque sí posee curvatura definida, puede ser cóncava

o convexa. Encontramos también cuáles son los factores que entran en juego para definir dicha curvatura, representados por los espacios  $V_0$  y  $V_1$  en este trabajo, y a partir de esto logramos definir cantidades que los tuvieran en cuenta: las entropías *Not-Shared* y *Remaining*.

A partir de esto, formulamos un criterio sobre la cantidad de entrelazamiento presente en la superposición de estados degenerados de un sistema en función del parámetro de superposición. Este criterio plantea como condición necesaria que dichos estados sean además autoestados de alguna dirección del momento angular total, con autovalores opuestos ( $m$  y  $-m$ ). En el caso de funciones de Laguerre-Gauss para un fotón, encontramos sin embargo que el criterio funciona en casos donde esta condición no se cumple. Creemos necesario, por lo tanto, intentar expandir este criterio, relajando las condiciones en su formulación para explorar la posibilidad de tener un resultado mas general.

Una extensión interesante al estudio del criterio propuesto, y las entropías definidas, es aplicar el mismo a sistemas compuestos por cadenas de spin. Las ventajas de estudiar este sistema es que es un sistema de muchos cuerpos con solución exacta, de gran interés en la comunidad. Por otro lado, las dificultades que presentan tienen que ver con la elección para la bipartición del sistema -al ser un sistema de muchos cuerpos las posibilidades son numerosas-, y con la dificultad de obtener estados excitados del sistema -la mayor parte de estudios se concentran en el estado fundamental-. Sería interesante también estudiar casos en que la cantidad conservada no sea el momento angular, sino considerar sistemas con otras simetrías y ver si la predicción del criterio es correcta en esos casos.

La segunda parte del trabajo presentado se basa, como dijimos, en el estudio de distintas cantidades de información para detectar y/o caracterizar distintas fenomenologías en sistemas compuestos por nanoestructuras semiconductoras. Para ello utilizamos en método  $k.p$  que permite obtener de manera precisa la estructura de bandas de distintos materiales semiconductores. Como mencionamos en el Capítulo 4, este método surge de aplicar teoría de perturbaciones a la ecuación de Schrödinger, utilizando las funciones de Bloch como base para el Hamiltoniano sin perturbar. El orden de las perturbaciones, al rededor de qué valor de  $\mathbf{k}$  se realizan (los Hamiltonianos con que trabajamos son válidos cerca del punto  $\Gamma$ , para  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , pero no es la única opción posible), y cuántas y cuáles bandas se utilizan para escribir el Hamiltoniano  $k.p$ , dan lugar a una gran variedad de Hamiltonianos que pueden, en principio, describir el mismo sistema.

En el estudio de ligadura de resonancias en puntos cuánticos encontramos que el estudio de este problema con el método  $k.p$  permite una descripción mas completa del fenómeno, comparando con los resultados obtenidos utilizando la AME. Los parámetros del nanohilo y del potencial aplicado estudiados representan solo un rango de posibilidades. La elección de estos parámetros estuvo motivada por una comparación lo mas cercana posible de los resultados obtenidos por medio de la AME en un sistema similar. Los resultados obtenidos para el punto cuántico generado a partir de un potencial electrostático muestra la presencia de este fenómeno y la facilidad de detectarlo por medio de la probabilidad de localización. A partir de esto, explorar el fenómeno en sistemas de diferentes dimensiones o materiales, o para distintas intensidades requeridas de los campos externos, es directo.

El caso del punto cuántico generado a partir de la combinación de distintos materiales en una heteroestructura semiconductor es de especial interés. Si bien estos sistemas representan, por el momento, gran dificultad en su fabricación, el estudio de este caso reafirma la confiabilidad de los métodos implementados. Como vimos, generamos una estructura que presente un perfil de energías en las bandas de conducción que simule el potencial electrostático del primer modelo estudiado. Los resultados obtenidos de estas dos maneras son asombrosamente similares: esto significa que el método  $k.p$  y los cálculos realizados a partir del mismo logran describir de manera adecuada la estructura de bandas en sistemas de dimensiones en los nanómetros, con diferencias de energía en el rango de los eV.

El Hamiltoniano de Luttinger-Kohn utilizado para describir los nanohilos semiconductores con puntos cuánticos embebidos incluye, en su base, las componentes de spin de los estados. Esto permite identificar la polarización de distintos estados, de ser una cantidad definida, y caracterizar de forma más correcta el efecto del campo magnético en los estados del sistema. Un resultado importante que se obtiene a partir del método utilizado, es el efecto de la polarización de los estados para poder hacer la transición de estado ligado a resonancia, o viceversa, en función del campo magnético.

El último sistema presentado, los pozos cuánticos semiconductores compuestos por HgTe/CdTe, siguen siendo objeto de numerosos estudios debido al interés por caracterizar los estados helicoidales de borde, estados topológicamente protegidos que son resultado de la inversión de bandas presentes en este sistema en determinadas configuraciones. Para estudiar estos estados es necesario obtener la estructura de bandas de un sistema bidimensional, lo cual como vimos es una tarea computacionalmente muy exigente, y que lleva a la pérdida de precisión de los resultados obtenidos. El tratamiento del problema mediante un Hamiltoniano efectivo, que implica escribir los estados del sistema a partir de la diagonalización de un Hamiltoniano en  $z$ , el Hamiltoniano de Kane, o otro en la dirección  $y$ , el Hamiltoniano efectivos, brinda una alternativa a este problema que permite obtener los estados del mismo de manera realista. Sin embargo, este tratamiento elimina la posibilidad de tratar al sistema como un sistema bipartito, donde cada una de las partes son distintos grados de libertad de las bandas involucradas, como describimos en el Apéndice E. Es decir, obtener soluciones que representen a los estados del sistema dificulta su estudio por medio de medidas de información. Consideramos necesario, para lograr una caracterización más efectiva de los estados de borde del QSHE, continuar el estudio sobre la posibilidad de resolver el Hamiltoniano de Kane bidimensional de manera económica y confiable.

En el estudio de los estados de borde de este sistema consideramos cantidades propuestas en otros trabajos para el estudio de estados topológicos, como la entropía de espacio real o la información mutua. Encontramos que, si bien estas cantidades aportan información sobre los estados helicoidales, no permiten diferenciarlos de manera efectiva del resto de los estados del sistema. En búsqueda de una cantidad que logre separar estos estados del resto, definimos distintas cantidades que expusieran los distintos grados de libertad que caracterizan a las autofunciones obtenidas con el método  $k.p$ . Encontramos así la entropía  $S^{edge}$ , cantidad que contempla explícitamente solo a las soluciones del Hamiltoniano efectivo. Esta cantidad se define como una entropía de von Neumann pero en vez de involucrar a los autovalores de una matriz densidad reducida, se calcula sobre el módulo cuadrado de los coeficientes variacionales de los autoestados del sistema. Como se puede apreciar en nuestros resultados, esta cantidad separa efectivamente a los estados helicoidales del resto de los estados del sistema.

Como nota final, vale remarcar la ventaja que representa trabajar con medidas de información al estudiar aproximaciones numéricas de los estados de un sistema. Cuando el espectro de un sistema se obtiene en forma numérica, en particular utilizando métodos variacionales, la información que brinda el mismo no es siempre clara. Por ejemplo, en el espectro cerca de la región donde un estado ligado entra al continuo de energías siempre se va a observar una serie de cruces evitados. Sin embargo, observando el espectro de cualquier sistema podemos suponer que la presencia de cruces evitados implica la presencia de resonancias del sistema, pero esto podría no ser así, sino que esos cruces evitados pueden ser también resultado de cómo se obtiene un espectro variacional. En todo caso, para tener certezas sobre las características del estado del sistema, estudiar cantidades de información ayuda a clarificar cosas que el espectro no resuelve por sí mismas.



# Apéndice A

## Método variacional de Rayleigh-Ritz

Cuando nos enfrentamos al problema de encontrar los estados y el espectro de un dado Hamiltoniano, una herramienta ampliamente utilizada, que aporta soluciones con gran precisión en una multiplicidad de casos, es el **método variacional de Rayleigh-Ritz**.

En general, puede implementarse para resolver el problema de autovalores para cualquier Hamiltoniano, sin embargo hay que tener en cuenta que en determinados sistemas las soluciones obtenidas pueden no representar correctamente el espectro o los estados del sistema debido a la complejidad del Hamiltoniano y/o los estados del sistema.

Para ilustrar el método, consideremos un Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  que actúa en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  de dimensión  $M$ . Si tenemos un conjunto de  $N$  funciones linealmente independientes,  $\varphi_i$ , tal que  $2 \leq N \leq M$ , podemos tomar una combinación lineal de las mismas

$$\phi_c = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i, \quad (\text{A.1})$$

donde  $c_i$  son coeficientes complejos a ser determinados por el método, que hacen que la función  $\phi$  sea autofunción del Hamiltoniano  $\mathbf{H}$ .

Consideremos además al vector  $\mathbf{c}$ , cuyos elementos son los coeficientes  $c_i$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

El valor de expectación del Hamiltoniano asociado al vector  $\mathbf{c}$  será

$$E(\mathbf{c}) = \frac{\langle \phi_c | \mathbf{H} | \phi_c \rangle}{\langle \phi_c | \phi_c \rangle}. \quad (\text{A.3})$$

Si buscamos el estado estacionario de menor energía del sistema, lo que propone este método es encontrar condiciones sobre los coeficientes  $c_i$  tal que  $E(\mathbf{c})$  sea estacionaria. Para ello debemos pedir

$$\frac{\partial E}{\partial c_i}(\mathbf{c}) = \frac{\partial E}{\partial c_i^*}(\mathbf{c}) = 0, \quad (\text{A.4})$$

donde  $c_i^*$  es el transpuesto complejo conjugado de  $c_i$ .

Para profundizar en lo que esta condición implica, desarrollemos la ecuación A.3. Tenemos

$$\langle \phi_c | \mathbf{H} | \phi_c \rangle = \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i c_j \langle \varphi_i | \mathbf{H} | \varphi_j \rangle = \mathbf{c}^* \hat{\mathbf{H}} \mathbf{c}, \quad (\text{A.5})$$

y

$$\langle \phi_c | \phi_c \rangle = \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i c_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \mathbf{c}^* \mathbf{S} \mathbf{c}, \quad (\text{A.6})$$

donde definimos las matrices autoadjuntas  $N \times N$

$$\hat{\mathbf{H}}_{i,j} = \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{S}_{i,j} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle. \quad (\text{A.8})$$

Combinando las Ecuaciones A.3-A.6 se deriva que los mínimos de  $E(\mathbf{c})$  se encuentran para valores  $\epsilon$  tales que

$$\mathbf{H} \mathbf{c} = \epsilon \mathbf{S} \mathbf{c}. \quad (\text{A.9})$$

Estos autovalores  $\epsilon$  no son otra cosa que los autovalores de la restricción del Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  a un subespacio  $N$ -dimensional, donde  $\hat{\mathbf{H}}$  es generado por el conjunto de funciones  $\varphi_i$ .

Con respecto a la precisión de las soluciones así obtenidas, consideremos las energías -exactas- del sistema,  $\bar{E}_n$  con  $n = 1, 2, \dots, M$ , y las ordenemos en orden no creciente:  $\bar{E}_1 \leq \bar{E}_2 \leq \dots \leq \bar{E}_M$ . Haciendo lo mismo con las soluciones de la Ecuación A.9,  $\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \dots \leq \epsilon_N$ , se cumple

$$\epsilon_1 \geq \bar{E}_1, \quad \epsilon_2 \geq \bar{E}_2, \quad \dots, \quad \epsilon_N \geq \bar{E}_N, \quad (\text{A.10})$$

y que los autovectores de la Ecuación A.9, una vez normalizados de ser necesario, son aproximaciones a las primeras  $N$  autofunciones del sistema. Esta última afirmación será cierta siempre que los autovalores variacionales no acoten a los autovalores de mayor energía a la correspondiente, es decir, si se cumple  $E_i \leq \epsilon_i \leq E_{i+1}$ .

En general, para un tamaño *grande* de la base variacional, esta condición se cumple para alguna cantidad de estados de menor energía. Cuán grande debe ser la base variacional depende tanto de las características del problema, como de la elección de la base. Si bien es cierto que mientras mayor sea la dimensión de este subespacio, mejor sera la aproximación lograda, la solución obtenida será una buena aproximación a la solución exacta siempre que la elección de las funciones  $\varphi_i$  respete las simetrías del problema.

## ALGUNAS CONSIDERACIONES

El objetivo de este método es encontrar autoestados y energías aproximadas para los estados ligados de un sistema. Por lo tanto, su uso para describir estos estados, asumiendo que el método converge para un tamaño de la base variacional razonable, es altamente confiable.

Con respecto al continuo de energías de los sistemas bajo estudio, este método describe adecuadamente tanto las energías como los estados que se encuentran cerca del gap de energía entre las bandas de un sistema. En particular, se ha aplicado con éxito en el estudio de la estructura de bandas de nanoestructuras semiconductoras modelo que se describen mediante un Hamiltoniano *k.p.* En estos sistemas, se ha encontrado que los resultados describen correctamente la física cerca de la parte inferior de la banda de conducción y la parte superior de la banda de valencia. Este enfoque ha sido explotado en las Referencias [75] y [80] en el contexto de

los nanohilos semiconductores, en las Referencias [15] y [112] en el contexto del cálculo de los tiempos de vida media de las resonancias de forma, y en la Referencia [78] para obtener estados helicoidales realistas en pozos cuánticos , sistemas abordamos en nuestro trabajo.



## Apéndice B

# Cálculos analíticos para dos osciladores armónicos

En este Apéndice se presentan algunas cuentas involucradas en la obtención de la matriz densidad reducida para dos osciladores armónicos interactuantes, donde los subsistemas son las dos partículas que componen el sistema. Las cuentas presentadas buscan clarificar el procedimiento a realizar para el estudio del criterio propuesto en el Capítulo 3, y justificar el uso de autofunciones variacionales en un sistema de solución exacta.

### AUTOFUNCIONES DEL HAMILTONIANO

Las soluciones a un oscilador armónico bidimensional en coordenadas cartesianas están dadas por [61]

$$\varphi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi 2^{n_x+n_y} n_x! n_y!}} e^{-\beta^2(x^2+y^2)/2} H_{n_x}(\beta x) H_{n_y}(\beta y) \quad (\text{B.1})$$

donde  $\beta = \sqrt{m\omega}$ ,  $\omega$  es la frecuencia del oscilador y  $H_n(x)$  es el polinomio de Hermite de grado  $n$ , con  $n = 0, 1, 2, \dots$ . La energía correspondiente a cada estado esta dada por  $E_{n_x, n_y} = \omega(n_x + n_y + 1)$ .

Para el Hamiltoniano de la Ecuación 3.16, las funciones de onda en coordenadas centro de masa,  $R_{x,y}$ , y relativa,  $r_{x,y}$ , son de la forma:

$$\begin{aligned} \langle R_x, R_y, r_x, r_y | n, m, l, p \rangle &= \sqrt{\frac{1}{\pi 2^{n+m+1} n! m!}} e^{-(R_x^2 + R_y^2)/4} H_n\left(\frac{R_x}{\sqrt{2}}\right) H_m\left(\frac{R_y}{\sqrt{2}}\right) \\ &\sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{\pi 2^{l+p+1} l! p!}} e^{-(r_x^2 + r_y^2)\sqrt{4\lambda+1}/4} H_l\left(\sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{2}} r_x\right) H_p\left(\sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{2}} r_y\right) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

La energía correspondiente a cada uno de estos estados es  $E_{n,m,l,p} = n+m+1 + \sqrt{4\lambda+1}(l+p+1)$ .

Para particionar el sistema en las dos partículas que lo componen, una vez obtenidas estas soluciones debemos volver a las coordenadas de cada partícula, invirtiendo el cambio de coorde-

nadas de la Ecuación 3.15. Haciendo esto obtenemos las autofunciones normalizadas

$$\begin{aligned} \psi_{n,m,l,p}(x_1, y_1, x_2, y_2) &= \sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{\pi^2 2^{n+m+l+p} n! m! l! p!}} H_n\left(\frac{x_1+x_2}{\sqrt{2}}\right) H_m\left(\frac{y_1+y_2}{\sqrt{2}}\right) \\ &H_l\left(\sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{2}}(x_1-x_2)\right) H_p\left(\sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{2}}(y_1-y_2)\right) \\ &e^{-(x_1^2+y_1^2+x_2^2+y_2^2)(\sqrt{4\lambda+1}+1)/4} e^{-(x_1 x_2 + y_1 y_2)(1-\sqrt{4\lambda+1})/2} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Para trazar sobre las coordenadas de una de las partículas, digamos sobre  $\vec{x}_2$  como planteamos en la Ecuación 3.20, es conveniente escribir estas autofunciones separando lo mas posible las coordenadas involucradas. Esto, además de facilitar la cuenta, permite obtener expresiones mas limpias para luego implementar los cálculos necesarios. Para esto, utilizamos las propiedades de las funciones de Hermite [73]

$$H_n(x) = n! \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m}, \quad (\text{B.4})$$

y

$$(x+y)^n = \sum_{a=0}^n \binom{n}{a} x^{n-a} y^a. \quad (\text{B.5})$$

De esta forma podemos expresar la función en la Ecuación B.3 según

$$\begin{aligned} \psi_{n,m,l,p}(x_1, y_1, x_2, y_2) &= N_{nmlp}(\lambda) \sum_{a=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \sum_{b=0}^{\lfloor m/2 \rfloor} \sum_{c=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} \sum_{d=0}^{\lfloor p/2 \rfloor} \sum_{s=0}^{n-2a} \sum_{t=0}^{m-2b} \sum_{v=0}^{l-2c} \sum_{w=0}^{p-2d} \chi_{nmlp}(\lambda) \\ &x_1^{n-2a-s+l-2c-v} y_1^{m-2b-t+p-2d-w} x_2^s y_2^{t+w} \\ &e^{-(x_1^2+y_1^2+x_2^2+y_2^2)(\sqrt{4\lambda+1}+1)/4} e^{-(x_1 x_2 + y_1 y_2)(1-\sqrt{4\lambda+1})/2} \end{aligned}$$

donde

$$N_{nmlp}(\lambda) = \sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}}{\pi^2 2^{n+m+l+p} n! m! l! p!}}, \quad (\text{B.6})$$

y

$$\begin{aligned} \chi_{nmlp}(\lambda) &= \binom{n-2a}{s} \binom{m-2b}{t} \binom{l-2c}{v} \binom{p-2d}{w} \sqrt{2}^{n-2a+m-2b+l-2c+p-2d} \\ &\frac{(-1)^{a+b+c+d+v+w} (4\lambda+1)^{(l-2c+p-2d)/4}}{a! b! c! d! (n-2a)! (m-2b)! (l-2c)! (p-2d)!}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

La expresión obtenida para las autofunciones  $\psi_{n,m,l,p}(x_1, y_1, x_2, y_2)$ , si bien es mas manejable en términos de separación de variables que la expresión en la Ecuación B.3, involucra ocho sumas anidadas. Esto representa un problema a la hora de computar una expresión matricial de la matriz densidad reducida que tendrá, en principio, el doble de sumatorias. Una solución a este problema es la de obtener los elementos de la matriz de  $\psi_{n,m,l,p}$  en una base de funciones de una partícula en una coordenada,  $\phi_i(z)$ , donde  $z$  indica las coordenadas  $x$  o  $y$  de la partícula.

Consideremos entonces este otro problema: en primer lugar obtenemos la matriz  $\mathbf{K}$ , cuyos elementos están dados por

$$K_{i_1, j_1, i_2, j_2}^{n, m, l, p} = \int dx_1 dy_1 dx'_1 dy'_1 \phi_{i_1}(x_1) \phi_{j_1}(y_1) \psi_{n,m,l,p}(x_1, y_1, x'_1, y'_1) \phi_{i_2}(x'_1) \phi_{j_2}(y'_1), \quad (\text{B.8})$$

y resolvemos el problema de autovalores

$$\mathbf{K}\mathbf{u}_i = k_i^A \mathbf{u}_i, \quad (\text{B.9})$$

Como las funciones  $\psi_{n,m,l,p}$  son simétricas ante intercambio de partículas los autovalores de la matriz densidad reducida (obtenida a partir de  $\psi$ ) están relacionados con los autovalores de  $\mathbf{K}$  mediante la relación [113], [114]

$$\lambda_i^A = (k_i^A)^2. \quad (\text{B.10})$$

donde  $\lambda_i^A$  son los autovalores de la matriz densidad reducida  $\rho_{A_\alpha}$ .

La base a utilizar para obtener la matriz  $\mathbf{K}$  es arbitraria, pero si tenemos en cuenta que las autofunciones del Hamiltoniano están escritas en la base de las funciones de Hermite y funciones exponenciales, es natural utilizar las funciones

$$\phi_i(z) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^i i!}} e^{-z^2/2} H_i(z). \quad (\text{B.11})$$

## AUTOFUNCIONES DEL HAMILTONIANO Y DE $L_z$

Las funciones  $\psi_{n,m,l,p}(x_1, x_2, y_1, y_2)$ , si bien son autofunciones del Hamiltoniano, no lo son del momento angular en la dirección  $z$  ( $L_z$ ), requisito planteado en la formulación del criterio. Para obtener autofunciones del Hamiltoniano que sean a su vez autofunciones de  $L_z$ , es necesario realizar una combinación lineal determinada de las autofunciones del Hamiltoniano.

Para el caso de un oscilador armónico bidimensional de una partícula, esta combinación está dada por

$$|n, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!(n+|m|)!2^{(2n+|m|)/2}}} \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^{n+|m|} \binom{n}{j} \binom{n+|m|}{k} i^{\text{sgn}(m)(k-j)} \sqrt{(2n+|m|-j-k)!(j+k)!2n+|m|-j-k, j+k} \quad (\text{B.12})$$

donde  $|n, m\rangle$  son las autofunciones de la Ecuación B.1 y la función  $\text{sgn}(m)$  esta dada por

$$\text{sgn}(m) = \begin{cases} 1 & \text{si } m \geq 0 \\ -1 & \text{si } m < 0. \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

Estas funciones son autofunciones del Hamiltoniano con autovalor  $(2n+|m|+1)\omega = (n_x + n_y + 1)\omega$  y de  $L_z$  con autovalor  $im$ .

Como estamos trabajando con dos osciladores armónicos independientes, las autofunciones que buscamos son de la forma:

$$\varphi_{n,m,l,p} = \frac{1}{\sqrt{n!(n+|m|)!l!(l+|p|)!2^{(2n+|m|+2l+|p|)/2}}} \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^{n+|m|} \sum_{h=0}^l \sum_{i=0}^{l+|p|} \binom{n}{j} \binom{n+|m|}{k} \binom{l}{h} \binom{l+|p|}{i} i^{\text{sgn}(m)(k-j)+\text{sgn}(p)(i-h)} \sqrt{(2n+|m|-j-k)!(j+k)!(2l+|p|-h-i)!(h+i)!} \psi_{2n+|m|-j-k, j+k, 2l+|p|-h-i, h+i} \quad (\text{B.14})$$

Estas funciones de dos partículas son autofunciones del Hamiltoniano con autovalor

$$\begin{aligned} E &= (2n + |m| + 1)\omega_1 + (2l + |p| + 1)\omega_2 \\ &= 2n + |m| + 1 + (2l + |p| + 1)\sqrt{4\lambda + 1} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

y de  $L_z$  con autovalor  $i(m + p)$ .

Para simplificar la notación, describiremos el procedimiento para obtener los autovalores de  $\rho_A(\vec{x}_1, \vec{x}'_1)$  utilizando las funciones  $\psi_{n,m,l,p}$ , pero a la hora de implementar estos cálculos deben usarse las funciones  $\varphi_{n,m,l,p}$ . Las cuentas involucradas son las mismas, y al estar trabajando con la matriz  $\mathbf{K}$  el resultado será una combinación lineal de los resultados aquí presentados, dada por la Ecuación B.14.

Un detalle importante a tener en cuenta es que no es posible calcular los elementos de matriz para un valor arbitrario del parámetro de interacción  $\lambda$ , y luego tomar  $\lambda = 0$  para obtener el caso no interactuante, ya que aparecen indeterminaciones del tipo  $0^0$ . Por este motivo, es necesario calcular los dos casos por separado, como veremos a continuación.

### ELEMENTOS DE MATRIZ: OSCILADORES NO INTERACTUANTES

Las soluciones al Hamiltoniano para el sistema no interactuante se obtienen a partir de la Ecuación B.6, tomando  $\lambda = 0$ . De esta manera, obtenemos las funciones

$$\begin{aligned} \psi_{n,m,l,p}(x_1, y_1, x_2, y_2) &= N_{nmlp}(0) \sum_{a=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \sum_{b=0}^{\lfloor m/2 \rfloor} \sum_{c=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} \sum_{d=0}^{\lfloor p/2 \rfloor} \sum_{s=0}^{n-2a} \sum_{t=0}^{m-2b} \sum_{v=0}^{l-2c} \sum_{w=0}^{p-2d} \chi_{nmlp}(0) \\ &\quad x_2^{n-2a-s+l-2c-v} y_1^{m-2b-t+p-2d-w} x_1^{s+v} y_2^{t+w} e^{-(x_1^2+y_1^2+x_2^2+y_2^2)/2} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Los elementos de matriz para esta función, en la base de la Ecuación B.11, se obtienen calculando

$$\begin{aligned} K_{i_1, j_1, i_2, j_2} &= N_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K \sum_{a=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \sum_{b=0}^{\lfloor m/2 \rfloor} \sum_{c=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} \sum_{d=0}^{\lfloor p/2 \rfloor} \sum_{s=0}^{n-2a} \sum_{t=0}^{m-2b} \sum_{v=0}^{l-2c} \sum_{w=0}^{p-2d} \sum_{q=0}^{\lfloor i_1/2 \rfloor} \sum_{z=0}^{\lfloor j_1/2 \rfloor} \sum_{g=0}^{\lfloor i_2/2 \rfloor} \sum_{e=0}^{\lfloor j_2/2 \rfloor} \\ &\quad \chi_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K \int_{-\infty}^{\infty} x_2^{s+v+i_2-2g} e^{-x_2^2} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} y_2^{t+w+j_2-2e} e^{-y_2^2} dy_2 \\ &\quad \int_{-\infty}^{\infty} x_1^{n-2a-s+l-2c-v+i_1-2q} e^{-x_1^2} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} y_1^{m-2b-t+p-2d-w+j_1-2z} e^{-y_1^2} dy_1 \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

donde se utilizó la propiedad de la Ecuación B.4 para expresar las funciones de la base variacional. Los coeficientes involucrados están dados por

$$N_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K = \sqrt{\frac{n!m!l!p!i_1!j_1!i_2!j_2!}{\pi^4 2^{n+m+l+p+i_1+j_1+i_2+j_2}}}, \quad (\text{B.18})$$

y

$$\begin{aligned} \chi_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K &= \binom{n-2a}{s} \binom{m-2b}{t} \binom{l-2c}{v} \binom{p-2d}{w} \frac{(-1)^{a+b+c+d+v+w+q+z+g+e}}{a!b!c!d!} \\ &\quad \frac{\sqrt{2}^{n-2a+m-2b+l-2c+p-2d} 2^{i_1-2q+j_1-2z+i_2-2g+j_2-2e}}{(n-2a)!(m-2b)!(l-2c)!(p-2d)!(i_1-2q)!(j_1-2z)!(i_2-2g)!(j_2-2e)!} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

La solución general de las integrales involucradas está dada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^n dx = \frac{1}{2}(1 + (-1)^n)\Gamma\left(\frac{1+n}{2}\right). \quad (\text{B.20})$$

Ahora si, contamos con una expresión exacta de los elementos de matriz de  $\mathbf{K}$  para el caso no interactuante, que nos permite obtener los autovalores exactos de  $\rho_{A_\alpha}$  de una manera mas eficaz, computacionalmente hablando.

### ELEMENTOS DE MATRIZ: OSCILADORES INTERACTUANTES

En el caso de partículas interactuantes, debemos partir nuevamente de las funciones en la Ecuación B.6, pero ahora para algún valor arbitrario de  $\lambda$ . Los pasos que llevan a la matriz  $\mathbf{K}$  a partir de estas funciones son los descriptos para el caso no interactuante. La dificultad que presenta este caso es que no es posible integrar en  $\vec{x}_1$  y  $\vec{x}_2$  simultáneamente, por lo que primero se debe integrar en, por ejemplo,  $\vec{x}_1$ , y luego se integra el resultado obtenido en  $\vec{x}_1$ . Si utilizamos la misma base para obtener  $\mathbf{K}$  que en el caso  $\lambda = 0$  (Ecuación B.11), las integrales involucradas son de la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-px^2+2qx} dx = n!e^{q^2/p} \sqrt{\frac{\pi}{p}} \left(\frac{q}{p}\right)^n \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{1}{(n-2k)!k!} \left(\frac{p}{4q^2}\right)^k \quad (\text{B.21})$$

Los elementos de matriz de la función de onda interactuante son de la forma

$$K_{i_1, j_1, i_2, j_2} = N_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K \sum_{a=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \sum_{b=0}^{\lfloor m/2 \rfloor} \sum_{c=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} \sum_{d=0}^{\lfloor p/2 \rfloor} \sum_{s=0}^{n-2a} \sum_{t=0}^{m-2b} \sum_{v=0}^{l-2c} \sum_{w=0}^{p-2d} \sum_{q=0}^{\lfloor i_1/2 \rfloor} \sum_{z=0}^{\lfloor j_1/2 \rfloor} \sum_{g=0}^{\lfloor i_2/2 \rfloor} \sum_{e=0}^{\lfloor j_2/2 \rfloor} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-2a-s+l-2c-v+i_1-2q)/2 \rfloor} \sum_{f=0}^{\lfloor (m-2b-t+p-2d-w+j_1-2z)/2 \rfloor} \chi_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K \quad (\text{B.22})$$

donde

$$N_{nmlp; i_1 i_2 j_1 j_2}^K = \sqrt{\frac{\sqrt{4\lambda+1}n!m!l!p!i_1!j_1!i_2!j_2!}{2^{n+m+l+p+i_1+j_1+i_2+j_2}}} \frac{1}{\pi(3+\sqrt{4\lambda+1})} \quad (\text{B.23})$$

$$\begin{aligned}
\chi_{nmlp;i_1 i_2 j_1 j_2}^K &= \binom{n-2a}{s} \binom{m-2b}{t} \binom{l-2c}{v} \binom{p-2d}{w} \frac{(-1)^{a+b+c+d+v+w+q+z+g+e}}{a!b!c!d!q!z!g!e!s} \\
&\quad \frac{\sqrt{2}^{n-2a+m-2b+l-2c+p-2d} 2^{i_1-2q+j_1-2z+i_2-2g+j_2-2e}}{(n-2a)!(m-2b)!(l-2c)!(p-2d)!(i_1-2q)!(j_1-2z)!(i_2-2g)!(j_2-2e)!} \\
&\quad (n-2a-s+l-2c-v+i_1-2q)!(m-2b-t+p-2d-w+j_1-2z)! \\
&\quad (4\lambda+1)^{(l-2c+p-2d)/4} \frac{(1+(-1)^{i_2-2g+n-2a+l-2c+i-2q-2k})}{(n-2a-s+l-2c-v+i_1-2q-2k)!k!} \\
&\quad \frac{(1+(-1)^{j_2-2e+m-2b+p-2d+j_1-2z-2f})}{f!(m-2b-t+p-2d-w+j_1-2z-2f)!} \\
&\quad \left( \frac{2(1+\sqrt{4\lambda+1})}{3+\sqrt{4\lambda+1}} \right)^{1-(i_2-2g+n-2a+l-2c+i_1-2q-2k+j_2-2e+m-2b+p-2d+j_1-2z-2f)/2} \\
&\quad \left( \frac{-1+\sqrt{4\lambda+1}}{3+\sqrt{4\lambda+1}} \right)^{n-2a-s+l-2c-v+i_1-2q+m-2b-t+p-2d-w+j_1-2z} \\
&\quad \left( \frac{3+\sqrt{4\lambda+1}}{(-1+\sqrt{4\lambda+1})^2} \right)^{k+f} \Gamma\left(\frac{1+j_2-2e+m-2b+p-2d+j_1-2z-2f}{2}\right) \\
&\quad \Gamma\left(\frac{1+i_2-2g+n-2a+l-2c+i-2q-2k}{2}\right) \tag{B.24}
\end{aligned}$$

Como adelantamos en el Capítulo 3, si bien hemos logrado obtener una expresión exacta para los elementos de matriz de  $\mathbf{K}$  en el caso  $\lambda \neq 0$ , lo cual nos brinda autovalores exactos para  $\rho_{A,\alpha}$ , el cómputo de las cantidades involucradas en las Ecuaciones B.22, B.23 y B.24 es altamente demandante. No solo cada elemento de matriz involucra 14 sumas anidadas, sino que además los coeficientes  $\chi_{nmlp;i_1 i_2 j_1 j_2}^K$  contienen una gran cantidad de factoriales. Esto implica que, para obtener soluciones precisas, deben implementarse códigos de alta precisión numérica, lo cual torna muy pesado los cálculos numéricos.

Por este motivo, para las soluciones del sistema interactuante se utilizaron autofunciones variacionales obtenidas aplicando el método de Rayleigh-Ritz al Hamiltoniano del sistema, utilizando como base variacional el producto de dos autofunciones de un oscilador armónico unidimensional.

Vale la pena mencionar que muchos de los cálculos involucrados en este trabajo requieren de la implementación de códigos con alta precisión, para los cuales utilizamos la herramienta *mp fortran*. En particular, el sistema de osciladores no interactuantes también presenta un alto número de factoriales, pero el tiempo de cálculo en este caso no era elevado debido a la *simplicidad* de las autofunciones.

## Apéndice C

# Cálculos analíticos para el modelo Spherium

El modelo Spherium considera dos electrones que interactúan Coulombianamente entre sí sobre superficie de una esfera (D+1)-dimensional. En el caso  $D = 2$ , por ejemplo, tenemos que los electrones están en el cascaron de una esfera de radio  $R$  en  $R^3$ . El Hamiltoniano de este sistema, en unidades atómicas, está dado por:

$$H = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{C.1})$$

donde  $\nabla_i^2$  es el laplaciano con respecto a las coordenadas de la partícula  $i$  y  $r_{12}$  es la distancia entre las dos partículas.

La acción del Laplaciano sobre una función que puede escribirse como producto de una función en coordenadas radiales y otra función en coordenadas angulares,  $\psi = f(r_1, r_2, r_{12})\Omega_{l_1, l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)$ , puede descomponerse en tres términos según

$$\begin{aligned} \nabla_i^2 f(r_1, r_2, r_{12})\Omega_{l_1, l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) &= \{\mathcal{X}_i f(r_1, r_2, r_{12})\}\Omega_{l_1, l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \\ &\quad - f(r_1, r_2, r_{12})\frac{\hat{l}_i^2}{r_i^2}\Omega_{l_1, l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \\ &\quad + \left[(-2)\frac{r_i}{r_i r_{12}}\frac{\partial f(r_1, r_2, r_{12})}{\partial r_{12}}\right]\{\Lambda_i \Omega_{l_1, l_2}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)\}, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

donde  $\hat{i} = 1 + (i \bmod 2)$ , y la notación  $\{\mathcal{O}f\}$ g indica que el operador  $\mathcal{O}$  actúa únicamente sobre la función  $f$ . Los operadores  $\mathcal{X}$  y  $\Lambda$  involucrados en el Laplaciano están dados por

$$\mathcal{X}_i \equiv \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{2}{r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} + \frac{r_i^2 - r_i^2 + r_{12}^2}{r_i r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_{12}} \quad (\text{C.3})$$

y

$$\Lambda_i \equiv \frac{1}{\cos(\theta_i)} \sqrt{\frac{2\pi}{3}} [(Y_{-1}^1(\hat{r}_i)\hat{l}_i^+ + Y_{+1}^1(\hat{r}_i)\hat{l}_i^-) - \cos(\vartheta_{12})((Y_{+1}^1(\hat{r}_i)\hat{l}_i^- + Y_{-1}^1(\hat{r}_i)\hat{l}_i^+)], \quad (\text{C.4})$$

donde  $\hat{l}_i^+$ ,  $\hat{l}_i^-$  son los operadores *ladder* de la partícula  $i$ ,  $Y_m^l$  son los armónicos esféricos,  $\cos\vartheta_{12} = (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2)/(2r_1 r_2)$  y  $\theta_i$  es el ángulo polar de la partícula  $i$ .

Teniendo en cuenta el momento angular de los dos electrones,  $l_1$  y  $l_2$ , tenemos que el momento angular del sistema esta descrito por los numeros cuanticos  $L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$  y  $M = -L, \dots, L$ . Para estos números cuánticos, la parte angular de la función  $\psi$  puede tomarse como

$$\Omega_{l_1, l_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = (-1)^{l_1 + l_2 + M} \sqrt{2L + 1} \sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} Y_{m_1}^{l_1}(\hat{r}_1) Y_{m_2}^{l_2}(\hat{r}_2). \quad (\text{C.5})$$

Estas funciones describen un par de partículas con números cuánticos  $L, M$  definidos, y paridad  $\pi = (-1)^{l_1 + l_2}$ . Utilizando estas funciones se puede ver que la expresión de la Ecuación C.2 se reduce a [70]

$$\Delta_i f(r_1, r_2, r_{12}) \Omega_{l_1, l_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = \sum_{\tilde{l}_1 = d_0}^L \{ \hat{X}_i^{\tilde{l}_1, l_i} f(r_1, r_2, r_{12}) \} \Omega_{l_1, l_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2). \quad (\text{C.6})$$

Aquí,  $\hat{X}_i^{\tilde{l}_i, l_i}$  es un operador que depende solo de las coordenadas radiales, y actúa por lo tanto solo en  $f$ , y  $d_0 = L + 1 - d$  donde  $d = L + 1$  y  $d = L$  implica paridad natural y no natural respectivamente. Los operadores  $\hat{X}_i^{\tilde{l}_i, l_i}$  cumplen con la propiedad

$$\hat{X}_2^{\tilde{l}}(r_1, r_2, r_{12}) = \hat{X}_1^{\tilde{l}}(r_2, r_1, r_{12}). \quad (\text{C.7})$$

A partir de los resultados expuestos, y utilizando el anzats

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{l_1 = d_0}^L \phi(r_1, r_2, r_{12}) \Omega_{l_1, l_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \quad (\text{C.8})$$

en la Ecuación C.1, obtenemos una ecuación diferencial para las funciones en coordenadas radiales dada por

$$\sum_{l_1 = d_0}^L \left( -\frac{\hat{X}_1^{\tilde{l}_1, l_1}}{2} - \frac{\hat{X}_2^{\tilde{l}_2, l_2}}{2} \right) \phi_{l_1} + (V - E) \phi_{l_1} = 0. \quad (\text{C.9})$$

Para estados con paridad  $\pi = (-1)^{L+1}$ , esto se traduce a  $L$  ecuaciones acopladas, que pueden escribirse de la siguiente manera:

$$-\frac{1}{2} (\hat{X}_1^{0,0} \phi_0 + \hat{X}_1^{0,1} \phi_1) + \frac{-1}{2} \hat{X}_2^{L,L} \phi_0 = (E - V) \phi_0, \quad (\text{C.10})$$

$$-\frac{1}{2} (\hat{X}_1^{l_1, l_1} \phi_{l_1} + \hat{X}_1^{l_1, l_1+1} \phi_{l_1+1}) + \frac{-1}{2} (\hat{X}_2^{l_2, l_2} \phi_{l_1} + \hat{X}_2^{l_2, l_2+1} \phi_{l_1-1}) = (E - V) \phi_{l_1}, \quad (\text{C.11})$$

$$-\frac{1}{2} \hat{X}_1^{L,L} \phi_L + \frac{-1}{2} (\hat{X}_2^{0,0} \phi_L + \hat{X}_2^{0,1} \phi_{L-1}) = (E - V) \phi_L. \quad (\text{C.12})$$

Los operadores  $\hat{X}_i^{\tilde{l}}$  por su parte toman la forma

$$\begin{aligned} \hat{X}_i^{\tilde{l}_i, l_i} &= \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{2}{r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} \\ &+ \frac{(2 + l_i) r_i^2 + l_i (r_i^2 - r_{12}^2)}{r_i^2 r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} + \frac{r_i^2 - r_i^2 + r_{12}^2}{r_i r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_{12}} - \frac{l_i (l_i + 1)}{r_i^2}, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

cuando  $0 \leq l_i \leq L$  y

$$\hat{X}_i^{\tilde{l}_i-1, l_i} = \frac{-2r_i}{r_i r_{12}} \sqrt{\frac{(L-l_i)(2l_i+1)(L-l_i+1)}{2l_i+3}} \frac{\partial}{\partial r_{12}}, \quad (\text{C.14})$$

para  $1 \leq l_i \leq L$ .

Estas expresiones para  $\hat{X}_i^{\tilde{l}_i, l_i}$  y  $\hat{X}_i^{\tilde{l}_i-1, l_i}$  son validas tanto para el caso de paridad natural ( $\pi = (-1)^L$ ,  $d = L+1$ ,  $d_0 = 0$ ) como para el caso de paridad no natural ( $\pi = (-1)^{L+1}$ ,  $d = L$ ,  $d_0 = 1$ )

## L=2

Consideramos estados con  $L = 2$ , para los casos  $-l_1 = 1$ ,  $l_2 = 2$  ó  $-l_1 = 2$ ,  $l_2 = 1$ .

Las Ecuaciones C.10, C.11 y C.12 se reducen a las Ecuaciones 3.25 y 3.26, y las soluciones a las mismas son las presentadas en la Sección 3.3.2. Las autofunciones del Hamiltoniano pueden escribirse entonces como

$$\Psi_{2,M}(\Omega_1, \Omega_2, r_{12}) = \frac{1}{N_{2,M}} \left( \mathcal{Y}_{1,2}^{2,M}(\Omega_1, \Omega_2) + \mathcal{Y}_{1,2}^{2,M}(\Omega_2, \Omega_1) \right) \left( 1 + \frac{r_{12}}{4} \right). \quad (\text{C.15})$$

Para implementar los cálculos necesarios para testear el criterio, escribimos

$$1 + \frac{r_{12}}{4} = \sum_{k=0}^1 a_k r_{12}^k, \quad (\text{C.16})$$

donde  $a_0 = 1$  y  $a_1 = 1/4$ , para utilizar la fórmula de Perkins [115]

$$r_{12}^k = 4\pi \sum_{l=0}^{L_1^k} \left( \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2) \right) \left( \sum_{t=0}^{L_2^{k,l}} c_{klt} r_{<}^{l+2t} r_{>}^{k-(l+2t)} \right). \quad (\text{C.17})$$

Esta expresión es válida para  $k = -1, 0, 1, \dots$ , y los coeficientes  $L_1^k$  y  $L_2^{k,l}$  involucrados vienen dados por

$$L_1^k = \begin{cases} \frac{k}{2} & \text{si } k \text{ es par} \\ \infty & \text{si } k \text{ es impar} \end{cases}, \quad (\text{C.18})$$

y

$$L_2^{k,l} = \begin{cases} \frac{k}{2} - l & \text{si } k \text{ es par} \\ \frac{k+1}{2} & \text{si } k \text{ es impar} \end{cases}. \quad (\text{C.19})$$

Los coeficientes  $C_{klt}$  estan dados por

$$C_{klt} = \begin{cases} \frac{1}{k+2} \binom{k+2}{2t+1} & \text{if } l=0 \\ \frac{1}{k+2} \binom{k+2}{2t+1} \prod_{\alpha=0}^{\min[l-1, (k+1)/2]} \frac{2t-k+2\alpha}{2t+1+2l-2\alpha} & \text{if } l>0. \end{cases} \quad (\text{C.20})$$

A partir de las ecuaciones C.15 y C.17 es está claro que las funciones de onda del Hamiltoniano pueden escribirse completamente en términos de armónicos esféricos de ambos ángulos sólidos,  $Y_{lm}(\Omega_1)$  y  $Y_{lm}(\Omega_2)$ , ya que para este sistema  $r_{<} = r_{>} = R$ .

Para estados de la forma

$$\Phi = \alpha\Psi_{2,M} + \sqrt{1-\alpha^2}\Psi_{2,-M}, \quad (\text{C.21})$$

la matriz densidad reducida puede expresarse según

$$\begin{aligned} \rho_{A,\alpha} &= \alpha^2 \int \Psi_{2,M}^*(\Omega_1, \Omega_2) \Psi_{2,M}(\Omega'_1, \Omega_2) d\Omega_2 \\ &+ (1-\alpha^2) \int \Psi_{2,-M}^*(\Omega_1, \Omega_2) \Psi_{2,-M}(\Omega'_1, \Omega_2) d\Omega_2 \\ &+ \alpha\sqrt{1-\alpha^2} \left( \int \Psi_{2,M}^*(\Omega_1, \Omega_2) \Psi_{2,-M}(\Omega'_1, \Omega_2) d\Omega_2 \right. \\ &\left. + \int \Psi_{2,-M}^*(\Omega_1, \Omega_2) \Psi_{2,M}(\Omega'_1, \Omega_2) d\Omega_2 \right). \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

Es decir, se deben resolver cuatro integrales cuya solución general es conocida en términos de los coeficientes de Clebsh-Gorndon [73]. A partir de esto, el calculo de los elementos de matriz de  $\rho_{A,\alpha}$

$$\rho_{A,\alpha}^{p,q;p',q'} = \int Y_{pq}^*(\Omega_1) \rho_{A,\alpha}(\Omega_1, \Omega'_1) Y_{p'q'}(\Omega'_1) d\Omega_1 d\Omega'_1 \quad (\text{C.23})$$

con  $p, p' = 0, 1, 2, \dots$ ,  $q = -p, \dots, p$  y  $q' = -p', \dots, p'$ . Los elementos de matriz toman la forma

$$\begin{aligned} \rho_{A,\alpha}^{p,q;p',q'} &= \frac{1}{N_{L,M}N_{L,M'}} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j \sum_{k,k'} a_k a_{k'} \sum_{l,l'} \sum_{m,m'} \sum_{t,t'} c_{k,l,t} c_{k',l',t'} R^{k+k'} \\ &(-1)^{m_{2i}+m_{1i}} \sqrt{\frac{(2l_{2i}+1)(2l_{2j}+1)(2l_{1i}+1)(2l_{1j}+1)(2p'+1)}{2p+1}} \\ &\sum_L C(l_{2j}, m_{2j}; l_{2i}, -m_{2i}; L, m_{2j} - m_{2i}) C(l_{2j}, 0; l_{2i}, 0; L, 0) \\ &C(L, m_{2j} - m_{2i}; l', m'; l, m) C(L, 0; l', 0; l, 0) \\ &C(l, m; l_{1i}, -m_{1i}; p, q) C(l, 0; l_{1i}, 0; p, 0) \\ &C(p', q'; l_{1j}, m_{1j}; l', m') C(p', 0; l_{1j}, 0; l', 0) \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

Este resultado se incluye porque presenta sumatorias sobre  $L$ ,  $l$  y  $l'$  que son, en algunos casos, infinitas. Este *problema* se sortea utilizando la desigualdad triangular de los coeficientes de Clebsh-Gordon, que permite acotar las sumatorias notando que las relaciones

$$L \leq l_{2j} + l_{2i}, \quad l' \leq p' + l_{1j} \quad \text{y} \quad l \leq l_{1j} + l_{2j} + l_{2i} + p', \quad (\text{C.25})$$

deben satisfacerse.

## Apéndice D

# Parámetros y cálculos auxiliares para los Hamiltonianos $k.p$

### D.1. Hamiltoniano de Kane y Hamiltoniano efectivo

PARÁMETROS DE LOS HAMILTONIANOS DE KANE Y EFECTIVO  $4x4$  PARA EL ESTUDIO DE ESTADOS DE BORDE EN POZOS CUÁNTICOS SEMICONDUCTORES

	$E_g(eV)$	$\Delta(eV)$	$E_p(eV)$	$F$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$	$\kappa$
CdTe	1.606	0.91	18.8	-0.09	1.47	-0.28	0.03	-1.31
HgTe	-0.303	1.08	18.8	0	4.1	0.5	1.3	-0.4

Cuadro D.1: Parámetros de CdTe y HgTe para el Hamiltoniano de Kane.[116]

$d(\text{nm})$	$C^{\{1\}}$	$M^{\{1\}}$	$\Delta_{H1H2}^{\{1\}}$	$\Delta_{E1E2}^{\{1\}}$	$B^{\{2\}}$	$D^{\{2\}}$	
7	1.606	0.91	-0.28	0.03	18.8	-0.09	
9	-0.303	1.08	0.5	1.3	18.8	0	
$d(\text{nm})$	$R_1^{\{2\}}$	$R_2^{\{2\}}$	$B_{H2}^{\{2\}}$	$B_{E2}^{\{2\}}$	$A_2^{\{3\}}$	$S_0^{\{3\}}$	$A^{\{3\}}$
7	-1006.74	-43.51	711.25	-29.99	336.13	44.70	1.47
9	-1154.64	-45.28	571.70	-38.94	312.21	57.30	4.1

Cuadro D.2: Parámetros para el Hamiltoniano efectivo 4.30 para pozos cuánticos de  $HgTe - Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$ [77]. Las unidades de los parámetros son: meV para los indicados con índice  $\{1\}$ t,  $\text{meV}\cdot\text{nm}^2$  para los de índice  $\{2\}$ , y  $\text{meV}\cdot\text{nm}$  para los de índice  $\{3\}$ .

## PROPIEDADES DE LAS FUNCIONES B-SPLINES

La base de funciones utilizada para resolver el Hamiltoniano de Kane en la dirección  $z$ , transversal al pozo cuántico, es la de  $B$ -Splines. Este conjunto de funciones esta formada por polinomios de soporte compacto, y fueron propuestas para aproximar funciones arbitrarias.

Para definir estas funciones, denominadas en este trabajo por  $B_n(z)$ , es necesario seleccionar una serie de parámetros según las necesidades que marca el problema. Estos son:

- $k$ : el orden de los polinomios utilizados para generar los B-splines. La elección de  $k$  se da dependiendo la precision que se desee. Valores de  $k$  entre 7 y 10 son suficientes para aproximar funciones analíticas.
- $n\_intervalos$ : cantidad de puntos a utilizar para dividir el dominio en intervalos, teniendo en cuenta los extremos del mismo.
- $break-points$ : Son los puntos generados al fijar  $n\_intervalos$ .
- $knots$ : son los  $break-points$  y su multiplicidad, que define la condición de continuidad de las funciones en cada punto.

Modificando el valor de estos parámetros, de manera consistente, es posible obtener una base variacional que incluya las condiciones de contorno impuestas por el sistema: en el caso de pozos cuánticos, la base de  $B$ -Splines utilizada permite incorporar la discontinuidad de los parámetros del Hamiltoniano en las interfases de manera natural.

Otra ventaja del uso de estas funciones para resolver el Hamiltoniano  $k.p$  de este sistema, es que permite generar una *grilla* en el espacio que se adapte al problema. En la dirección  $z$ , el pozo cuántico se modela como infinito, pero con un espesor de la capa intermedia en la escala de los nanómetros. Mas aún, los estados de interés están localizados en los bordes de la capa intermedia del sistema. Si trabajásemos con algún método de diferencias finitas para resolver el Hamiltoniano, es claro que una grilla igualmente densa en las capas externas e interna sería un gasto computacional innecesario. La forma de tratar con este problema utilizando  $B$ -Splines es definiendo un conjunto base para cada una de las capas, de forma que en las interfases se satisfagan las condiciones de contorno. Haciendo esto, se incorpora una menor cantidad de funciones en las capas externas, y una densidad de funciones mayor en la capa interna. En la Figura D.1 se ve como la densidad de funciones puede modificarse por medio del valor de  $k$  elegido, y cómo las funciones cubren en dominio para aproximar las autofunciones del Hamiltoniano. Un detalle a tener en cuenta es que estas funciones, como se puede apreciar en la Figura D.1, no forman un conjunto ortogonal. Por lo tanto, el problema de autovalores para el Hamiltoniano  $k.p$  (Ecuación 4.38) se convierte en un problema de autovalores generalizado dado por

$$\mathcal{H}_{dxd} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_d \end{pmatrix} = \mathcal{E} \mathcal{S} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_d \end{pmatrix}, \quad (\text{D.1})$$

donde  $\mathcal{S}$  es la matriz de superposición con elementos  $\mathcal{S}_{ij} = \langle B_i(z) | B_j(z) \rangle$ .

## D.2. Hamiltoniano de Luttinger-Kohn

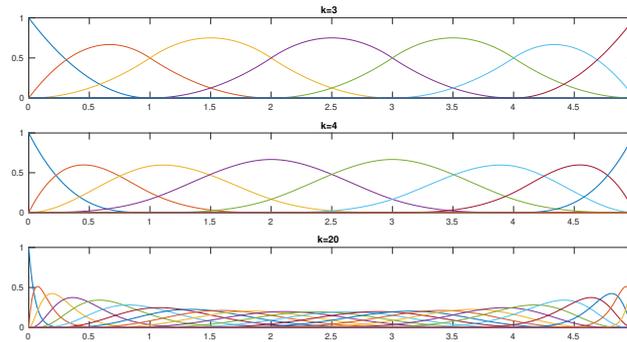


Figura D.1: Base de funciones  $B$ -Splines en el intervalo  $[0,5]$ , para  $n_{intervalos} = 6$ . Panel superior:  $k=3$  (7 funciones). Panel intermedio:  $k=4$  (8 funciones). Panel inferior:  $k=20$  (25 funciones).

### PARÁMETROS DEL HAMILTONIANO LK PARA EL ESTUDIO DE PUNTOS CUÁNTICOS EN NANOHILOS SEMICONDUCTORES

	GaAs	$\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$	$(\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5})_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$
$E_G$ (eV)	1.519	1.9971	2.3321
$E_P$ (eV)	23.81	15.9335	14.1007
$\Delta_{SO}$ (eV)	0.341	0.0898	0.111
$\gamma_1$	7.05	4.6296	4.4296
$\gamma_2$	2.35	1.0562	1.0945
$\gamma_3$	3	1.9997	1.933
$\tilde{\gamma}_1$	1.8251	1.9701	2.4141
$\tilde{\gamma}_2$	-0.2625	-0.2736	0.0868
$\tilde{\gamma}_3$	0.3875	0.67	0.9252

Cuadro D.3: Parámetros de banda, de Lüttinger y de Lüttinger modificados para el Hamiltoniano LK. [75], [117]

	CBO (eV)	VBO (eV)
GaAs/ $\text{Ga}_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$	0.1698	0.3083
GaAs/ $(\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5})_{0,51}\text{In}_{0,49}\text{P}$	0.385	0.4282

Cuadro D.4: Offset entre bandas para las heteroestructuras estudiadas. [75]

### TRATAMIENTO DE PARÁMETROS EN INTERFASES PARA EL HAMILTONIANO LK

A continuación presentamos algunos cálculos auxiliares que ayudan a obtener los elementos matriciales del Hamiltoniano de Luttinger-Kohn. Definiendo al parámetro  $a = a(\rho, z)$  como

cualquiera de los parámetros que intervienen en los elementos de la matriz del Hamiltoniano, podemos expandir algunas de las expresiones dadas en 4.12 obteniendo nuevas expresiones de la forma

$$k_z a k_z = -(\partial_z a) \partial_z - a \partial_z^2, \quad (\text{D.2})$$

$$k_+ a k_- + k_- a k_+ = 2 \left\{ \left( \frac{\rho}{2l_B^2} \right)^2 a - \frac{i}{l_B^2} a \partial_\varphi - (\partial_\rho a) \partial_\rho - a (\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho + \frac{1}{\rho^2} \partial_\varphi^2) \right\}, \quad (\text{D.3})$$

$$\begin{aligned} k_\pm a k_\pm &= e^{\pm 2i\varphi} \left\{ - \left( \frac{\rho}{2l_B^2} \right)^2 a \pm \frac{\rho}{l_B^2} a \partial_\rho + \frac{i}{l_B^2} a \partial_\varphi \right. \\ &\quad \pm (\partial_\rho a) \frac{\rho}{2l_B^2} - (\partial_\rho a) \partial_\rho \mp i (\partial_\rho a) \frac{1}{\rho} \partial_\varphi \\ &\quad \left. - a [\partial_\rho^2 \mp \frac{2i}{\rho^2} \partial_\varphi \pm \frac{2i}{\rho} \partial_\varphi \partial_\rho - \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \frac{1}{\rho^2} \partial_\varphi^2] \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

y

$$\begin{aligned} k_- a k_z + k_z a k_- &= e^{-i\varphi} \left\{ \frac{\rho}{l_B^2} a \partial_z - (\partial_\rho a) \partial_z - 2a \partial_z (\partial_\rho - \frac{i}{\rho} \partial_\varphi) - \right. \\ &\quad \left. (\partial_z a) (\partial_\rho - \frac{i}{\rho} \partial_\varphi + \frac{\rho}{2l_B^2}) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

En estas expresiones, cuando escribimos  $(\partial_i a)$ , entre paréntesis, significa que la única cantidad afectada por la derivada es el parámetro  $a$ , y no las expresiones que le siguen.

Cuando se calculan los elementos de la matriz del Hamiltoniano en una base  $\Phi_\alpha$ , donde  $\alpha$  son los números cuánticos de los estados, es conveniente escribir todos los parámetros dependientes del material como funciones de las coordenadas como:

$$\begin{aligned} a(\rho, z) &= a_n [1 - \theta(\rho - R_c)] [1 - \theta(|z| - z_1)] \\ &\quad + a_r [\theta(|z| - z_1) \{ \theta(|z| - z_2) - \theta(\rho - R_c) \} + \theta(\rho - R_c)] \\ &\quad + a_b [1 - \theta(|z| - z_2)] \theta(|z| - z_1), \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

donde  $a_n$ ,  $a_b$  y  $a_r$  es el valor del parámetro para los materiales del núcleo, las barreras y el resto del nanohilo respectivamente. De esta manera, las integrales implicadas pueden calcularse como

$$\begin{aligned} \langle a \mathcal{O} \rangle &= a_n \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-z_1}^{z_1} dz \int_0^{R_c} \rho d\rho \Phi_\alpha^* \mathcal{O} \Phi_\beta \\ &\quad + a_r \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-z_1}^{z_1} dz \int_{R_c}^R \rho d\rho \Phi_\alpha^* \mathcal{O} \Phi_\beta \\ &\quad + a_r \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-L/2}^{-z_2} dz \int_0^R \rho d\rho \Phi_\alpha^* \mathcal{O} \Phi_\beta \\ &\quad + a_r \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{z_2}^{L/2} dz \int_0^R \rho d\rho \Phi_\alpha^* \mathcal{O} \Phi_\beta \\ &\quad + a_b \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-z_2}^{-z_1} dz \int_0^R \rho d\rho \Phi_\alpha^* \mathcal{O} \Phi_\beta \\ &\quad + a_b \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^R \rho d\rho \Phi_\alpha^* \mathcal{O} \Phi_\beta. \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Aquí  $\mathcal{O}$  es cualquier operador implicado en los elementos matriciales de  $H$ . Obsérvese que si  $a(\rho, z) = cte$ , como en el modelo con un nanohilo de un solo material, o en el elemento matricial  $E_{7-}$ , las integrales anteriores se unen como una única integral sobre todo el volumen, de modo que si tenemos por ejemplo  $\mathcal{O} = \rho^2$  y  $a(\rho, z) = 1/m_0$  la integral será

$$\langle a\rho^2 \rangle = \frac{1}{m_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_0^R \rho d\rho \Phi_\alpha^* \Phi_\beta \rho^2. \quad (\text{D.8})$$

Cuando la derivada de los parámetros discontinuos,  $a(\rho, z)$ , entra en el cálculo de los elementos de la matriz, da lugar a la aparición de deltas de Dirac y funciones Heaviside en las integrales. Teniendo esto en cuenta, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle (\partial_z a) \mathcal{O} \rangle = & a_n \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{R_c} \rho d\rho \left[ \Phi_\alpha^*(\rho, -z_1, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, -z_1, \varphi) - \right. \\ & \left. \Phi_\alpha^*(\rho, z_1, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, z_1, \varphi) \right] \\ & + a_r \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{R_c}^R \rho d\rho \left[ \Phi_\alpha^*(\rho, -z_1, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, -z_1, \varphi) - \right. \\ & \left. \Phi_\alpha^*(\rho, z_1, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, z_1, \varphi) \right] \\ & + (a_b - a_r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \rho d\rho \left[ \Phi_\alpha^*(\rho, -z_2, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, -z_2, \varphi) - \right. \\ & \left. \Phi_\alpha^*(\rho, z_2, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, z_2, \varphi) \right] \\ & - a_b \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \rho d\rho \left[ \Phi_\alpha^*(\rho, -z_1, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, -z_1, \varphi) - \right. \\ & \left. \Phi_\alpha^*(\rho, z_1, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(\rho, z_1, \varphi) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

y

$$\langle (\partial_\rho a) \mathcal{O} \rangle = (a_r - a_n) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-z_1}^{z_1} dz \Phi_\alpha^*(R_c, z, \varphi) \mathcal{O} \Phi_\beta(R_c, z, \varphi) R_c \quad (\text{D.10})$$

A partir de las ecuaciones D.2-D.5 y D.7-D.10, el cálculo de los elementos de la matriz es directo. Para las funciones de la Ecuación 5.2, los valores de los elementos de la matriz pueden obtenerse numéricamente, aunque algunas de las integrales implicadas pueden obtenerse analíticamente utilizando las relaciones de recurrencia de las funciones de Bessel, las propiedades de paridad de las funciones trigonométricas, etc. [73], reduciendo así el error numérico y el tiempo de cálculo.



## Apéndice E

# Bipartición del espacio de Hilbert utilizando la base $k.p$

Como vimos en el Capítulo 4, el Hamiltoniano de Kane presentado en la Sección 4.1.3 está expresado en la base de funciones dada en la Ecuación 4.10. Estas funciones incluyen las simetrías de cada una de las bandas involucradas, a través de las funciones  $s, x, y, z$ , e información sobre el spin de las mismas, a través de los símbolos  $\uparrow, \downarrow$ . Como podemos observar, tenemos una base de 8 elementos, escrita en función de dos bases: una de 4 elementos que denominaremos *de bandas*, y otra de dos elementos que denominaremos *de spin*.

Observando la base utilizada en la Ecuación 4.10, se puede intuir un cambio de base en el Hamiltoniano que permita escribirlo en una base producto, que va a ser combinación lineal de los elementos de esta base. Mas precisamente, renombraremos los elementos de la base del Hamiltoniano de Kane -en el mismo orden que figura en la Ecuación 4.10- según

$$\begin{aligned} u_1 &= s \uparrow \\ u_2 &= s \downarrow \\ u_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \uparrow \\ u_4 &= \frac{1}{\sqrt{6}}[(x + iy) \downarrow - 2Z \uparrow] \\ u_5 &= -\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy) \uparrow + 2Z \downarrow] \\ u_6 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \downarrow \\ u_7 &= \frac{1}{\sqrt{3}}[(x + ix) \downarrow + z \uparrow] \\ u_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}}[(x - iy) \uparrow - z \downarrow] \end{aligned} \tag{E.1}$$

y la reorganicemos definiendo

$$\begin{aligned}
u_1 \rightarrow u_1 &= s \uparrow \\
u_2 \rightarrow u_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \uparrow \\
u_3 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}}(u_5 - \frac{2}{\sqrt{2}}u_8) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \uparrow \\
u_4 \rightarrow \frac{\sqrt{6}}{3}(u_4 - \frac{1}{\sqrt{2}}u_7) &= -z \uparrow \\
u_5 \rightarrow u_2 &= s \downarrow \\
u_6 \rightarrow \frac{1}{3}(u_4 + \frac{2}{\sqrt{2}}u_7) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \downarrow \\
u_7 \rightarrow u_6 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \downarrow \\
u_8 \rightarrow \frac{\sqrt{6}}{3}(u_5 + \frac{1}{\sqrt{2}}u_8) &= -z \downarrow
\end{aligned} \tag{E.2}$$

Podemos ver que los primeros cuatro elementos tiene spin up ( $\uparrow$ ), mientras que los demás tienen spin down ( $\downarrow$ ). A su vez, entre los de arriba y abajo se repite el patrón en las funciones  $s$ ,  $x$ ,  $y$  y  $z$ . Esto indica que a los vectores en esta base pueden escribirse como un producto tensorial de vectores:

$$\begin{pmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} S \\ (X + iY) \\ (X - iY) \\ Z \end{pmatrix} \tag{E.3}$$

Es decir, como un producto de las bases *de banda* y *de spin*.

El Hamiltoniano escrito en esta base tendrá los mismos autovalores que en la base original. Para las autofunciones, si en la base original estaban dadas por las funciones  $f$ , en la nueva base se deben combinar para obtener

$$\vec{\varphi} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_3 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(f_5 - \frac{2}{\sqrt{2}}f_8) \\ \frac{\sqrt{6}}{3}(f_4 - \frac{1}{\sqrt{2}}f_7) \\ f_2 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(f_4 + \frac{2}{\sqrt{2}}f_7) \\ f_6 \\ \frac{\sqrt{6}}{3}(f_5 + \frac{1}{\sqrt{2}}f_8) \end{pmatrix} \tag{E.4}$$

donde  $\varphi$  será el autoestado en esta nueva base.

De esta forma, hemos definido dos subsistemas para nuestros estados: el spin y las bandas. Podemos entonces proceder al cálculo de una matriz densidad reducida trazando sobre alguna de estas bases, para obtener una descripción de los estados que incluya el contenido de entrelazamiento entre estos grados de libertad a través de la entropía de von Neumann.

En la Figura E.1 se puede observar, en el panel izquierdo, el espectro de energías para los estados de *bulk* de un pozo cuántico HgTe/CdTe en función del espesor de la capa intermedia,

*d.* Para los estados cuyas energías están representadas en colores, el panel derecho muestra la entropía de von Neumann correspondiente. Como se puede observar, esta cantidad permite diferenciar los estados de la banda de conducción (mayor entropía) de los de la banda de valencia (menor entropía), y es sensible a la transición estado extendido a estado ligado. Disponer de cantidades similares en estados de borde sería de gran interés para estudiar correlaciones entre las simetrías de cada banda y la componente de spin.

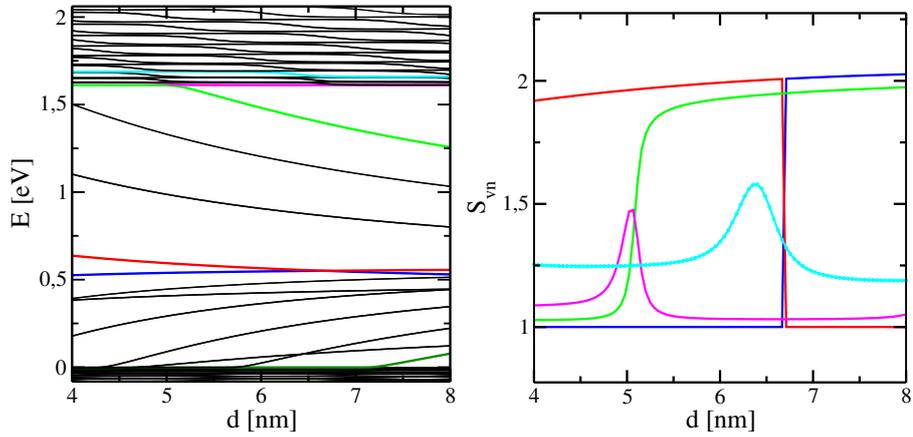


Figura E.1: Panel izquierdo: espectro de energías del *bulk* en función del espesor de la capa intermedia  $d$  para un pozo cuántico de HgTe/CdTe. Panel derecho: entropía de von Neumann utilizando la partición spin/bandas para los estados representados en colores en el panel izquierdo. El código de colores en el mismo en ambos paneles.



# Bibliografía

- [1] W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*. New York: Dover Publications, 1949.
- [2] L. Hardy, *Quantum Theory From Five Reasonable Axioms*, 2001. DOI: [10.48550/ARXIV.QUANT-PH/0101012](https://doi.org/10.48550/ARXIV.QUANT-PH/0101012).
- [3] S. Aravinda, A. Pathak y R. Srikanth, «Hierarchical axioms for quantum mechanics,» *The European Physical Journal D*, vol. 73, n.º 9, pág. 207, 2019, ISSN: 1434-6079. DOI: [10.1140/epjd/e2019-90452-2](https://doi.org/10.1140/epjd/e2019-90452-2).
- [4] P. Benioff, «The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines,» *Journal of Statistical Physics*, vol. 22, n.º 5, págs. 563-591, 1980, ISSN: 1572-9613. DOI: [10.1007/BF01011339](https://doi.org/10.1007/BF01011339).
- [5] G. Brassard, «Brief history of quantum cryptography: a personal perspective,» en *IEEE Information Theory Workshop on Theory and Practice in Information-Theoretic Security*, 2005, págs. 19-23. DOI: [10.1109/ITWTPI.2005.1543949](https://doi.org/10.1109/ITWTPI.2005.1543949).
- [6] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres y W. K. Wootters, «Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, págs. 1895-1899, 13 1993. DOI: [10.1103/PhysRevLett.70.1895](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.1895).
- [7] A. Ekert y R. Jozsa, «Quantum computation and Shor's factoring algorithm,» *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, págs. 733-753, 3 1996. DOI: [10.1103/RevModPhys.68.733](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.68.733).
- [8] S. Pirandola, U. L. Andersen, L. Banchi y col., «Advances in quantum cryptography,» *Adv. Opt. Photon.*, vol. 12, n.º 4, págs. 1012-1236, 2020. DOI: [10.1364/AOP.361502](https://doi.org/10.1364/AOP.361502).
- [9] D. Deutsch y R. Penrose, «Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer,» *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 400, n.º 1818, págs. 97-117, 1985. DOI: [10.1098/rspa.1985.0070](https://doi.org/10.1098/rspa.1985.0070).
- [10] E. Schrödinger, «Discussion of Probability Relations between Separated Systems,» *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 31, n.º 4, págs. 555-563, 1935. DOI: [10.1017/S0305004100013554](https://doi.org/10.1017/S0305004100013554).
- [11] A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, «Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?» *Phys. Rev.*, vol. 47, págs. 777-780, 10 1935. DOI: [10.1103/PhysRev.47.777](https://doi.org/10.1103/PhysRev.47.777).
- [12] J. J. Sakurai y J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 2.<sup>a</sup> ed. Cambridge University Press, 2017. DOI: [10.1017/9781108499996](https://doi.org/10.1017/9781108499996).
- [13] M. A. Can, A. Klyachko y A. Shumovsky, «Single-particle entanglement,» *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, vol. 7, n.º 2, págs. L1-L3, 2005. DOI: [10.1088/1464-4266/7/2/101](https://doi.org/10.1088/1464-4266/7/2/101).

- [14] N. Giovanale, F. M. Pont, P. Serra y O. Osenda, «Convexity properties of superpositions of degenerate bipartite eigenstates,» *Phys. Rev. A*, vol. 99, pág. 052340, 5 2019. DOI: [10.1103/PhysRevA.99.052340](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.99.052340).
- [15] M. Garagiola, F. M. Pont y O. Osenda, «Binding of two-electron metastable states in semiconductor quantum dots under a magnetic field,» *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 51, n.º 7, pág. 075504, 2018. DOI: [10.1088/1361-6455/aab1a0](https://doi.org/10.1088/1361-6455/aab1a0).
- [16] A. Sterdyniak, A. Chandran, N. Regnault, B. A. Bernevig y P. Bonderson, «Real-space entanglement spectrum of quantum Hall states,» *Phys. Rev. B*, vol. 85, pág. 125308, 12 2012. DOI: [10.1103/PhysRevB.85.125308](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.125308).
- [17] A. Kitaev y J. Preskill, «Topological Entanglement Entropy,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, pág. 110404, 11 2006. DOI: [10.1103/PhysRevLett.96.110404](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.110404).
- [18] M. Levin y X.-G. Wen, «Detecting Topological Order in a Ground State Wave Function,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, pág. 110405, 11 2006. DOI: [10.1103/PhysRevLett.96.110405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.110405).
- [19] G. Gamow, «Zur Quantentheorie des Atomkernes,» *Zeitschrift für Physik*, vol. 51, n.º 3, págs. 204-212, 1928, ISSN: 0044-3328. DOI: [10.1007/BF01343196](https://doi.org/10.1007/BF01343196).
- [20] W. P. Reinhardt y S. Han, «Exploiting the analyticity of Schrödinger operators: Theory and the computation of partial cross sections,» *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 57, n.º 3, págs. 327-341, 1996. DOI: [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-461X\(1996\)57:3<327::AID-QUA6>3.0.CO;2-#](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(1996)57:3<327::AID-QUA6>3.0.CO;2-#).
- [21] Y. Sajeev y N. Moiseyev, «Theory of autoionization and photoionization in two-electron spherical quantum dots,» *Phys. Rev. B*, vol. 78, pág. 075316, 7 2008. DOI: [10.1103/PhysRevB.78.075316](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.075316).
- [22] Y. Sajeev, V. Vysotskiy, L. S. Cederbaum y N. Moiseyev, «Continuum remover-complex absorbing potential: Efficient removal of the nonphysical stabilization points,» *The Journal of Chemical Physics*, vol. 131, n.º 21, pág. 211102, 2009. DOI: [10.1063/1.3271350](https://doi.org/10.1063/1.3271350).
- [23] F. M. Pont, O. Osenda, J. H. Toloza y P. Serra, «Entropy, fidelity, and double orthogonality for resonance states in two-electron quantum dots,» *Phys. Rev. A*, vol. 81, pág. 042518, 4 2010. DOI: [10.1103/PhysRevA.81.042518](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.042518).
- [24] A. Y. Ramos y O. Osenda, «Resonance states in a cylindrical quantum dot with an external magnetic field,» *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 47, n.º 1, pág. 015502, 2013. DOI: [10.1088/0953-4075/47/1/015502](https://doi.org/10.1088/0953-4075/47/1/015502).
- [25] J. Avron, I. Herbst y B. Simon, «Formation of Negative Ions in Magnetic Fields,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 39, págs. 1068-1070, 17 1977. DOI: [10.1103/PhysRevLett.39.1068](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.39.1068).
- [26] J. A. Salas y K. Varga, «He<sup>-</sup> in a magnetic field: Structure and stability,» *Phys. Rev. A*, vol. 89, pág. 052501, 5 2014. DOI: [10.1103/PhysRevA.89.052501](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.052501).
- [27] R. Buczko y F. Bassani, «Bound and resonant electron states in quantum dots: The optical spectrum,» *Phys. Rev. B*, vol. 54, págs. 2667-2674, 4 1996. DOI: [10.1103/PhysRevB.54.2667](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.2667).
- [28] M. Bylicki y W. Jaskólski, «Binding of resonant states in a magnetic field,» *Phys. Rev. B*, vol. 60, págs. 15924-15927, 23 1999. DOI: [10.1103/PhysRevB.60.15924](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.15924).
- [29] M. Bylicki, W. Jaskólski, A. Stachów y J. Diaz, «Resonance states of two-electron quantum dots,» *Phys. Rev. B*, vol. 72, pág. 075434, 7 2005. DOI: [10.1103/PhysRevB.72.075434](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.075434).

- [30] A. Kuroś y A. Okopińska, «Entanglement Properties of the Two-Electron Quasi-One Dimensional Gaussian Quantum Dot,» *Few-Body Systems*, vol. 56, n.º 11, págs. 853-858, 2015, ISSN: 1432-5411. DOI: [10.1007/s00601-015-0992-x](https://doi.org/10.1007/s00601-015-0992-x).
- [31] E. H. Hall, «On a New Action of the Magnet on Electric Currents,» *American Journal of Mathematics*, vol. 2, n.º 3, págs. 287-292, 1879, Full publication date: Sep., 1879. DOI: [10.2307/2369245](https://doi.org/10.2307/2369245).
- [32] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper, «New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 45, págs. 494-497, 6 1980. DOI: [10.1103/PhysRevLett.45.494](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494).
- [33] C. L. Kane y E. J. Mele, «Quantum Spin Hall Effect in Graphene,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, pág. 226 801, 22 2005. DOI: [10.1103/PhysRevLett.95.226801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801).
- [34] B. A. Bernevig, T. L. Hughes y S.-C. Zhang, «Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells,» *Science*, vol. 314, n.º 5806, págs. 1757-1761, 2006. DOI: [10.1126/science.1133734](https://doi.org/10.1126/science.1133734).
- [35] N. A. Gershenfeld e I. L. Chuang, «Bulk Spin-Resonance Quantum Computation,» *Science*, vol. 275, n.º 5298, págs. 350-356, 1997. DOI: [10.1126/science.275.5298.350](https://doi.org/10.1126/science.275.5298.350).
- [36] D. G. Cory, A. F. Fahmy y T. F. Havel, «Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy,» *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 94, n.º 5, págs. 1634-1639, 1997. DOI: [10.1073/pnas.94.5.1634](https://doi.org/10.1073/pnas.94.5.1634).
- [37] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood e I. L. Chuang, «Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance,» *Nature*, vol. 414, n.º 6866, págs. 883-887, 2001. DOI: [10.1038/414883a](https://doi.org/10.1038/414883a).
- [38] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor y col., «Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots,» *Science*, vol. 309, n.º 5744, págs. 2180-2184, 2005. DOI: [10.1126/science.1116955](https://doi.org/10.1126/science.1116955).
- [39] M. Hofheinz, H. Wang, M. Ansmann y col., «Synthesizing arbitrary quantum states in a superconducting resonator,» *Nature*, vol. 459, n.º 7246, págs. 546-549, 2009. DOI: [10.1038/nature08005](https://doi.org/10.1038/nature08005).
- [40] E. Knill, R. Laflamme y G. J. Milburn, «A scheme for efficient quantum computation with linear optics,» *Nature*, vol. 409, n.º 6816, págs. 46-52, 2001. DOI: [10.1038/35051009](https://doi.org/10.1038/35051009).
- [41] D. S. Abrams y S. Lloyd, «Quantum Algorithm Providing Exponential Speed Increase for Finding Eigenvalues and Eigenvectors,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, págs. 5162-5165, 24 1999. DOI: [10.1103/PhysRevLett.83.5162](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.5162).
- [42] J. L. O'Brien, A. Furusawa y J. Vučković, «Photonic quantum technologies,» *Nature Photonics*, vol. 3, n.º 12, págs. 687-695, 2009. DOI: [10.1038/nphoton.2009.229](https://doi.org/10.1038/nphoton.2009.229).
- [43] R. Lo Franco y G. Compagno, «Indistinguishability of Elementary Systems as a Resource for Quantum Information Processing,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, pág. 240 403, 24 2018. DOI: [10.1103/PhysRevLett.120.240403](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.240403).
- [44] A. Vaziri, G. Weihs y A. Zeilinger, «Superpositions of the orbital angular momentum for applications in quantum experiments,» *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, vol. 4, n.º 2, S47-S51, 2002. DOI: [10.1088/1464-4266/4/2/367](https://doi.org/10.1088/1464-4266/4/2/367).

- [45] B. Jack, J. Leach, H. Ritsch, S. M. Barnett, M. J. Padgett y S. Franke-Arnold, «Precise quantum tomography of photon pairs with entangled orbital angular momentum,» *New Journal of Physics*, vol. 11, n.º 10, pág. 103 024, 2009. DOI: [10.1088/1367-2630/11/10/103024](https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/10/103024).
- [46] G. Parisi, E. Mari, F. Spinello, F. Romanato y F. Tamburini, «Manipulating intensity and phase distribution of composite Laguerre-Gaussian beams,» *Opt. Express*, vol. 22, n.º 14, págs. 17 135-17 146, 2014. DOI: [10.1364/OE.22.017135](https://doi.org/10.1364/OE.22.017135).
- [47] T. J. Osborne y M. A. Nielsen, «Entanglement in a simple quantum phase transition,» *Phys. Rev. A*, vol. 66, pág. 032 110, 3 2002. DOI: [10.1103/PhysRevA.66.032110](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.032110).
- [48] M. Gaudiano, O. Osenda y G. A. Raggio, «Two-spin-subsystem entanglement in spin-1/2 rings with long-range interactions,» *Phys. Rev. A*, vol. 77, pág. 022 109, 2 2008. DOI: [10.1103/PhysRevA.77.022109](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.022109).
- [49] D. J. H. Markham, «Entanglement and symmetry in permutation-symmetric states,» *Phys. Rev. A*, vol. 83, pág. 042 332, 4 2011. DOI: [10.1103/PhysRevA.83.042332](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.042332).
- [50] A. Hamma, S. M. Giampaolo y F. Illuminati, «Mutual information and spontaneous symmetry breaking,» *Phys. Rev. A*, vol. 93, pág. 012 303, 1 2016. DOI: [10.1103/PhysRevA.93.012303](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.012303).
- [51] L. Vidmar, L. Hackl, E. Bianchi y M. Rigol, «Entanglement Entropy of Eigenstates of Quadratic Fermionic Hamiltonians,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, pág. 020 601, 2 2017. DOI: [10.1103/PhysRevLett.119.020601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.020601).
- [52] L. Vidmar y M. Rigol, «Entanglement Entropy of Eigenstates of Quantum Chaotic Hamiltonians,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, pág. 220 603, 22 2017. DOI: [10.1103/PhysRevLett.119.220603](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.220603).
- [53] M. Garagiola, E. Cuestas, F. M. Pont, P. Serra y O. Osenda, «Detecting dimensional crossover and finite Hilbert space through entanglement entropies,» *Phys. Rev. A*, vol. 94, pág. 042 115, 4 2016. DOI: [10.1103/PhysRevA.94.042115](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.042115).
- [54] B. D. Simons, P. A. Lee y B. L. Altshuler, «Exact description of spectral correlators by a quantum one-dimensional model with inverse-square interaction,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, págs. 4122-4125, 26 1993. DOI: [10.1103/PhysRevLett.70.4122](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.4122).
- [55] H. Azuma y S. Iso, «Explicit relation of the quantum Hall effect and the Calogero-Sutherland model,» *Physics Letters B*, vol. 331, n.º 1, págs. 107-113, 1994, ISSN: 0370-2693. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(94\)90949-0](https://doi.org/10.1016/0370-2693(94)90949-0).
- [56] A. P. Polychronakos, «The physics and mathematics of Calogero particles,» *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 39, n.º 41, págs. 12 793-12 845, 2006. DOI: [10.1088/0305-4470/39/41/s07](https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/41/s07).
- [57] J. S. Dehesa, I. V. Toranzo y D. Puertas-Centeno, «Entropic measures of Rydberg-like harmonic states,» *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 117, n.º 1, págs. 48-56, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25315>.
- [58] P.-F. Loos y P. M. W. Gill, «Two Electrons on a Hypersphere: A Quasiexactly Solvable Model,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, pág. 123 008, 12 2009. DOI: [10.1103/PhysRevLett.103.123008](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.123008).
- [59] I. V. Toranzo, A. R. Plastino, P. Sánchez-Moreno y J. S. Dehesa, «Quantum entanglement in (d-1)-spherium,» *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 48, n.º 47, pág. 475 302, 2015. DOI: [10.1088/1751-8113/48/47/475302](https://doi.org/10.1088/1751-8113/48/47/475302).

- [60] P. Kok y B. W. Lovett, *Introduction to Optical Quantum Information Processing*. Cambridge University Press, 2010. DOI: [10.1017/CB09781139193658](https://doi.org/10.1017/CB09781139193658).
- [61] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë, *Quantum mechanics; 1st ed.* New York, NY: Wiley, 1977, Trans. of : Mécanique quantique. Paris : Hermann, 1973. dirección: <https://cds.cern.ch/record/101367>.
- [62] V. Tognetti y P.-F. Loos, «Natural occupation numbers in two-electron quantum rings,» *The Journal of Chemical Physics*, vol. 144, n.º 5, pág. 054108, 2016. DOI: [10.1063/1.4940919](https://doi.org/10.1063/1.4940919).
- [63] C. A. Downing, «Two-electron atom with a screened interaction,» *Phys. Rev. A*, vol. 95, pág. 022105, 2 2017. DOI: [10.1103/PhysRevA.95.022105](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.022105).
- [64] G. S. Ezra y R. S. Berry, «Correlation of two particles on a sphere,» *Phys. Rev. A*, vol. 25, págs. 1513-1527, 3 1982. DOI: [10.1103/PhysRevA.25.1513](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.25.1513).
- [65] G. S. Ezra y R. S. Berry, «Quantum states of two particles on concentric spheres,» *Phys. Rev. A*, vol. 28, págs. 1989-2000, 4 1983. DOI: [10.1103/PhysRevA.28.1989](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.28.1989).
- [66] P. C. Ojha y R. S. Berry, «Angular correlation of two electrons on a sphere,» *Phys. Rev. A*, vol. 36, págs. 1575-1585, 4 1987. DOI: [10.1103/PhysRevA.36.1575](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.36.1575).
- [67] R. J. Hinde y R. S. Berry, «Correlation of two weakly attractive particles on a sphere,» *Phys. Rev. A*, vol. 42, págs. 2259-2266, 4 1990. DOI: [10.1103/PhysRevA.42.2259](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.42.2259).
- [68] P.-F. Loos y P. M. W. Gill, «Ground state of two electrons on a sphere,» *Phys. Rev. A*, vol. 79, pág. 062517, 6 2009. DOI: [10.1103/PhysRevA.79.062517](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.062517).
- [69] E. A. Hylleraas, «Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium,» *Zeitschrift für Physik*, vol. 54, n.º 5, págs. 347-366, 1929. DOI: [10.1007/BF01375457](https://doi.org/10.1007/BF01375457).
- [70] G. Pestka, «The Schrödinger equation for a spherical two-particle system in  $r_1, r_2, r_{12}$  variables,» *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 41, n.º 23, pág. 235202, 2008. DOI: [10.1088/1751-8113/41/23/235202](https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/23/235202).
- [71] S. Gigan, L. Lopez, N. Treps, A. Maître y C. Fabre, «Image transmission through a stable paraxial cavity,» *Phys. Rev. A*, vol. 72, pág. 023804, 2 2005. DOI: [10.1103/PhysRevA.72.023804](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.023804).
- [72] Z.-D. Cheng, Z.-D. Liu, X.-W. Luo y col., «Degenerate cavity supporting more than 31 Laguerre-Gaussian modes,» *Opt. Lett.*, vol. 42, n.º 10, págs. 2042-2045, 2017. DOI: [10.1364/OL.42.002042](https://doi.org/10.1364/OL.42.002042).
- [73] M. Abramowitz e I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, ninth Dover printing, tenth GPO printing. New York: Dover, 1964.
- [74] S. Horiguchi, «Validity of effective mass theory for energy levels in Si quantum wires,» *Physica B: Condensed Matter*, vol. 227, n.º 1, págs. 336-338, 1996, Proceedings of the Third International Symposium on New Phenomena in Mesoscopic Structures, ISSN: 0921-4526. DOI: [https://doi.org/10.1016/0921-4526\(96\)00435-8](https://doi.org/10.1016/0921-4526(96)00435-8).
- [75] V. V. R. Kishore, B. Partoens y F. M. Peeters, «Electronic and optical properties of core-shell nanowires in a magnetic field,» *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 26, n.º 9, pág. 095501, 2014. DOI: [10.1088/0953-8984/26/9/095501](https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/9/095501).
- [76] S. S. Krishtopenko, W. Knap y F. Teppe, «Phase transitions in two tunnel-coupled HgTe quantum wells: Bilayer graphene analogy and beyond,» *Scientific Reports*, vol. 6, n.º 1, pág. 30755, 2016, ISSN: 2045-2322. DOI: [10.1038/srep30755](https://doi.org/10.1038/srep30755).

- [77] S. S. Krishtopenko y F. Teppe, «Realistic picture of helical edge states in HgTe quantum wells,» *Phys. Rev. B*, vol. 97, pág. 165 408, 16 2018. DOI: [10.1103/PhysRevB.97.165408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.165408).
- [78] M. V. Durnev y S. A. Tarasenko, «Magnetic field effects on edge and bulk states in topological insulators based on HgTe/CdHgTe quantum wells with strong natural interface inversion asymmetry,» *Phys. Rev. B*, vol. 93, pág. 075 434, 7 2016. DOI: [10.1103/PhysRevB.93.075434](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.075434).
- [79] P. Corfdir, O. Marquardt, R. B. Lewis y col., «Excitonic Aharonov–Bohm Oscillations in Core–Shell Nanowires,» *Advanced Materials*, vol. 31, n.º 3, pág. 1 805 645, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.201805645>.
- [80] V. V. R. Kishore, B. Partoens y F. M. Peeters, «Electronic structure of InAs/GaSb core-shell nanowires,» *Phys. Rev. B*, vol. 86, pág. 165 439, 16 2012. DOI: [10.1103/PhysRevB.86.165439](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.165439).
- [81] R. B. Laughlin, «Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, págs. 1395-1398, 18 1983. DOI: [10.1103/PhysRevLett.50.1395](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1395).
- [82] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne y col., «Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells,» *Science*, vol. 318, n.º 5851, págs. 766-770, 2007. DOI: [10.1126/science.1148047](https://doi.org/10.1126/science.1148047).
- [83] D. Snoke, «Spontaneous Bose Coherence of Excitons and Polaritons,» *Science*, vol. 298, n.º 5597, págs. 1368-1372, 2002. DOI: [10.1126/science.1078082](https://doi.org/10.1126/science.1078082).
- [84] W. Z. R. DA, W. K y col., «Evidence of high-temperature exciton condensation in two-dimensional atomic double layers,» *Nature*, vol. 574, n.º 7776, págs. 76-80, 2019. DOI: [10.1038/s41586-019-1591-7](https://doi.org/10.1038/s41586-019-1591-7).
- [85] R. Yu, X. L. Qi, A. Bernevig, Z. Fang y X. Dai, «Equivalent expression of  $\mathbb{Z}_2$  topological invariant for band insulators using the non-Abelian Berry connection,» *Phys. Rev. B*, vol. 84, pág. 075 119, 7 2011. DOI: [10.1103/PhysRevB.84.075119](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075119).
- [86] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki y A. W. W. Ludwig, «Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions,» *Phys. Rev. B*, vol. 78, pág. 195 125, 19 2008. DOI: [10.1103/PhysRevB.78.195125](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.195125).
- [87] J. de Lisle, S. De, E. Alba y col., «Detection of Chern numbers and entanglement in topological two-species systems through subsystem winding numbers,» *New Journal of Physics*, vol. 16, n.º 8, pág. 083 022, 2014. DOI: [10.1088/1367-2630/16/8/083022](https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/8/083022).
- [88] H. Li y F. D. M. Haldane, «Entanglement Spectrum as a Generalization of Entanglement Entropy: Identification of Topological Order in Non-Abelian Fractional Quantum Hall Effect States,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, pág. 010 504, 1 2008. DOI: [10.1103/PhysRevLett.101.010504](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.010504).
- [89] S. V. Isakov, M. B. Hastings y R. G. Melko, «Topological entanglement entropy of a Bose–Hubbard spin liquid,» *Nature Physics*, vol. 7, n.º 10, págs. 772-775, 2011, ISSN: 1745-2481. DOI: [10.1038/nphys2036](https://doi.org/10.1038/nphys2036).
- [90] H.-C. Jiang, Z. Wang y L. Balents, «Identifying topological order by entanglement entropy,» *Nature Physics*, vol. 8, n.º 12, págs. 902-905, 2012, ISSN: 1745-2481. DOI: [10.1038/nphys2465](https://doi.org/10.1038/nphys2465).
- [91] T. Grover, Y. Zhang y A. Vishwanath, «Entanglement entropy as a portal to the physics of quantum spin liquids,» *New J. Phys.*, vol. 15, n.º 2, pág. 025 002, 2013. DOI: [10.1088/1367-2630/15/2/025002](https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/2/025002).

- [92] Y. A. Lee y G. Vidal, «Entanglement negativity and topological order,» *Phys. Rev. A*, vol. 88, pág. 042 318, 4 2013. DOI: [10.1103/PhysRevA.88.042318](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.042318).
- [93] M. Haque, O. Zozulya y K. Schoutens, «Entanglement Entropy in Fermionic Laughlin States,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, pág. 060 401, 6 2007. DOI: [10.1103/PhysRevLett.98.060401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.060401).
- [94] O. S. Zozulya, M. Haque, K. Schoutens y E. H. Rezayi, «Bipartite entanglement entropy in fractional quantum Hall states,» *Phys. Rev. B*, vol. 76, pág. 125 310, 12 2007. DOI: [10.1103/PhysRevB.76.125310](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.125310).
- [95] O. S. Zozulya, M. Haque y N. Regnault, «Entanglement signatures of quantum Hall phase transitions,» *Phys. Rev. B*, vol. 79, pág. 045 409, 4 2009. DOI: [10.1103/PhysRevB.79.045409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.045409).
- [96] A. M. Läuchli, E. J. Bergholtz, J. Suorsa y M. Haque, «Disentangling Entanglement Spectra of Fractional Quantum Hall States on Torus Geometries,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, pág. 156 404, 15 2010. DOI: [10.1103/PhysRevLett.104.156404](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.156404).
- [97] L. Fidkowski, «Entanglement Spectrum of Topological Insulators and Superconductors,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, pág. 130 502, 13 2010. DOI: [10.1103/PhysRevLett.104.130502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.130502).
- [98] D. Poilblanc, «Entanglement Spectra of Quantum Heisenberg Ladders,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, pág. 077 202, 7 2010. DOI: [10.1103/PhysRevLett.105.077202](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.077202).
- [99] T. H. Hsieh y L. Fu, «Bulk Entanglement Spectrum Reveals Quantum Criticality within a Topological State,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, pág. 106 801, 10 2014. DOI: [10.1103/PhysRevLett.113.106801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.106801).
- [100] M. P. Zaletel, R. S. K. Mong y F. Pollmann, «Topological Characterization of Fractional Quantum Hall Ground States from Microscopic Hamiltonians,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, pág. 236 801, 23 2013. DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.236801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.236801).
- [101] L. Cincio y G. Vidal, «Characterizing Topological Order by Studying the Ground States on an Infinite Cylinder,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, pág. 067 208, 6 2013. DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.067208](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.067208).
- [102] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg y M. Oshikawa, «Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension,» *Phys. Rev. B*, vol. 81, pág. 064 439, 6 2010. DOI: [10.1103/PhysRevB.81.064439](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.064439).
- [103] F. T. Lisandrini, A. M. Lobos, A. O. Dobry y C. J. Gazza, «Topological Kondo insulators in one dimension: Continuous Haldane-type ground-state evolution from the strongly interacting to the noninteracting limit,» *Phys. Rev. B*, vol. 96, pág. 075 124, 7 2017. DOI: [10.1103/PhysRevB.96.075124](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.075124).
- [104] B. Scharf, A. Matos-Abiague y J. Fabian, «Magnetic properties of HgTe quantum wells,» *Phys. Rev. B*, vol. 86, pág. 075 418, 7 2012. DOI: [10.1103/PhysRevB.86.075418](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.075418).
- [105] R. Skolasinski, D. I. Pikulin, J. Alicea y M. Wimmer, «Robust helical edge transport in quantum spin Hall quantum wells,» *Phys. Rev. B*, vol. 98, pág. 201 404, 20 2018. DOI: [10.1103/PhysRevB.98.201404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.201404).
- [106] Z. Chen y T. K. Ng, «Interaction-induced edge states in HgTe/CdTe quantum wells under a magnetic field,» *Phys. Rev. B*, vol. 99, pág. 235 157, 23 2019. DOI: [10.1103/PhysRevB.99.235157](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.235157).
- [107] C. de Boor, *A Practical Guide To Splines*. New York: Springer, 1978.

- [108] H. Bachau, E. Cormier, P. Decleva, J. E. Hansen y F. Martín, «Applications of B-splines in atomic and molecular physics,» *Rep. Progr. Phys.*, vol. 64, n.º 12, págs. 1815-1943, 2001. DOI: [10.1088/0034-4885/64/12/205](https://doi.org/10.1088/0034-4885/64/12/205).
- [109] M. Z. Hasan y C. L. Kane, «Colloquium: Topological insulators,» *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, págs. 3045-3067, 4 2010. DOI: [10.1103/RevModPhys.82.3045](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045).
- [110] M. M. Wolf, F. Verstraete, M. B. Hastings y J. I. Cirac, «Area Laws in Quantum Systems: Mutual Information and Correlations,» *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, pág. 070 502, 7 2008. DOI: [10.1103/PhysRevLett.100.070502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.070502).
- [111] Y. Liu, R. Sohal, J. Kudler-Flam y S. Ryu, «Multipartitioning topological phases by vertex states and quantum entanglement,» *Phys. Rev. B*, vol. 105, pág. 115 107, 11 2022. DOI: [10.1103/PhysRevB.105.115107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.115107).
- [112] N. Moiseyev, «Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling,» *Phys. Rep.*, vol. 302, n.º, pág. 211, 1998. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(98\)00002-7](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(98)00002-7).
- [113] F. G. Tricomi, «Integral Equations,» *Interscience Publishers*, n.º, 1957.
- [114] K. J. H. Giesbertz y R. van Leeuwen, «Natural occupation numbers: When do they vanish?» *The Journal of Chemical Physics*, vol. 139, n.º 10, pág. 104 109, 2013. DOI: [10.1063/1.4820419](https://doi.org/10.1063/1.4820419).
- [115] J. F. Perkins, «Atomic Integrals Containing  $r_{23}^\lambda r_{31}^\mu r_{12}^\nu$ ,» *The Journal of Chemical Physics*, vol. 48, n.º 5, págs. 1985-1988, 1968. DOI: [10.1063/1.1669001](https://doi.org/10.1063/1.1669001).
- [116] E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth y col., «Band structure of semimagnetic  $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$  quantum wells,» *Phys. Rev. B*, vol. 72, pág. 035 321, 3 2005. DOI: [10.1103/PhysRevB.72.035321](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.035321).
- [117] I. Saïdi, S. Ben Radhia y K. Boujdaria, «Band parameters of GaAs, InAs, InP, and InSb in the 40-band kp model,» *Journal of Applied Physics*, vol. 107, n.º 4, pág. 043 701, 2010. DOI: [10.1063/1.3295900](https://doi.org/10.1063/1.3295900).