

# Probabilidad de Supervivencia y Entropía de Estados Resonantes

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

Licenciada en Física

de la

Universidad Nacional de Córdoba

Director: Dr. Omar Osenda



Probabilidad de Supervivencia y Entropía de Estados Resonantes por Giovenale, Natalia Agustina se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Attribution-NonCommercial-SinDerivar 2.5 Argentina](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.5/arg/).



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>13</b>
<b>2. Marco teórico</b>	<b>17</b>
2.1. Resonancias . . . . .	17
2.1.1. Complex scaling . . . . .	18
2.2. Matriz densidad . . . . .	19
2.3. Entropías . . . . .	21
2.4. Método variacional de Rayleigh-Ritz . . . . .	22
2.5. Evolución temporal . . . . .	23
2.5.1. Sistemas de una partícula . . . . .	24
2.5.2. Inversión de una matriz tridiagonal . . . . .	25
2.5.3. Sistemas de dos partículas . . . . .	26
2.6. Probabilidad de Supervivencia . . . . .	26
<b>3. Helio esférico</b>	<b>29</b>
3.1. El modelo . . . . .	29
3.2. Resultados . . . . .	32
<b>4. Modelo de dos partículas</b>	<b>39</b>
4.1. Método espectral . . . . .	39
4.2. Método dinámico . . . . .	40
4.3. Resultados . . . . .	41
<b>5. Conclusiones y perspectivas futuras</b>	<b>53</b>
<b>A. Modelo de una partícula.</b>	<b>55</b>
A.1. Método Espectral . . . . .	56
A.2. Evolución temporal . . . . .	56



# Índice de figuras

2.1. Representación del efecto de complex scaling en el espectro de H.[5] . . . . .	19
2.2. Probabilidad de supervivencia en función del tiempo, en la región de interferencia entre los comportamientos exponencial y de potencias de t.[18] . . . . .	28
3.1. Autovalores variacionales en función del parámetro $\lambda$ . La línea roja corresponde al umbral de ionización del sistema, $\varepsilon = -0,5$	32
3.2. Zoom de la figura (3.1). En azul una representación $E_r(\lambda)$ . . .	33
3.3. Entropía de von Neumann de una partícula en función de $\lambda$ , para distintos tamaños de base. De abajo a arriba N=2,4,6,8,10,12,16.	34
3.4. Primer y segundo autovalor de la matriz densidad reducida en función del parámetro $\lambda$ , para N=15. . . . .	34
3.5. Primer y segundo autovalor de la matriz densidad reducida en función del parámetro $\lambda$ , para N=15. De abajo a arriba $\beta$ , el parámetro variacional no lineal, adopta valores equiespaciados por $\delta\beta = 0,05$ . Así, $\beta$ va desde 1,3 hasta 3,8. . . . .	35
3.6. Entropía lineal en función del parámetro $\lambda$ , calculada para los primeros cuatro estados variacionales del sistema. La entropía correspondiente al estado fundamental comienza en su mínimo valor posible y crece abruptamente alrededor de $\lambda_c = 1,054$ , mientras que las demás, correspondientes a las autofunciones $\psi_j$ $j = 1, 2, 3$ , presentan un mínimo en $\lambda_j$ . Se tiene que si $i < j$ entonces $\lambda_i < \lambda_j$ . . . . .	36
3.7. Valor de expectación del potencial de interacción, $\langle \frac{1}{r} \rangle$ , en función del parámetro $\lambda$ , calculada para los primeros cuatro estados vacacionales del sistema. Para el estado fundamental $\psi_0$ comienza en un valor máximo para disminuir rápidamente alrededor de $\lambda_c = 1,045$ . Las curvas correspondientes a las autofunciones $\psi_j$ $j = 1, 2, 3$ , presentan un máximo en $\lambda_j$ . Se tiene que si $i < j$ entonces $\lambda_i < \lambda_j$ . . . . .	37

4.1.	(a) Espectro variacional en función de $\lambda$ , para el Hamiltoniano (4.1). (b) Lo mismo que en (a), la línea azul representa la parte real de la energía del estado resonante. . . . .	41
4.2.	Entropía lineal de los primeros 4 autovalores variacionales. La curva negra corresponde al estado fundamental, mientras que las curvas roja, azul y verde corresponden al 1er, 2do y 3er estado excitado, respectivamente. La curva naranja es una representación de la función $S[E_r(\lambda)]$ . . . . .	42
4.3.	Valor de expectación del potencial de interacción para los primeros cuatro autoestados variacionales. La curva negra corresponde al estado fundamental, mientras que las curvas roja, azul y verde corresponden al 1er, 2do y 3er estado excitado, respectivamente. La curva naranja es una representación de la función $\partial E/\partial\lambda$ . . . . .	43
4.4.	(a) Primer estado variacional en función de $\lambda$ para distintos valores del parámetro variacional $\beta$ . De abajo hacia arriba $\beta$ crece de 1.3 a 4.2. (b) Lo mismo que en (a) pero para el segundo estado variacional. . . . .	44
4.5.	En el panel superior se muestran los valores de la densidad de estados, ecuación (4.13), obtenida de los datos de la figura (4.4). En los paneles inferiores se muestra el ajuste a la densidad de estados correspondiente a (a) primer estado variacional excitado y (b) segundo estado variacional excitado. ( $\lambda = 0,5$ ) .	45
4.6.	En el panel superior se muestran los valores de la densidad de estados, ecuación (4.13), obtenida de los datos de la figura (4.4). En los paneles inferiores se muestra el ajuste a la densidad de estados correspondiente a (a) primer estado variacional excitado y (b) segundo estado variacional excitado. ( $\lambda = 0,65$ )	46
4.7.	Probabilidad de supervivencia en escala log-log, para parámetros $\lambda = 0,5$ , $\Delta t = 0,0025$ y $\Delta x = 0,25$ . Note las oscilaciones debidas a interferencia en tiempos intermedios. . . . .	47
4.8.	Probabilidad de supervivencia en función del tiempo. El parámetro del potencial es $\lambda = 0,5$ , mientras que para la evolución los parámetros son $\Delta x = 0,93$ y $\Delta t = 0,007, 0,014, 0,021, 0,028, 0,035$ . (curvas negra, azul, verde, roja y naranja respectivamente) . .	48
4.9.	Probabilidad de supervivencia en función del tiempo. La curva roja es el ajuste realizado. . . . .	49
4.10.	Probabilidad de supervivencia en función del tiempo para parámetros $\lambda = 0,65$ , $\Delta t = 0,0049$ y $\Delta x = 0,93$ . . . . .	50
4.11.	Probabilidad de supervivencia en función del tiempo para parámetros $\lambda = 0,65$ , $\Delta t = 0,0014$ y $\Delta x = 0,46$ . . . . .	51

4.12. Entropía lineal en función del tiempo, para parámetros del sistema:  $\lambda = 0,65$ ,  $\Delta t = 0,007$  y  $\Delta x = 0,93$  (curva negra) y  $\Delta x = 0,46$  (curva roja). . . . . 51



# Resumen

Al comenzar el estudio de Mecánica Cuántica nos encontramos con que el espectro de un dado Hamiltoniano se divide en estados  $L^2$ , correspondientes a los estados ligados (espectro discreto), y estados no normalizados que corresponden a un espectro continuo de energía, acotado por debajo por el umbral de ionización, pero no acotado por encima. La existencia y rangos de estos dos tipos de soluciones a la ecuación de Schrödinger depende fuertemente del sistema bajo estudio y de considerar el dominio de funciones donde el Hamiltoniano es Hermitiano.

Los estados resonantes, estados que no pertenecen al dominio Hermitiano del Hamiltoniano, han sido caracterizados de distintas formas; son por ejemplo asociados a polos complejos del resolvente, como estados metaestables con un tiempo de vida medio característico, etc. La energía del estado y el tiempo de vida medio pueden obtenerse por distintos métodos que explotan como afecta su presencia la densidad de estados, o la probabilidad de supervivencia de un estado localizado, entre otras cantidades físicas.

Sin demasiada precisión se puede decir que la caracterización se puede hacer mediante métodos estáticos, los cuales implican usualmente el cálculo de autovalores o su distribución, o métodos dinámicos, los cuales implican obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Recientemente, la caracterización de estados resonantes se ha realizado en términos de la entropía de von Neumann y otras cantidades habituales en el contexto de la Información Cuántica.

El objetivo del presente trabajo es el de entender la relación entre la entropía asociada a estados resonantes, la cual es independiente del tiempo, y la entropía dependiente del tiempo que se obtiene a partir de la evolución temporal de un estado inicial localizado. Para ello, se analizará un modelo relativamente simple de dos partículas (fermiones) interactuando entre si, las cuales se encuentran en un potencial de confinamiento. El análisis comprende la obtención de soluciones aproximadas para el espectro y autofunciones del Hamiltoniano, junto con su entropía, además de la integración numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. El análisis se realiza

cerca de la zona de ionización, es decir en la región donde el potencial de confinamiento no es suficientemente atractivo para que exista un estado de dos partículas ligadas.

# Abstract

A basic result concerning the spectrum of any quantum system separates it in a discrete part and a continuous one. The discrete spectrum corresponds to  $L^2$ , or normalizable, states, while the continuous spectrum corresponds to non-normalizable states. The discrete spectrum is bounded by below by the minimum of the potential. The continuous spectrum is also bounded by below, by the maximum of the discrete eigenvalues. The existence and rank of these two kinds of solutions for the Schrödinger equation strongly depends on the system under study and on the fact of considering the domain of functions where the Hamiltonian is an Hermitian operator.

Resonant states, this is, states which do not belong to the Hermitian domain of the Hamiltonian, has been characterized in different ways; for example, they are associated with complex poles of the resolvent, or are defined as metastable states with a characteristic mean lifetime, etc. The energy of this states and its mean lifetime can be obtained by different methods that exploit how the presence of the resonance states affect the density of states, or the probability of survival of a localized states, among another quantities.

Without much precision, one can say that this characterization can be done by using time-independent methods, which usually imply the calculus of eigenvalues or their distribution, or by using dynamic methods, which imply the knowledge of a solution for the time dependent Schrödinger equation. Recently, the characterization of resonant states has been made by means of the von Neumann entropy and other quantities in the context of Quantum Information.

The aim of this work is to understand the relationship between the entropy associated to resonant states, quantity that does not depend on time, and the time dependent entropy obtained by evolving in time a given localized initial condition. To accomplish this, we will analyze a relatively simple model of two particles (fermions) in a confinement potential, and interacting through a repulsive potential. We obtain approximate solutions for the spectrum and eigenfunctions of the Hamiltonian, together with its entropy, together with the numerical integration of the time-dependent Schrödinger

equation. All the quantities mentioned are obtained near the ionization threshold, that is, in the region where the confinement potential is not attractive enough to sustain a two-particle bound state .

Palabras clave: Probabilidad de Supervivencia, Entropía de von Neumann, Entropía lineal, Sistemas resonantes.

Clasificación:

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

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

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

**03.67.Mn**, Entanglement measures, witnesses, and other characterizations.

**31.15.xt**, Variational techniques.

# Agradecimientos

Quiero agradecer a mi familia, por darme la oportunidad y apoyarme en esta etapa.

A Pablo, que siempre me acompaño y fue de gran ayuda.

A Barbi, Juani, Juli y varias personas más con las que compartí la carrera, y que siempre estuvieron ahí.

Y a Omar, por sus enseñanzas, su disposición y su infinita paciencia.



# Capítulo 1

## Introducción

Los *estados resonantes* en Mecánica Cuántica han sido objeto de estudio desde los albores de la disciplina. Ya en 1928 Gamow [1] comenzó con el estudio teórico de los mismos al analizar el decaimiento de algunos núcleos pesados. Las dificultades inherentes al estudio fueron claras desde el principio, se trataba de estados físicos metaestables, es decir, tienen asociado un *tiempo de vida media* durante el cual están bien localizados. Luego de dicho tiempo de vida característico, el estado deja de estar localizado y se comporta como un paquete de ondas el cual se aleja de la región donde estuvo localizado.

La evidencia experimental sobre la existencia de estos estados resonantes se fué acumulando durante años y se encuentra en sistemas físicos de lo mas diversos. Dichos sistemas tienen características en común, entre ellas se puede mencionar que el sistema es estable para un número determinado de partículas e inestable cuando se agrega una partícula mas. Es por esto que el problema de las resonancias y su tiempo de vida medio es de tanto interés para la Química, en la que formar iones negativos a partir de átomos neutros agregándole uno o más electrones permite obtener catalizadores o reactivos de gran utilidad.

Más recientemente, las resonancias han sido estudiadas en sistemas o dispositivos nanoscópicos. Se ha comprobado que su presencia altera fundamentalmente las propiedades de transporte a través de dichos dispositivos, lo cual provee de un mecanismo para agregar electrones o controlar el paso de los mismos a través de un quantum dot. Incluso, el estudio experimental de algunas propiedades de los estados resonantes en sistemas nanoscópicos es mas accesible que en átomos o moléculas. Un ejemplo de esto es el fenómeno de confinamiento de resonancias (*resonance binding*), el cual se produce cuando se aplica un campo magnético constante y uniforme al sistema que presenta resonancias y que transforma el estado resonante en un estado ligado, ver la referencia [2] y las referencias citadas en la misma.

Hay numerosas formas de caracterizar las resonancias desde el punto de vista dinámico. El excelente artículo de Fonda, Ghirardi y Rimini [3], el cual analiza el decaimiento de sistemas cuánticos inestables pone gran énfasis en la presencia de distintos regímenes temporales y relaciona dichos regímenes al comportamiento de la densidad de estados del continuo. Fonda y sus colaboradores analizaron la *probabilidad de supervivencia*,  $P(t)$ , la cual está dada por

$$P(t) = |\langle \psi(t=0) | \psi(t) \rangle|^2,$$

donde  $\psi(t)$  es la función de onda del sistema. La probabilidad de supervivencia mide el decaimiento del sistema desde un estado inicial localizado,  $\psi(t=0)$  a medida que transcurre el tiempo.

Sin demasiada precisión, se puede decir que hay al menos tres regímenes básicos, decaimiento a tiempos cortos, a tiempos intermedios y a tiempos largos. A tiempos cortos, el decaimiento está dominado por la regla de oro de Fermi (*Fermi's Golden Rule*), la cual caracteriza la transición de un estado ligado al continuo, a tiempos intermedios domina el decaimiento debido a la presencia de “picos” en la densidad de estados, los cuales también afectan el decaimiento a tiempos largos. Cada régimen tiene un comportamiento temporal distinto, la regla de oro de Fermi predice un decaimiento que depende cuadráticamente en el tiempo, mientras que el comportamiento a tiempos intermedios es exponencial y depende, justamente, del ancho de la resonancia,  $\Gamma_0$ . El decaimiento es de la forma

$$P(t) \sim \exp(-\Gamma_0 t).$$

Es importante señalar que el escenario descrito en los párrafos anteriores es incompleto, ya que distintos sistemas pueden presentar aún más regímenes, un ejemplo de esto puede verse en una referencia más reciente, [4], en la cual se analizan la presencia de distintos regímenes temporales en una cadena semiinfinita descrita por un Hamiltoniano *tight-binding*.

Paralelamente a la caracterización dinámica de las resonancias, se avanzó en su estudio utilizando métodos espectrales, los cuales son independientes del tiempo e involucran el cálculo de autovalores. Rápidamente, las resonancias pueden encontrarse

- como polos en el en el plano complejo del resolvente  $(z\mathbb{I} - H)^{-1}$ , donde  $H$  es el Hamiltoniano del sistema [5]. Recordemos que el espectro discreto del Hamiltoniano, excluyendo las resonancias, se obtiene calculando los polos en el eje real del resolvente [6].
- como autovalores complejos del Hamiltoniano complejo que se obtiene del Hamiltoniano Hermitiano del sistema mediante el método de escaleo complejo

- con métodos que permitan obtener la densidad de estados del sistema

El método de escaleo complejo, además de proveer una forma de calcular el tiempo de vida medio de la resonancia y su energía, las cuales están dadas respectivamente por la parte imaginaria y real de un autovalor del Hamiltoniano escaleado, también provee una función de onda (el autovector correspondiente al autovalor mencionado) *normalizable*. Al ser un estado normalizado es posible darle una interpretación probabilista y se puede obtener valores finitos para funcionales que dependan del estado. Pont y co-autores [7] estudiaron la entropía de von Neumann de la matriz densidad reducida de un sistema de dos electrones con un estado resonante. El estudio comparó los resultados que se obtenían utilizando autofunciones variaciones aproximadas reales y complejas del estado resonante. Al ser ambas aproximaciones normalizables, a ambas les corresponde una entropía de von Neumann, real y compleja respectivamente. La interpretación de la parte real de la entropía compleja se realizó en dicha referencia. De todas formas, en dicho trabajo quedaron algunos interrogantes, en particular, ¿Cuál es la relación entre la entropía de von Neumann que se obtiene de métodos variacionales y la que se obtendría estudiando la evolución temporal del mismo sistema, empezando desde un estado localizado?, ¿Cuál es la interpretación física de la parte imaginaria de la entropía?

El propósito de este trabajo es estudiar las preguntas formuladas en el párrafo anterior. Con ese propósito se analizará un sistema de dos electrones, para ello se implementarán programas de cálculo que permitan obtener el espectro y autofunciones variacionales del Hamiltoniano del sistema y seguir la evolución dinámica de la probabilidad de supervivencia del mismo.

El trabajo esta organizado de la siguiente forma: en el Capítulo 2 se presenta la teoría necesaria para entender y realizar el trabajo propuesto. El Capítulo 3 está dedicado a la reproducción de resultados obtenidos por Osenda y co-autores para el Helio esférico [8], y a la implementación de análisis realizados por Pont y co-autores [7] para un sistema de dos electrones en *quantum dots*.

El capítulo 4 está destinados al estudio variacional y dinámico de un sistema de dos partículas. Se exponen allí las consideraciones necesarias para aplicar los métodos propuestos y los resultados obtenidos.

En el capítulo 5 se discuten los resultado obtenidos, y se saca conclusiones sobre los mismos.

Por último, en el apéndice A, se encuentran las consideraciones y cuentas necesarias para reproducir el trabajo realizado en un sistema de una partícula.



# Capítulo 2

## Marco teórico

Introduciremos a continuación los conceptos teóricos y herramientas matemáticas necesarios para la realización del trabajo propuesto.

### 2.1. Resonancias

Se denomina como estado resonante, o resonancia, a aquellos estados metaestables en los cuales se encuentra un sistema que, pasado un determinado tiempo, se rompe para formar varios subsistemas. Lo notable de estos estados es que si bien el sistema posee suficiente energía para subdividirse, pasando así a una configuración más estable, donde cada subsistema se encuentra en un autoestado, esto ocurre solo después de un tiempo propio característico del sistema. Este tiempo de decaimiento varía de los nanosegundos a los millones de años, dependiendo del sistema.

La teoría de estados resonantes fue introducida en 1928 por el físico George Gamow, al estudiar el decaimiento  $\alpha$  en núcleos pesados [1]. Estos estados, sin embargo, no son estados exclusivos de la Mecánica Cuántica, y a partir de este hecho se distinguen dos tipos de resonancias: *resonancias de forma* y *resonancias Feshbach* [6]. Ejemplos de las primeras son el efecto Stark y la radiación radioactiva, mientras que entre las segundas encontramos fenómenos como la filtración de modos en guías de onda y fibras ópticas. La distinción entre estos dos tipos puede entenderse teniendo en cuenta que las resonancias Feshbach tienen análogo clásico, mientras que las resonancias de forma se transforman gradualmente en estados ligados a medida que  $\hbar \rightarrow 0$ . Por lo tanto, basta con analizar el comportamiento del tiempo de vida medio ( $\tau$ ) del estado resonante del sistema como función de  $\hbar$ ; si  $\tau \rightarrow 0$  conforme  $\hbar \rightarrow 0$  entonces tratamos con una resonancia de forma, de lo contrario, si  $\tau$  tiende a algún valor distinto de cero, estamos en presencia de una resonancia

Feshbach.

Para entender qué son las resonancias podemos considerar lo siguiente: en Mecánica Cuántica trabajamos, por lo general, con operadores Hermitianos, es decir, operadores  $A$  tal que  $\langle \phi | A \psi \rangle = \langle A \phi | \psi \rangle$ . Pero esta igualdad depende fuertemente de las funciones  $\phi$  y  $\psi$  con que se trabaja; esto puede verse, en una dimensión, expresando la relación anterior según

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) A \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (A \phi(x))^* \psi(x) dx. \quad (2.1)$$

En el caso que el operador  $A$  sea el Hamiltoniano de un sistema, integrando por partes encontramos que esta relación se satisface si

$$\psi(\vec{x}) \left| \frac{d\phi(\vec{x})}{d\vec{x}} \right|_{-\infty}^{\infty} - \phi(\vec{x}) \left| \frac{d\psi(\vec{x})}{d\vec{x}} \right|_{-\infty}^{\infty} = 0, \quad (2.2)$$

con lo cual bastaría pedir que las funciones sean acotadas. Pero si trabajamos con funciones divergentes, entonces el operador en cuestión no es Hermitiano y, por tanto, sus autovalores pueden ser complejos. La situación descrita es precisamente lo que ocurre con los estados resonantes; si permitimos funciones de onda divergentes y autovalores complejos para el operador Hamiltoniano, obtendremos, entre otras cosas, las resonancias. Las energías de estos estados tienen la forma

$$E_{res} = E_r - i \frac{\Gamma}{2} \quad (2.3)$$

y los autoestados por su parte son

$$\phi(t, \vec{x}) = e^{-iHt/\hbar} \phi_{res}(\vec{x}) = e^{-iE_r t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar} \phi_{res}(\vec{x}) \quad (2.4)$$

donde  $\phi_{res}(\vec{x})$  es la función divergente. En las expresiones anteriores vemos el significado de la parte imaginaria de  $E_{res}$ , que nos da el tiempo de vida medio del estado, definido como

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (2.5)$$

### 2.1.1. Complex scaling

Un método que permite identificar las resonancias de un sistema es el método de *complex scaling*, que consiste en aplicar la transformación  $\vec{r} \rightarrow \vec{r} e^{i\theta}$ . Consideremos un sistema con Hamiltoniano  $H = E_k + E_p$ , donde  $E_k$  y  $E_p$  son las energías cinética y potencial respectivamente. En el caso particular

en que estas energías sean funciones homogéneas de orden -2 y -1 respectivamente, como lo es por ejemplo un sistema de dos partículas con interacción Coulombiana, el Hamiltoniano escaleado tendrá la forma [5]

$$H(\theta) = e^{-i2\theta} E_k + E_p e^{-i\theta} \quad (2.6)$$

Aquí entendemos por función homogénea de orden  $k$  a aquellas funciones  $f$  que cumplen  $f(\alpha x) = \alpha^k f(x)$ .

El efecto de esta transformación es rotar el espectro continuo alrededor del umbral de ionización por un ángulo  $-2\theta$ , dejando invariantes a los estados ligados. Esta rotación del sistema expone los estados resonantes que estaban ocultos al calcular el espectro del Hamiltoniano original,  $H$ . En la figura (2.1) se puede ver una representación esquemática de los espectros de  $H$  y  $H(\theta)$  para un Hamiltoniano genérico.

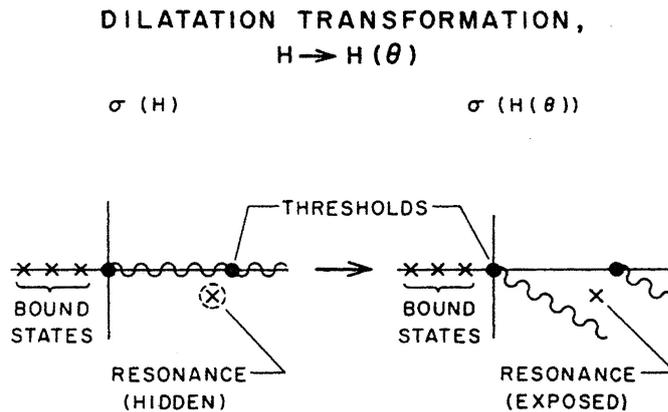


Figura 2.1: Representación del efecto de complex scaling en el espectro de  $H$ . [5]

## 2.2. Matriz densidad

Un formalismo de la Mecánica Cuántica, especialmente útil cuando el estado del sistema no es puro o cuando nos interesa el estado de un subsistema, se basa en el uso de la *matriz densidad* [12, 13]. Supongamos que nuestro sistema está en alguno de los estados  $|\psi_i\rangle$ , donde el índice  $i$  recorre un conjunto de estados, y que cada estado está ocupado con una probabilidad  $p_i$ . Tenemos entonces un ensamble de estados puros,  $\{|\psi_i\rangle, p_i\}$ , y la matriz densidad del

sistema será

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (2.7)$$

La matriz densidad representa entonces el estado cuántico del sistema, y todos los postulados de la Mecánica Cuántica pueden ser formulados en base a esta representación.

Un resultado importante de este operador esta resumido en el siguiente teorema.

**Teorema 2.2.1.** *Un operador  $\rho$  es la matriz densidad de un ensamble  $\{|\psi_i\rangle, p_i\}$  si y solo si satisface las condiciones:*

1.  $Tr(\rho) = 1$
2.  $\rho$  es un operador positivo

Como consecuencia de esto, se deriva otra propiedad de la matriz densidad:

$$Tr(\rho^2) \leq 1 \quad (2.8)$$

la igualdad en esta expresión se logrará únicamente si el sistema se encuentra en un estado puro (es decir, su estado  $|\psi\rangle$  se conoce exactamente), de lo contrario se trata de un estado mixto.

Se puede demostrar que si se tiene un observable del sistema Q, el valor de expectación del mismo es

$$\langle Q \rangle = Tr(\rho Q) \quad (2.9)$$

Pero en sistemas complejos, a veces interesa conocer alguna cantidad de un subsistema del mismo. la descripción de este subsistema será posible a través de la *matriz densidad reducida*. Para ejemplificar supongamos que el sistema total esta compuesto por dos subsistemas, A y B. La matriz densidad reducida del subsistema A se define según

$$\rho^A = Tr_B(\rho^{AB}) \quad (2.10)$$

donde  $\rho^{AB}$  es la matriz densidad del sistema completo. Si queremos conocer el valor de expectación de algún observable O que actúa únicamente en el subsistema A, tenemos que

$$\langle O \rangle = Tr_A(\rho_A O) \quad (2.11)$$

Al estudiar un determinado sistema multipartito, podemos encontrarnos con que  $Tr(\rho^2) = 1$  para la matriz densidad del sistema completo, pero que

esto no sea cierto para ninguna de sus partes por separado. Esto se traduce en que el sistema global se encuentra en un estado puro, mientras que ninguna de sus partes puede describirse a partir de un estado de esta característica. A partir de esta observación puede definirse el concepto de *entrelazamiento*. Decimos que un estado es entrelazado si el estado global del sistema es puro, pero los subsistemas se encuentran todos en estados mixtos. En función de la matriz densidad reducida, tendremos un estado entrelazado si  $\text{Tr}(\rho_{red}^2) < 1$  para todos los subsistemas.

## 2.3. Entropías

La entropía de un un sistema nos da una medida de cuánto conocemos del estado en que se encuentra. A nosotros nos interesan dos entropías, la *entropía de von Neumann* [13] y la *entropía lineal* del estado  $\rho$ , definidas según

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho) \quad (2.12)$$

y

$$S_{lin}(\rho) = 1 - \text{Tr}(\rho^2) \quad (2.13)$$

respectivamente.

Llamando  $\lambda_i$  a los autovalores de la matriz densidad, la ecuación (2.12) adopta la forma

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \quad (2.14)$$

Para aplicar esta última expresión, debemos recordar que  $\lim_{\lambda_i \rightarrow 0} (\lambda_i \log_2 \lambda_i) = 0$ , por lo tanto en el caso de tener autovalores nulos, la contribución de los mismo a la entropía será nula. Por su parte, la entropía lineal adopta la forma

$$S_{lin} = 1 - \sum_i \lambda_i^2 \quad (2.15)$$

Nos interesan las entropías definidas ya que sirven como medida de entrelazamiento. Observemos que si  $\text{Tr}(\rho_{red}^2) = 1$ , entonces necesariamente tenemos un único autovalor  $\lambda = 1$  y los demás nulos para  $\rho_{red}$  (Ver sección 2.2), lo cual se corresponde con  $S(\rho_{red}) = S_{lin}(\rho_{red}) = 0$ , mientras que si  $\text{Tr}(\rho_{red}^2) < 1$ , entonces los autovalores  $\lambda_i$  de  $\rho_{red}$  cumplen  $0 \leq \lambda_i < 1$ , lo cual se traduce en  $S(\rho_{red}) = S_{lin}(\rho_{red}) > 0$ . Por lo tanto, podemos afirmar que un estado esta entrelazado si la entropía de la matriz densidad reducida es

distinta de cero, mientras que si es nula tenemos un estado no entrelazado. Por último, es interesante remarcar que si contamos con un sistema bipartito, tendremos  $S(\rho_A) = S(\rho_B)$ .

## 2.4. Método variacional de Rayleigh-Ritz

A menudo nos encontramos con el problema de que la ecuación de Schrödinger estacionaria,  $H\psi = E\psi$ , del sistema con el que trabajamos no tiene solución exacta. El método variacional de Rayleigh-Ritz [14] nos permite encontrar autovectores y autovalores aproximados en dichas situaciones.

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

$$\phi = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i, \quad (2.16)$$

donde  $c_i$  son coeficientes complejos a ser determinados por el método.

Consideremos además un vector  $\mathbf{c}$  generado por los coeficientes  $c_i$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

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

$$E(\mathbf{c}) = \frac{\langle \phi_{\mathbf{c}} | H | \phi_{\mathbf{c}} \rangle}{\langle \phi_{\mathbf{c}} | \phi_{\mathbf{c}} \rangle}. \quad (2.18)$$

Lo que propone este método es encontrar condiciones sobre los coeficientes  $c_i$  tal que  $E(\mathbf{c})$  sea estacionaria. Para ello debemos pedir

$$\frac{\partial E}{\partial c_i}(\mathbf{c}) = \frac{\partial E}{\partial c_i^*}(\mathbf{c}) = 0, \quad (2.19)$$

donde  $c_i^*$  es el transpuesto complejo conjugado de  $c_i$ . Para profundizar un poco más en lo que esta condición implica, desarrollemos la ecuación (2.18). Tenemos

$$\langle \phi_{\mathbf{c}} | H | \phi_{\mathbf{c}} \rangle = \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i c_j \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle = \mathbf{c}^* \mathbf{H} \mathbf{c}, \quad (2.20)$$

y

$$\langle \phi_c | \phi_c \rangle = \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i c_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \mathbf{c}^* \mathbf{S} \mathbf{c}, \quad (2.21)$$

donde definimos las matrices autoadjuntas  $N \times N$

$$\mathbf{H}_{i,j} = \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{S}_{i,j} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle. \quad (2.23)$$

Desarrollando (2.19) obtenemos que los mínimos de  $E(\mathbf{c})$  se encuentran para

$$E(\mathbf{c}) = \varepsilon, \quad (2.24)$$

tal que se cumpla

$$\mathbf{H} \mathbf{c} = \varepsilon \mathbf{S} \mathbf{c}, \quad (2.25)$$

o, equivalentemente

$$\det(\mathbf{H} - \varepsilon \mathbf{S}) = 0. \quad (2.26)$$

Estos autovalores no son otra cosa que los autovalores de la restricción del Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  a un subespacio  $N$ -dimensional de  $\mathbf{H}$ , generado por el conjunto de funciones  $\varphi_i$ . Suponiendo ahora que  $\bar{E}_n$ ,  $n=1,2,\dots,M$ , son los autovalores del sistema, los ordenamos en orden no creciente,  $\bar{E}_1 \leq \bar{E}_2 \leq \dots \leq \bar{E}_M$ . Haciendo lo mismo con las soluciones de (2.26),  $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots \leq \varepsilon_N$ , se cumple

$$\varepsilon_1 \geq \bar{E}_1, \quad \varepsilon_2 \geq \bar{E}_2, \quad \dots, \quad \varepsilon_N \geq \bar{E}_N, \quad (2.27)$$

y que los autovectores de (2.26), 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  $E_i \leq \varepsilon_i \leq E_{i+1}$ .

Es decir, lo que nos permite este método es resolver la ecuación de Schrödinger en un subespacio del espacio de Hilbert del sistema; mientras mayor sea la dimensión de este subespacio, mejor será la aproximación lograda. Cabe aclarar que la solución obtenida es una buena aproximación a la solución exacta siempre que la elección de las funciones  $\varphi_i$  respete las simetrías del problema.

## 2.5. Evolución temporal

Nos interesa comparar resultados obtenidos mediante el método variacional descrito en la sección anterior con resultados obtenidos haciendo

evolucionar el sistema en el tiempo. Para ello necesitamos obtener la evolución temporal de algún estado inicial  $\Psi_0$ , que en sistemas para los cuales el Hamiltoniano es independiente del tiempo, esta dada por

$$\Psi(t, x_1, \dots, x_N) = e^{-iHt/\hbar} \Psi_0(x_1, \dots, x_N) \quad (2.28)$$

donde  $U = e^{-iHt/\hbar}$  es el operador unitario de evolución y  $H$  el Hamiltoniano del sistema.

A continuación abordaremos el problema de cómo aplicar el operador evolución, considerando por separados sistemas de una y dos partículas.

### 2.5.1. Sistemas de una partícula

Si el paso temporal de evolución ( $\Delta t$ ) es chico, podemos aproximar al operador evolución por su desarrollo en serie de Taylor en  $t$ :

$$e^{-iH\Delta t} = 1 - iH\Delta t + O(\Delta t^2) \quad (2.29)$$

y a primer orden en  $t$  tenemos

$$\Psi(\Delta t, x) = (1 - iH\Delta t)\Psi_0(x) \quad (2.30)$$

Aplicando el operador  $(1 - iH\Delta t)$  sucesivamente, podemos obtener el estado del sistema en función del tiempo. El problema con esta aproximación es que este operador, a diferencia de  $U$ , no es unitario, lo que conlleva a que no se conserve la norma del estado inicial. Una alternativa a esto es la aproximación de Cayley para el operador evolución:

$$U(t + \Delta t, t) = \frac{1 - \frac{i\Delta t}{2} H_D}{1 + \frac{i\Delta t}{2} H_D} \quad (2.31)$$

Donde  $H_D$  es el Hamiltoniano discretizado. Esta aproximación también se conoce como de Crank-Nicholson [15]. Esta representación es unitaria y exacta a segundo orden en las coordenadas espaciales y temporales. Para el estado del sistema tenemos entonces

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{2} H_D\right) \Psi(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2} H_D\right) \Psi(x, t). \quad (2.32)$$

Para obtener un método de aproximación explícito, es conveniente resolver para  $\Psi(x, t + \Delta t)$ , para ello seguimos el procedimiento sugerido en [16]. Consideremos una grilla espacial con separación  $\Delta x = (x_{max} - x_{min})/N$ , y

sobre la misma definimos el vector  $\vec{\Psi}^n = (\Psi_1^n, \dots, \Psi_N^n)$  donde  $\Psi_j^n = \Psi(x_j, t_n)$ . Tenemos entonces

$$\vec{\Psi}^{n+1} = D_2^{-1} D_1 \vec{\Psi}^n \quad (2.33)$$

donde definimos

$$D_1 = \left( 1 - \frac{i\Delta t}{2} H_D \right) \quad D_2 = \left( 1 + \frac{i\Delta t}{2} H_D \right) \quad (2.34)$$

La ventaja de este método es que los Hamiltonianos con los cuales trabajaremos son tales que las matrices  $D_1$  y  $D_2$  son tridiagonales. Esto es importantes, ya que gracias a esa propiedad la inversión de  $D_2$  es simple de computar.

### 2.5.2. Inversión de una matriz tridiagonal

Consideremos una matriz tridiagonal, no singular,  $N \times N$

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & c_{N-2} & a_{N-1} & b_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{N-1} & a_N \end{pmatrix}$$

En [17] encontramos que los elementos de matriz para la inversa de  $D$  están dados por

$$D_{ij}^{-1} = \begin{cases} (-1)^{i+j} b_i \dots b_{j-1} \theta_{i-1} \phi_{j+1} / \theta_N & \text{si } i \leq j \\ (-1)^{i+j} c_j \dots c_{i-1} \theta_{j-1} \phi_{i+1} / \theta_N & \text{si } i > j \end{cases} \quad (2.35)$$

donde  $\theta_i$  y  $\phi_i$  satisfacen las relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} \theta_0 &= 1 \\ \theta_1 &= a_1 \\ \theta_i &= a_i \theta_{i-1} - b_{i-1} c_{i-1} \theta_{i-2} \quad i = 2, \dots, N \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \phi_{N+1} &= 1 \\ \phi_N &= a_N \\ \phi_i &= a_i \phi_{i+1} - b_i c_i \phi_{i+2} \quad i = N-1, \dots, 2 \end{aligned} \quad (2.37)$$

### 2.5.3. Sistemas de dos partículas

El método descrito anteriormente para sistemas de una partícula, si bien es válido para sistemas de dos partículas, requiere un gran gasto computacional ya que las matrices con que se trabajan pasan a ser  $N^2 \times N^2$ , número significativamente grande si consideramos que en el caso de una partícula trabajamos con  $N$  entre 300 y 500. Por lo tanto, en este caso vamos a trabajar con la serie de Taylor del operador  $U$ ,  $U = 1 - i\Delta t H_D$ . Esta aproximación también es exacta a segundo orden, pero tiene el problema de no ser unitaria, como dijimos anteriormente. Para poder proceder entonces, deberemos normalizar la función de onda del sistema luego de cada evolución en  $\Delta t$ , y evolucionar en el siguiente paso la función normalizada, forzando así la conservación de la norma.

## 2.6. Probabilidad de Supervivencia

En el estudio de sistemas dinámicos, una cantidad que resulta de gran utilidad es la probabilidad de encontrar al sistema, en una medición a tiempo  $t$ , en el estado  $\psi$  en que se encontraba en  $t = 0$ . Es decir, nos interesa evaluar la probabilidad de que la situación física del sistema no varíe en el intervalo temporal  $(0, t)$ . Matemáticamente, esta probabilidad puede expresarse según

$$P(t) = |A(t)|^2 \quad (2.38)$$

donde

$$A(t) = \langle \psi | e^{-iHt} \psi \rangle \quad (2.39)$$

siendo  $H$  el Hamiltoniano que gobierna la evolución del sistema en el tiempo.

Nos interesa a partir de el estudio de esta cantidad poder encontrar la energía de el/los estados resonantes que pueda presentar un determinado sistema. En [3] se estudió el comportamiento de  $P(t)$  para varios regímenes temporales en sistemas inestables. Las únicas restricciones realizadas sobre los sistemas para este estudio son que el espectro del Hamiltoniano sea acotado por debajo, y que la condición inicial este normalizada. Los resultados de este trabajo pueden resumirse en los siguientes items.

1. Tiempos cortos: Para tiempos cortos, se tiene que  $P(t)$  es mayor que cualquier exponencial que decae, es decir

$$\lim_{t \rightarrow 0} (P(t)) > e^{-t/\tau} \quad (2.40)$$

siendo  $\tau$  algún tiempo característico del sistema. Además, se tiene que la derivada de  $P(t)$  en  $t = 0$  se anula. En este régimen el decaimiento esta dominado por la Regla de Oro de Fermi.

## 2. Tiempos largos:

Como consecuencia del lema de Riemann-Lebesgue:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (A(t)) = 0 \quad (2.41)$$

se obtiene que  $P(t)$  se anula para tiempos grandes.

## 3. Tiempos intermedios:

Este régimen está gobernado por dos comportamientos. Para  $A(t)$  tenemos

$$A(t) \sim C e^{-iE_r t} e^{-\Gamma t/2} + D e^{-iE_{min} t} t^{l+3/2} \quad (2.42)$$

donde  $E_{min}$  es el mínimo del espectro y  $l$  el número cuántico correspondiente al momento angular del estado.

El segundo término de (2.42) predomina para tiempos más largos, siendo antes el decaimiento puramente exponencial. Para tiempos intermedios dentro de este régimen se observa interferencia entre los dos términos. En [18] se observó dicha interferencia al realizar un cálculo computacional en un sistema con solución exacta. En la figura (2.2) vemos una reproducción del resultado obtenido en éste trabajo.

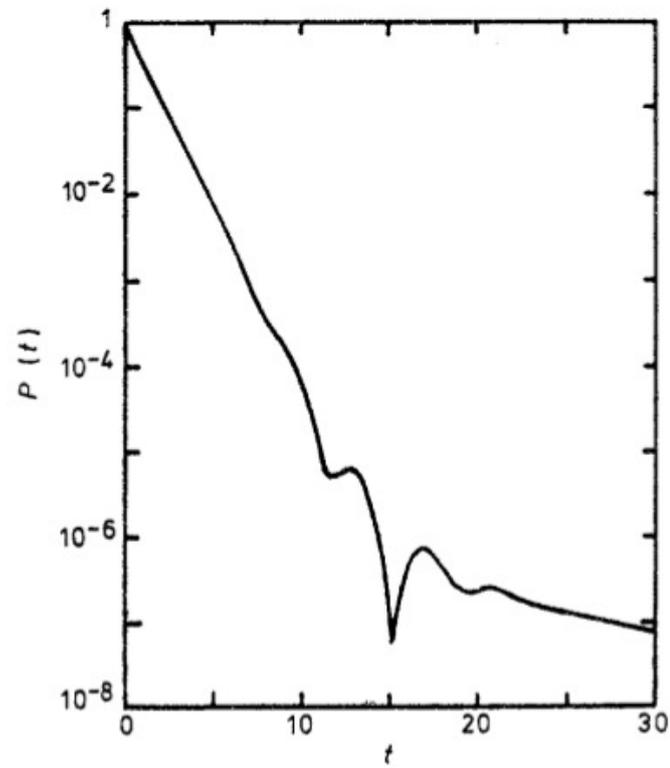


Figura 2.2: Probabilidad de supervivencia en función del tiempo, en la región de interferencia entre los comportamientos exponencial y de potencias de  $t$ . [18]

# Capítulo 3

## Helio esférico

Este capítulo está dedicado a reproducir algunos resultados del trabajo [8], en que se trabajó con el modelo del helio esférico para estudiar el comportamiento de la entropía de von Neumann cerca de la ionización del sistema. El objetivo de esto es implementar algunos programas de cálculo utilizando como control un problema del cual se conocen los resultados buscados, para así cerciorarnos del buen funcionamiento de los mismos. Tanto el cálculo analítico necesario para obtener los elementos de matriz utilizados por el método variacional, así como los algoritmos numéricos que los evalúan y obtienen los autovalores y autofunciones aproximadas fueron hechos durante la realización del trabajo.

### 3.1. El modelo

En el modelo de Helio esférico se reemplaza la repulsión Coulombiana de los electrones,  $1/|r_1 - r_2|$ , por el promedio esférico  $1/r_>$ , donde  $r_> = \max(r_1, r_2)$ . Si además aplicamos la transformación  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}/Z$  y  $H \rightarrow Z^2 H$ , el Hamiltoniano en unidades atómicas adopta la forma

$$H = h(1) + h(2) + \lambda V, \quad (3.1)$$

donde

$$h(i) = \frac{1}{2} p_i^2 - \frac{1}{r_i}, \quad \lambda = \frac{1}{Z}, \quad V = \frac{1}{r_>}. \quad (3.2)$$

Aquí  $p_i$  y  $r_i$  son los operadores momento y posición de los electrones  $i = 1, 2$  y  $Z$  es la carga nuclear. De ahora en adelante trabajaremos siempre en estas unidades adimensionales.

Si estas partículas son fermiones de spin  $1/2$ , el espacio de Hilbert total del sistema es el producto entre el espacio de Hilbert de spin y el espacio

de Hilbert espacial, y las funciones de onda deben ser antisimétricas ante permutación de las partículas. Es decir, las autofunciones del Hamiltoniano (3.1) son de la forma

$$\Psi(1, 2) = \Phi_{S/A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{sing/trip}, \quad (3.3)$$

donde la función de onda espacial  $\phi_S$  ( $\phi_A$ ) es simétrica (antisimétrica) y  $\chi_{sing}$  y  $\chi_{trip}$  son los estados de spin singlete (antisimétrico) y triplete (simétrico) respectivamente. Nos interesa particularmente el estado fundamental del sistema, que será de la forma

$$\Psi_0(1, 2) = \Phi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{sing}, \quad (3.4)$$

donde  $\Phi_0$  es simétrica ante permutación de partículas. Si contamos con simetría esférica de nuestro Hamiltoniano, entonces las autofunciones espaciales solo tendrán dependencia radial,  $\Phi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_0(r_1, r_2, r_{1,2})$ , donde  $r_{1,2}$  es la distancia entre las partículas; si además tenemos en cuenta que esta aproximación esférica presenta la característica  $[H, L_i^2] = 0$ , con  $i = 1, 2$ , entonces la dependencia en la distancia entre partículas desaparece y, por lo tanto, podemos expandir a nuestra función en una base completa de funciones de la forma:

$$\Phi_0(r_1, r_2) = \sum_{m,n}^{\infty} C_{m,n} \varphi_{m,n}(r_1, r_2). \quad (3.5)$$

En el trabajo citado se tomó como base ortonormal al conjunto

$$\varphi_{m,n}(r_1, r_2) = \epsilon_{m,n} [\phi_m(r_1) \phi_n(r_2) + \phi_n(r_1) \phi_m(r_2)], \quad (3.6)$$

con

$$\phi_m(r) = \sqrt{\frac{\beta^3}{4\pi(m+1)(m+2)}} e^{-\beta r/2} L_m^{(2)}(\beta r), \quad (3.7)$$

aquí  $\beta$  es un parámetro variacional no lineal,  $L_m^{(2)}$  son los polinomios de Laguerre y:

$$\epsilon_{m,n} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } m = n \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{si } m \neq n. \end{cases} \quad (3.8)$$

Si utilizamos una base de  $N$  funciones  $\phi_m$ , es decir, si  $N$  es el valor máximo de los parámetros  $m$  y  $n$  en las ecuaciones anteriores, entonces tendremos, una vez aplicado el método, una aproximación para los primeros  $(N+1)(N+2)/2$  autoestados y autofunciones de la misma simetría.

Para proceder con el método de Rayleigh-Ritz, descrito en la sección (2.4), debemos en primer lugar encontrar los elementos de matriz  $H_{m,n,m',n'} =$

$\langle \varphi_{m,n} | H | \varphi_{m',n'} \rangle$  del Hamiltoniano. Trabajando sobre esta expresión, encontramos que

$$H_{m,n,m',n'} = 2\epsilon_{m,n}\epsilon_{m',n'}[h_{m,m'}\delta_{n,n'} + h_{n,n'}\delta_{m,m'} + h_{m,n'}\delta_{n,m'} + h_{n,m'}\delta_{m,n'} + \lambda V_{m,n,m',n'} + \lambda V_{m,n,n',m'}], \quad (3.9)$$

donde  $h_{m,n} = \langle \phi_m | h | \phi_n \rangle$  y  $V_{m,n,m',n'} = \langle \phi_m \phi_n | 1/r > | \phi_{m'} \phi_{n'} \rangle$ . Para el calculo de estos elementos se recurrió a [9] donde están tabuladas todas las integrales necesarias. Lo que se obtuvo es:

$$h_{\bar{m},\bar{n}} = T_{\bar{m},\bar{n}} + W_{\bar{m},\bar{n}} \quad (3.10)$$

donde

$$\begin{aligned} T_{\bar{m},\bar{n}} = & \frac{\beta^2}{\sqrt{\bar{m}(\bar{m}+1)\bar{n}(\bar{n}+1)}} \left( \frac{1}{8} \bar{m}(\bar{m}+1)\delta_{\bar{m},\bar{n}} \right. \\ & + \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{\bar{m}-1} \sum_{j=0}^{\bar{n}-2} \frac{(-1)^{i+j}(\bar{m}+1)!(\bar{n}+1)!(i+j+2)!}{i!j!(\bar{m}-1-i)!(i+2)!(\bar{n}-2-j)!(j+3)!} \\ & + \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{\bar{m}-2} \sum_{j=0}^{\bar{n}-1} \frac{(-1)^{i+j}(\bar{m}+1)!(\bar{n}+1)!(i+j+2)!}{i!j!(\bar{m}-2-i)!(i+3)!(\bar{n}-1-j)!(j+2)!} \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{\bar{m}-2} \sum_{j=0}^{\bar{n}-2} \frac{(-1)^{i+j}(\bar{m}+1)!(\bar{n}+1)!(i+j+2)!}{i!j!(\bar{m}-2-i)!(i+3)!(\bar{n}-2-j)!(j+3)!} \right) \quad (3.11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{\bar{m},\bar{n}} = & \frac{-\beta}{\sqrt{\bar{m}(\bar{m}+1)\bar{n}(\bar{n}+1)}} \sum_{i=0}^{\bar{m}-1} \sum_{j=0}^{\bar{n}-1} \\ & \frac{(-1)^{i+j}(\bar{m}+1)!(\bar{n}+1)!(i+j+1)!}{i!j!(\bar{m}-1-i)!(i+2)!(\bar{n}-1-j)!(j+2)!}, \quad (3.12) \end{aligned}$$

mientras que los elementos de matriz del potencial de interacción adoptan la forma

$$\begin{aligned} V_{\bar{m},\bar{n},\bar{m}',\bar{n}'} = & \frac{\beta}{\sqrt{\bar{m}(\bar{m}+1)\bar{n}(\bar{n}+1)\bar{m}'(\bar{m}'+1)\bar{n}'(\bar{n}'+1)}} \quad (3.13) \\ & \sum_{s=0}^{\bar{m}-1} \sum_{t=0}^{\bar{n}-1} \sum_{u=0}^{\bar{m}'-1} \sum_{v=0}^{\bar{n}'-1} I_{s+u,t+v}^{(>)} \frac{(-1)^{s+t+u+v}}{s!t!u!v!} \times \\ & \binom{\bar{m}+1}{\bar{m}-s-1} \binom{\bar{n}+1}{\bar{n}-t-1} \binom{\bar{m}'+1}{\bar{m}'-u-1} \binom{\bar{n}'+1}{\bar{n}'-v-1}, \end{aligned}$$

donde

$$I_{i,j}^{(>)} = \frac{i!(j+1)!(2^{i+1}-1)}{2^{i+1}} + j! \sum_{k=1}^j \frac{(k+i)!2^{-k-i-1}(1-\frac{j+1}{k})}{(k-1)!}.$$

Cabe aclarar que en las expresiones anteriores los índices  $\bar{m}, \bar{n}, \bar{m}', \bar{n}'$  van de 1 a  $N+1$  si queremos trabajar con  $n, m, n', m'$  de 0 a  $N$ . Las expresiones fueron redefinidas de esta manera por conveniencia computacional.

Con estos elementos de matriz se procede a generar la matriz del Hamiltoniano y obtener sus autovalores y autofunciones utilizando las rutinas *tred2* y *tqli* del libro *Numerical Recipes* [10]. La primera se utiliza para llevar la matriz simétrica del Hamiltoniano a una matriz tridiagonal, y la segunda para encontrar los autovalores y autovectores de ésta última.

## 3.2. Resultados

En [8] se estudió, principalmente, la entropía de von Neumann del sistema en función del parámetro  $\lambda$  que regula al potencial de interacción entre los electrones. Por otro lado, en [7] se analizan otras características del sistema allí planteado que, si bien no es el mismo, sirve para una comparación cualitativa.

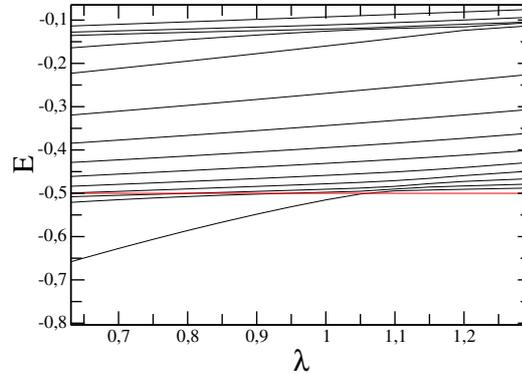


Figura 3.1: Autovalores variacionales en función del parámetro  $\lambda$ . La línea roja corresponde al umbral de ionización del sistema,  $\varepsilon = -0,5$

Comenzaremos analizando el espectro del Hamiltoniano en función de  $\lambda$  (Fig. (3.1)), gráfico analizado en [7]. La presencia de resonancias se hace presente en el gráfico (3.1) a través de lo que se conoce como cruces evitados (*avoided crossings*), esto es, la curvatura pronunciada en los autovalores que

evita que los mismos se crucen. Estas curvaturas “envuelven” lo que sería la parte real de la energía del estado resonante en función de  $\lambda$  ( $E_r(\lambda)$ ).

Realizando un zoom al espectro, podemos ver más claramente a que nos referimos al hablar de cruces evitados (Ver figura. 3.2). Aquí vemos como los autovalores variacionales se curvan al avanzar en  $\lambda$  para evitar cruzarse. Vemos además en la curva verde una representación de  $E_r(\lambda)$ ; se puede apreciar como es rodeada por los cruces evitados. Vale aclarar que esta curva no fue calculada, sino que se copió el resultado obtenido en [8] mediante complex scaling.

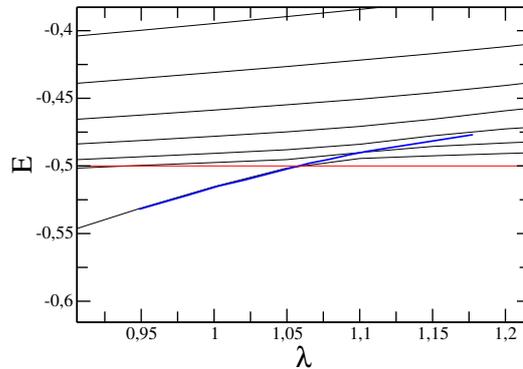


Figura 3.2: Zoom de la figura (3.1). En azul una representación  $E_r(\lambda)$

En la figura (3.3) vemos el comportamiento de la entropía de von Neumann del estado fundamental aproximado en función de  $\lambda$ , para distintos tamaños de la base de autofunciones. Esta entropía corresponde a una partícula, y fue calculada con la matriz densidad reducida del sistema. En primer lugar, podemos observar en este gráfico cómo las curvas convergen a medida que aumentamos  $N$ ; esto obedece a que la aproximación mejora para mayores tamaños de la base. El comportamiento que presenta la entropía de von Neumann puede entenderse de la siguiente manera: cuando  $\lambda \rightarrow 0$  los electrones son independientes, ya que la interacción Coulombiana tiende a cero. En esta situación la función de onda espacial puede escribirse como un producto, dando  $S^{(N)} = 0$ . Por otro lado, cuando  $\lambda \geq \lambda_c$  el sistema está compuesto por un electrón ligado a la carga central, y el otro no ligado, siendo por lo tanto la función de onda espacial un producto simetrizado de funciones de onda de un electrón, con lo cual se obtiene  $S = S_c = 1$ .

El análisis previamente realizado se basa en el estudio del comportamiento de los dos autovalores más grandes de la matriz densidad reducida. Vemos en la figura (3.4) que para  $\lambda \rightarrow 0$  hay un solo autovalor distinto de cero para  $\rho_{red}$ ,  $\Lambda_1^{(N)} \rightarrow 1$ , con lo cual es claro que  $S^{(N)} = \log_2(1) = 0$ , mientras que

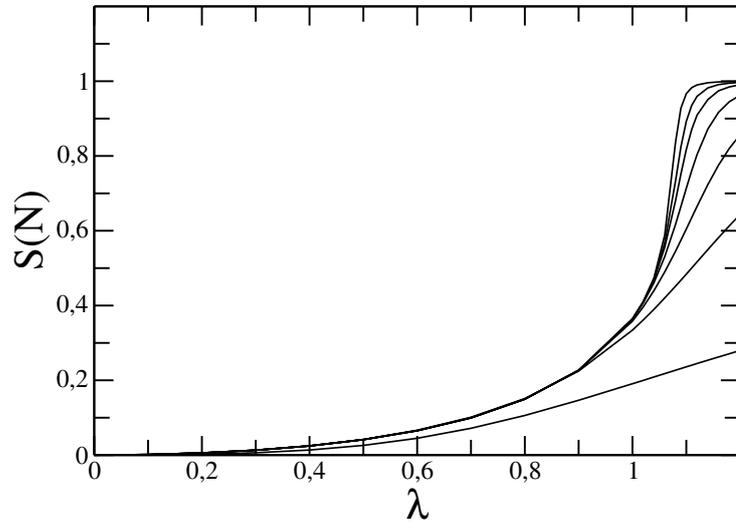


Figura 3.3: Entropía de von Neumann de una partícula en función de  $\lambda$ , para distintos tamaños de base. De abajo a arriba  $N=2,4,6,8,10,12,16$ .

para  $\lambda \geq \lambda_c$  tenemos un estado degenerado con  $\Lambda_1^{(N)} = \Lambda_2^{(N)} \rightarrow 1/2$ , lo que nos da una entropía  $S^{(N)} = -\log_2(1/2) = 1$ .

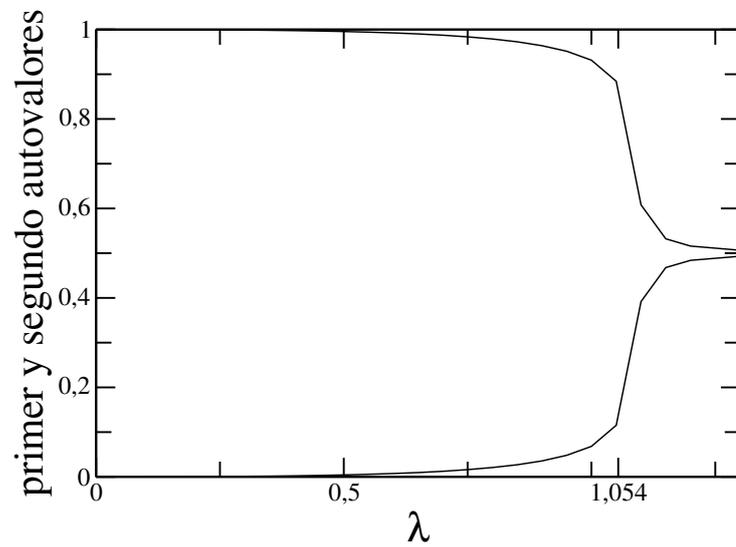


Figura 3.4: Primer y segundo autovalor de la matriz densidad reducida en función del parámetro  $\lambda$ , para  $N=15$ .

Siguiendo con los análisis realizados en [7], y aplicándolos al Helio esférico,

se estudió el comportamiento de los dos primeros autovalores variacionales en función del parámetro variacional  $\beta$ . Las figuras (3.5) muestran los resultados obtenidos. En (a) podemos ver el comportamiento del menor autovalor; vemos que el comportamiento puede dividirse en dos regiones, la primera en la cual  $E_1^{(\beta)}$  es prácticamente insensible al cambio en el parámetro variacional, y otra región en que el valor de  $E_1^{(\beta)}$  depende más claramente de  $\beta$ , y se desdobra en rectas de distintas pendientes. En el trabajo citado se muestra, utilizando el método de *complex scaling*, que el cambio de pendiente se da alrededor de  $E_r(\lambda)$ . Para el segundo autovalor,  $E_2^{(\beta)}$  podemos observar en (b) que tenemos tres regiones distintas; en cada una de ellas el autovalor en función de  $\lambda$  es también una línea recta, y cambia de pendiente al pasar de una a la otra. Se puede observar también que, para un valor fijo de  $\lambda$ , la densidad de niveles en función de la energía no es constante, a pesar que las curvas corresponden a valores de  $\beta$  equiespaciados.

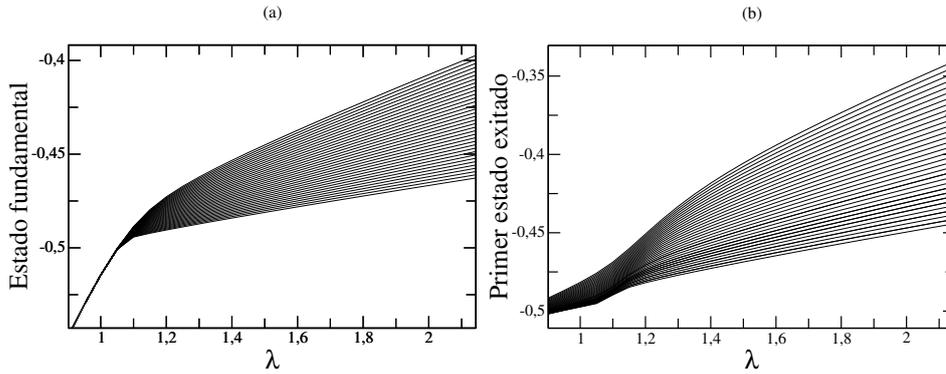


Figura 3.5: Primer y segundo autovalor de la matriz densidad reducida en función del parámetro  $\lambda$ , para  $N=15$ . De abajo a arriba  $\beta$ , el parámetro variacional no lineal, adopta valores equiespaciados por  $\delta\beta = 0,05$ . Así,  $\beta$  va desde 1,3 hasta 3,8.

Por ultimo, en las figuras (3.6) y (3.7) vemos el comportamiento de la entropía lineal y el valor de expectación del potencial de interacción, calculados para los primero cuatro autoestados variacionales del sistema. El significado de estas curvas fue analizado en [11]. Brevemente, podemos decir que cuando se analiza un sistema en el cual solo se considera un estado ligado y espectro continuo, se observa una discontinuidad en la derivada de la entropía, analizada anteriormente para la figura (3.3). Pero si consideramos además estados resonantes, éstos mantienen a los dos electrones ligados aún cuando la energía del sistema supera la energía de ionización, por un tiempo inverso a la parte imaginaria de la energía de estos estados. Esto se ve representa-

do en los mínimos que presenta la entropía lineal para los primeros estados excitados. En [11] se sugiere además que es posible encontrar una función suave  $S[E_r(\lambda)]$  que interpole los mínimos de la entropía para los distintos autoestados del sistema.

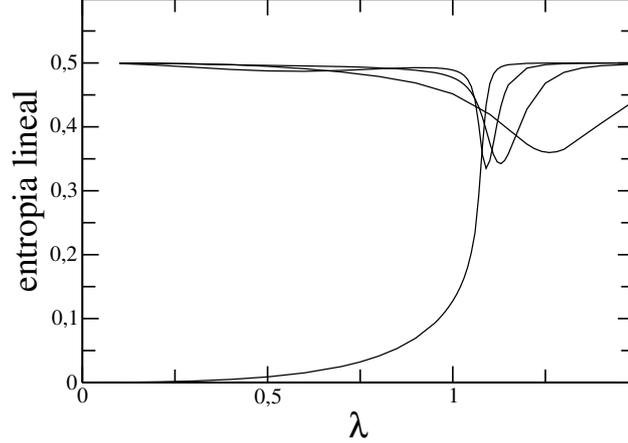


Figura 3.6: Entropía lineal en función del parámetro  $\lambda$ , calculada para los primeros cuatro estados variacionales del sistema. La entropía correspondiente al estado fundamental comienza en su mínimo valor posible y crece abruptamente alrededor de  $\lambda_c = 1,054$ , mientras que las demás, correspondientes a las autofunciones  $\psi_j$   $j = 1, 2, 3$ , presentan un mínimo en  $\lambda_j$ . Se tiene que si  $i < j$  entonces  $\lambda_i < \lambda_j$ .

La figura (3.7) muestra el comportamiento del valor de expectación del potencial de interacción, calculado también con los primeros cuatro autoestados variacionales del sistema.

El comportamiento opuesto que se puede observar entre esta cantidad y la entropía lineal (figura 4.2) fue observado previamente en sistemas con interacción Coulombiana entre las partículas [19, 20]. Al igual que en el caso de la entropía, en este caso hay una función que interpola los máximos de las distintas curvas. Esta función está dada por el teorema de Hellman-Feynman

$$\frac{\partial E}{\partial \varepsilon} = \langle \psi | \frac{\partial H_\varepsilon}{\partial \varepsilon} | \psi \rangle \quad (3.14)$$

donde  $\psi$  corresponde a alguna autofunción normalizada del sistema y  $\varepsilon$  es un parámetro del mismo. En este caso, si consideramos a la variable  $\varepsilon = \lambda$ , tenemos que

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \psi | U(r_1, r_2) | \psi \rangle \quad (3.15)$$

La referencia [7] muestra que ésto resulta una aproximación muy buena para los primeros autoestados si se toma  $E = E_r$  y  $\psi$  son los autovalores variacionales obtenidos.

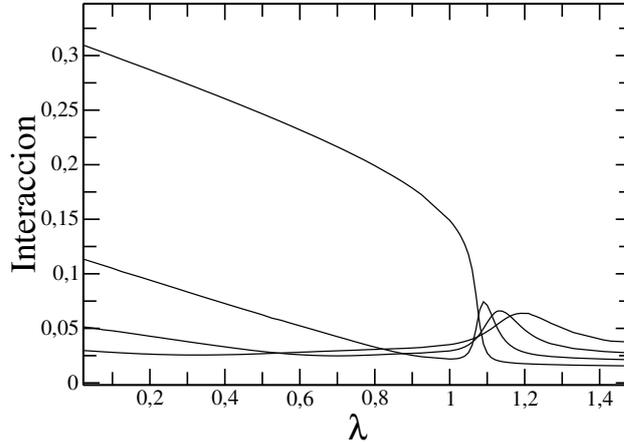


Figura 3.7: Valor de expectación del potencial de interacción,  $\langle \frac{1}{r} \rangle$ , en función del parámetro  $\lambda$ , calculada para los primeros cuatro estados vacacionales del sistema. Para el estado fundamental  $\psi_0$  comienza en un valor máximo para disminuir rápidamente alrededor de  $\lambda_c = 1,045$ . Las curvas correspondientes a las autofunciones  $\psi_j$   $j = 1, 2, 3$ , presentan un máximo en  $\lambda_j$ . Se tiene que si  $i < j$  entonces  $\lambda_i < \lambda_j$ .

En la reproducción realizada sobre estos trabajos se obtuvieron gráficos cualitativamente similares, lo que nos lleva a afirmar un buen funcionamiento de los programas realizados. Además, el análisis expuesto anteriormente nos va a permitir identificar las resonancias existentes aún sin utilizar métodos como complex scaling, ya que fue probado en los trabajos citados que las partes real e imaginaria de la energía del estado resonante se hacen evidentes en el comportamiento de los gráficos obtenidos.

En lo siguiente nos interesa comparar escenarios de solución variacional con escenarios de solución dinámica. Debido a las dificultades numéricas que presenta la evolución temporal de un estado inicial en una grilla cuando se tienen potenciales divergentes (como lo es, por ejemplo, Coulomb en  $r = 0$ ), vamos a trabajar con potenciales finitos y funciones de onda que se anulen en el origen de coordenadas. En el caso variacional esto no presenta mayores dificultades ya que los programas implementados para el Helio Esférico serán de utilidad modificando únicamente las expresiones de los elementos de matriz de la energía potencial.



# Capítulo 4

## Modelo de dos partículas

Consideramos ahora un sistema de dos partículas idénticas, en el cual el Hamiltoniano toma la forma

$$H = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{1}{2} \vec{p}_i^2 + V(\vec{r}_i) \right) + \lambda U(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4.1)$$

donde

$$V(\vec{r}_i) = \begin{cases} -u & \text{si } r_i \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r_i > r_0, \end{cases} \quad (4.2)$$

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{-\alpha|r_1-r_2|}. \quad (4.3)$$

Primero abordaremos el problema variacionalmente, y luego lo haremos mediante la evolución dinámica del mismo.

### 4.1. Método espectral

Nos interesa resolver el Hamiltoniano (4.1) utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz. Para ello procederemos de la misma manera descrita en la sección (3.1), es decir, utilizaremos las mismas autofunciones (3.6), pero utilizando los elementos de matriz del nuevo Hamiltoniano. Comparando con la ecuación (3.1) vemos que los elementos de matriz que cambian son los correspondientes a la energía potencial de una partícula y el potencial de interacción. Calculando entonces

$U_{m,n,n',m'} = \langle \phi_m \phi_n | U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_{m'} \phi_{n'} \rangle$  y  $V_{m,n} = \langle \phi_m | V(\vec{r}) | \phi_n \rangle$  obtenemos

$$U_{m,n,m',n'} = \frac{1}{\sqrt{m(m+1)n(n+1)m'(m'+1)n'(n'+1)}} \sum_{s=0}^{m-1} \sum_{t=0}^{n-1} \sum_{u=0}^{m'-1} \sum_{v=0}^{n'-1} \frac{(-1)^{s+t+u+v}}{s!t!u!v!} \binom{m+1}{m-s-1} \binom{n+1}{n-t-1} \binom{m'+1}{m'-u-1} \binom{n'+1}{n'-v-1} I_{s+u,t+v}^{(>)} \quad (4.4)$$

donde

$$I_{i,j}^{(>)} = \frac{(i+1)!(j+1)!}{(1-\alpha/\beta)^{j+2}(1+\alpha/\beta)^{i+2}} + \sum_{k=0}^{j+1} \frac{(j+i)!(i+k+1)!2^{-k-i-2}}{k!} \left[ \frac{1}{(1+\alpha/\beta)^{j+2-k}} - \frac{1}{(1-\alpha/\beta)^{j+2-k}} \right], \quad (4.5)$$

para el potencial de interacción y

$$V_{m,n} = \frac{-u}{n(n+1)m(m+1)} \sum_{p=0}^{m-1} \sum_{q=0}^{n-1} \frac{(-1)^{p+q}(n+1)!(m+1)!(p+q+2)!}{p!q!(m-p-1)!(n-q-1)!(p+2)!(q+2)!} \times \left[ 1 - \sum_{k=0}^{p+q+2} \frac{e^{-\beta r_0} (\beta r_0)^k}{k!} \right]. \quad (4.6)$$

Con estos elementos de matriz, los elementos de matriz del Hamiltoniano están dados por

$$H_{m,n,m',n'} = 2\epsilon_{m,n}\epsilon_{m',n'} [h'_{m,m'}\delta_{n,n'} + h'_{m,n'}\delta_{n,m'} + h'_{n,m'}\delta_{m,n'} + h'_{n,n'}\delta_{m,m'} + \lambda V_{m,n,m',n'} + \lambda V_{m,n,n',m'}], \quad (4.7)$$

donde

$$h'_{m,n} = h_{m,n} + V_{m,n}, \quad (4.8)$$

y  $h_{m,n}$  esta dado por (3.11).

## 4.2. Método dinámico

Si contamos con un Hamiltoniano independiente del tiempo, como el propuesto en la ecuación (4.1), tenemos que si a tiempo  $t = 0$  el sistema esta en

algún estado  $\varphi_0$ , entonces para un tiempo  $t = t^*$  tendremos

$$\varphi_{t^*} = e^{-iHt^*/\hbar}\varphi_0. \quad (4.9)$$

Siguiendo el procedimiento descrito en (2.5.3), para la discretización del Hamiltoniano utilizado, resulta

$$\begin{aligned} H_D\varphi(r_1^i, r_2^j, t) = & \varphi(r_1^{i+1}, r_2^j, t)\alpha_i + \varphi(r_1^{i-1}, r_2^j, t)\beta_i + \varphi(r_1^i, r_2^{j+1}, t)\alpha_j \\ & + \varphi(r_1^i, r_2^{j-1}, t)\beta_j + \varphi(r_1^i, r_2^j, t)\sigma_{ij}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_i &= -\frac{1}{2i\Delta x} - \frac{1}{2(\Delta x)^2}, \\ \beta_i &= \frac{1}{2i\Delta x} - \frac{1}{2(\Delta x)^2}, \\ \sigma_{ij} &= \frac{2}{(\Delta x)^2} + V(r_1^i) + V(r_2^j) + U(r_1^i, r_2^j). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Haciendo evolucionar la condición inicial, podemos obtener la entropía y la probabilidad de supervivencia del sistema en función del tiempo.

### 4.3. Resultados

#### Método variacional

Trabajamos con el Hamiltoniano (4.1) con parámetros  $r_0 = 6$ ,  $\alpha = 0,25$  y  $u = 0,3$ , variando según el caso los parámetros  $\lambda$  y  $\beta$ .

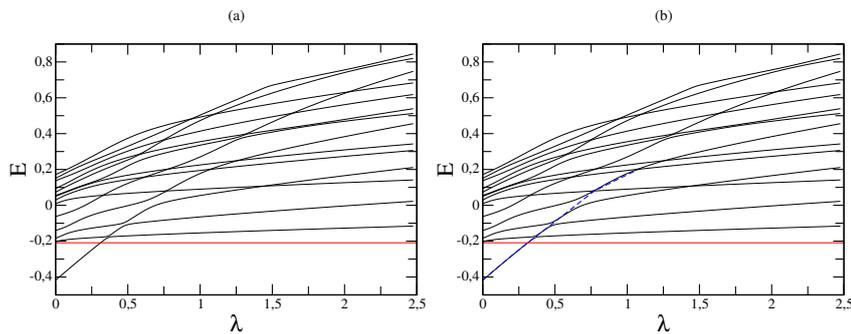


Figura 4.1: (a) Espectro variacional en función de  $\lambda$ , para el Hamiltoniano (4.1). (b) Lo mismo que en (a), la línea azul representa la parte real de la energía del estado resonante.

Para esta configuración, con  $\beta = 2,5$ , la figura (4.1) muestra el espectro variacional en función de  $\lambda$ . Se pueden observar en esta figura cruces evitados, tanto los generados por el estado ligado que entra al continuo en  $\lambda_c \sim 0,31$ , como otros generados por otros estados, y que corresponden por lo tanto a otras resonancias. Nos interesa ahora trabajar con la resonancia correspondiente al único estado ligado que presenta el sistema cuando  $\lambda < \lambda_c$ . En (b) vemos una representación del comportamiento de  $E_r(\lambda)$ , basada en los resultados obtenidos en [7]. Los cruces evitados que coinciden con esta curva son los que corresponden a dicha resonancia. Es importante aclarar que la curva  $E_r(\lambda)$  es una mera interpolación de los cruces evitados, y no se deriva de ningún cálculo.

En la figura (4.2) vemos el comportamiento de la entropía lineal para los primeros cuatro autoestados variacionales. La interpretación para el comportamiento observado es la dada en el capítulo (3) al discutir el Helio esférico. Como ya dijimos, la literatura sugiere que se puede encontrar una función suave que interpole los mínimos para las distintas entropías; la curva naranja en esta figura es una representación de cómo sería esta función.

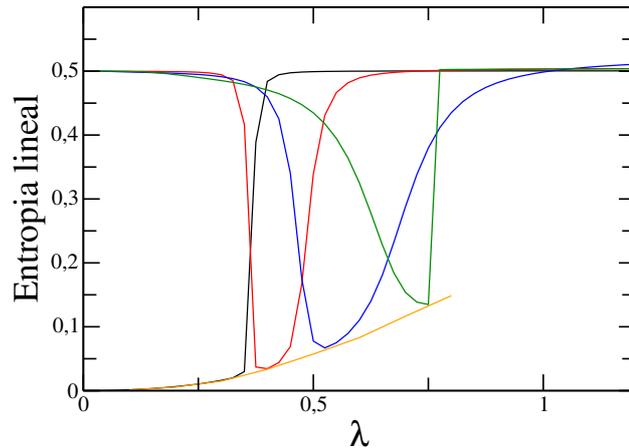


Figura 4.2: Entropía lineal de los primeros 4 autovalores variacionales. La curva negra corresponde al estado fundamental, mientras que las curvas roja, azul y verde corresponden al 1er, 2do y 3er estado excitado, respectivamente. La curva naranja es una representación de la función  $S[E_r(\lambda)]$ .

La figura (4.3) muestra el comportamiento del valor de expectación del potencial de interacción, calculado también con los primeros cuatro autoestados variacionales del sistema. Vemos que en este sistema también se da el comportamiento opuesto entre esta cantidad y la entropía. La curva naranja en esta figura es una representación de la forma que adopta la cantidad

$\partial E/\partial\lambda$  discutida en la sección (3.2).

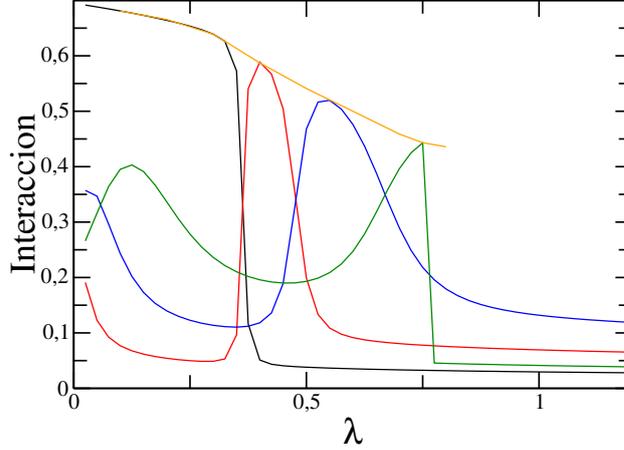


Figura 4.3: Valor de expectación del potencial de interacción para los primeros cuatro autoestados variacionales. La curva negra corresponde al estado fundamental, mientras que las curvas roja, azul y verde corresponden al 1er, 2do y 3er estado excitado, respectivamente. La curva naranja es una representación de la función  $\partial E/\partial\lambda$ .

En la figura (4.4)(a) podemos observar el estado fundamental y en la figura (4.4)(b) el primer estado excitado, en función de  $\lambda$  para distintos valores del parámetro variacional  $\beta$ . Aquí  $\beta$  adopta valores desde 2 a 4,2, y va creciendo en intervalos equiespaciados de 0,05. Al igual que en el caso del Helio esférico, vemos como para  $\lambda$  fijo la densidad de estados varía. El cambio en la densidad de estados observado en estas figuras sugiere investigar sobre esta cantidad. En [7] se estudió el comportamiento de la densidad de estados

$$\rho(E) = \left| \frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} \right|^{-1} \quad (4.12)$$

la cual, al estar abordando el problema variacionalmente, puede expresarse según

$$\rho(E_j^{\beta_i})(\lambda) = \left| \frac{E_j^{\beta_{i+1}}(\lambda) - E_j^{\beta_{i-1}}(\lambda)}{\beta_{i+1} - \beta_{i-1}} \right|^{-1} \quad (4.13)$$

donde  $E_j^{\beta_i}(\lambda)$  es la energía del  $j$ -ésimo autoestado variacional calculado con parámetro variacional  $\beta_i$  y con algún valor fijo del parámetro de forma del potencial,  $\lambda$ . Lo que encontraron es que esta función se ajusta con una Lo-

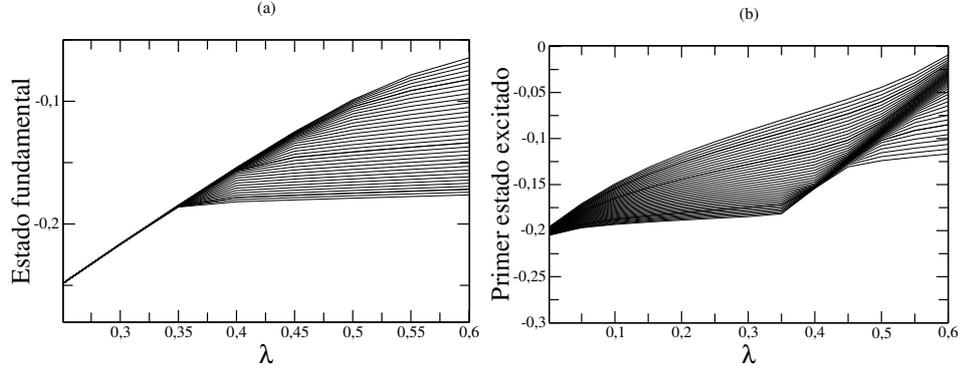


Figura 4.4: (a) Primer estado variacional en función de  $\lambda$  para distintos valores del parámetro variacional  $\beta$ . De abajo hacia arriba  $\beta$  crece de 1.3 a 4.2. (b) Lo mismo que en (a) pero para el segundo estado variacional.

rentziana con parámetros

$$\rho(E) = \rho_0 + \frac{A}{\pi} \frac{\Gamma/2}{[(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2]} \quad (4.14)$$

siendo  $E_r$  y  $\Gamma/2$  las partes real e imaginaria del estado de resonancia respectivamente. En la figura (4.5) vemos la densidad de estados de los primeros dos autovalores excitados en función de la energía (Ver 4.13). Estas curvas fueron realizadas tomando valores de  $\beta$  entre 1.3 y 4.2, con una separación de 0,05 entre los mismos; para el parámetro  $\lambda$  se tomó el valor 0,5, debido a que para ese valor se puede observar que la densidad de estados aumenta y vuelve a decrecer para los datos obtenidos (figura. (4.4(b))) Como dijimos, a partir de la densidad de estados podemos obtener el valor de la vida media del estado resonante ajustando la curva con (4.14). En [7] encontramos que el valor de  $\Gamma$  obtenido será mejor mientras mayor sea la energía del autoestado sobre el que se calcula.

En las figuras (4.5) (a) y (b) vemos el ajuste realizado a la densidad de estados correspondiente al primer y segundo estado excitado respectivamente. Ajustando con una función obediente a la ecuación

$$f(x) = a_0 + \frac{a_1}{(a_2 - x)^2 + a_3} \quad (4.15)$$

obtuvimos un valor para el parámetro  $a_3$ , que si comparamos la ecuación anterior con la ecuación (4.14), obtenemos

$$\Gamma = 2\sqrt{a_3} \quad (4.16)$$

Así obtuvimos, para el primer estado excitado,  $\Gamma_1 = 0,009475$ , mientras que para el segundo estado excitado el valor obtenido para el ancho de la resonancia fue  $\Gamma_2 = 0,006773$ .

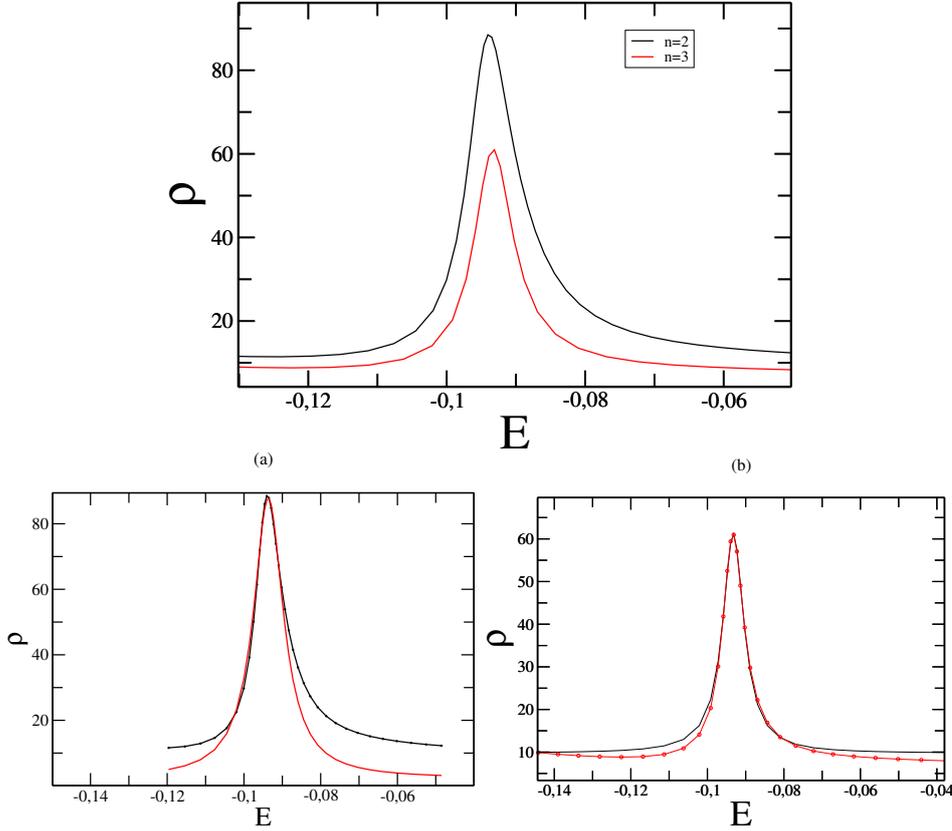


Figura 4.5: En el panel superior se muestran los valores de la densidad de estados, ecuación (4.13), obtenida de los datos de la figura (4.4). En los paneles inferiores se muestra el ajuste a la densidad de estados correspondiente a (a) primer estado variacional excitado y (b) segundo estado variacional excitado. ( $\lambda = 0,5$ )

Cabe aclarar que el hecho de que los ajustes mostrados en la figura (4.5) no aproximen a la función en todo el rango de la misma obedece a que la densidad de estados se ve alterada por la presencia de otros estados en el continuo y por el hecho de que al variar el parámetro variacional estamos modificando los valores de energía para cada estado. Por lo tanto el ajuste con una Lorentziana es válido solo en la parte superior de la curva.

El tiempo de vida medio del estado resonante depende del sistema con que se trabaja. Si tomamos  $\lambda = 0,65$  obtenemos otra curva para la densidad

de estados y, por ende, otro valor de  $\Gamma$ . En la figura (4.6) podemos ver las curvas correspondientes al primer y segundo estados excitados, y el ajuste de las mismas en (a) y (b). Los valores obtenidos con estos ajustes son  $\Gamma_1 = 0,024$  y  $\Gamma_2 = 0,039$  para el primer y segundo estado excitado respectivamente. Cabe aclarar que la curva correspondiente al primer estado excitado esta incompleta por falta de tiempo para obtener los valores necesarios; no obstante vemos que el ajuste puede realizarse de todas formas.

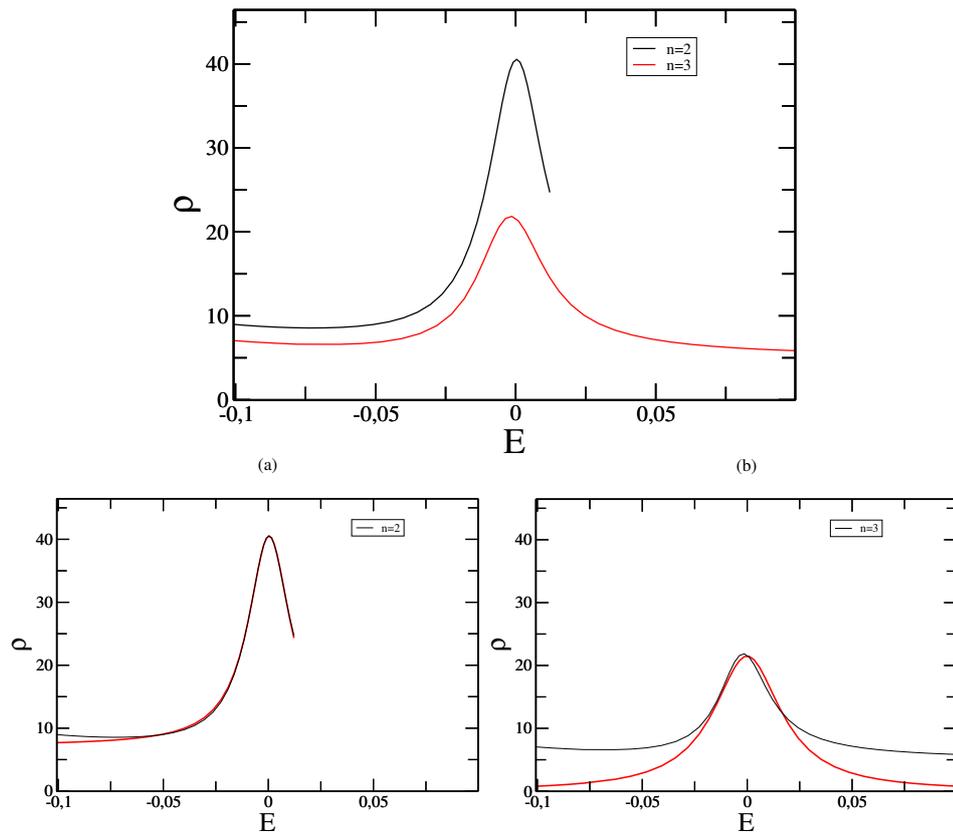


Figura 4.6: En el panel superior se muestran los valores de la densidad de estados, ecuación (4.13), obtenida de los datos de la figura (4.4). En los paneles inferiores se muestra el ajuste a la densidad de estados correspondiente a (a) primer estado variacional excitado y (b) segundo estado variacional excitado. ( $\lambda = 0,65$ )

### Evolución temporal

Pasamos ahora a la solución dinámica del sistema. El método utilizado, descrito en la sección (2.5.3), es, como dijimos, exacto a primer orden y no unitario, por lo cual debimos forzar la normalización de la función de

onda luego de cada paso temporal. Estas circunstancias llevan a que sea necesario optimizar los pasos de integración temporal y espacial,  $\Delta t$  y  $\Delta x$  respectivamente.

Los gráficos presentados en esta parte del trabajo fueron realizados para dos condiciones iniciales distintas; ambas son estados puros, una modelada con una función cuadrática y la otra con una función sinusoidal. Ambas condiciones iniciales están confinadas dentro del pozo de potencial. Los resultados obtenidos para estas condiciones no dependen significativamente de las mismas, por lo que en todos los casos se presenta los resultados de una de las condiciones iniciales implementadas.

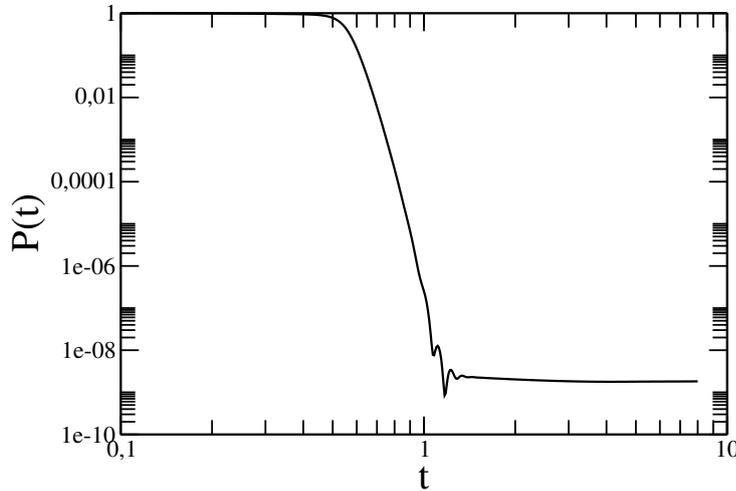


Figura 4.7: Probabilidad de supervivencia en escala log-log, para parámetros  $\lambda = 0,5$ ,  $\Delta t = 0,0025$  y  $\Delta x = 0,25$ . Note las oscilaciones debidas a interferencia en tiempos intermedios.

En la figura (4.7) tenemos la probabilidad de supervivencia para parámetros  $\lambda = 0,5$ ,  $\Delta t = 0,0025$  y  $\Delta x = 0,25$ . En este caso tenemos, como se esperaba, un comportamiento cuadrático para tiempos cortos, una exponencial pronunciada a tiempos intermedios, y para tiempos largos vemos que  $P(t) \rightarrow 0$ . Se puede ver además que para tiempos intermedios se presenta la interferencia entre el comportamiento exponencial y el polinomial, comentado en el marco teórico. Esto nos indica que los parámetros elegidos para la integración numérica permiten que el algoritmo implementado refleje los regímenes temporales esperados basándonos en [3]. Sin embargo, al ajustar la región exponencial, se obtiene un valor para el ancho de resonancia de  $\Gamma \sim 34$ , lo cual es muy grande para lo que se espera. Nos damos cuenta

entonces que si bien el método converge para estos pasos de integración, los mismos no son adecuados para el problema que abordamos.

En la figura (4.8) tenemos el comportamiento de  $P(t)$  para distintos valores  $\Delta t$ . Podemos observar cómo para tiempos cortos o muy largos las soluciones se superponen. Hay además una región de tiempos intermedios, entre  $t \sim 10$  y  $t \sim 120$ , donde las curvas son distintas, y se presenta un decaimiento que es más suave mientras menor es  $\Delta t$ . Para obtener estas curvas los parámetros utilizados son  $\lambda = 0,5$  y  $\Delta x = 0,93$ , mientras que el paso de integración temporal adoptó los valores  $\Delta t = 0,007, 0,014, 0,021, 0,028, 0,035$ .

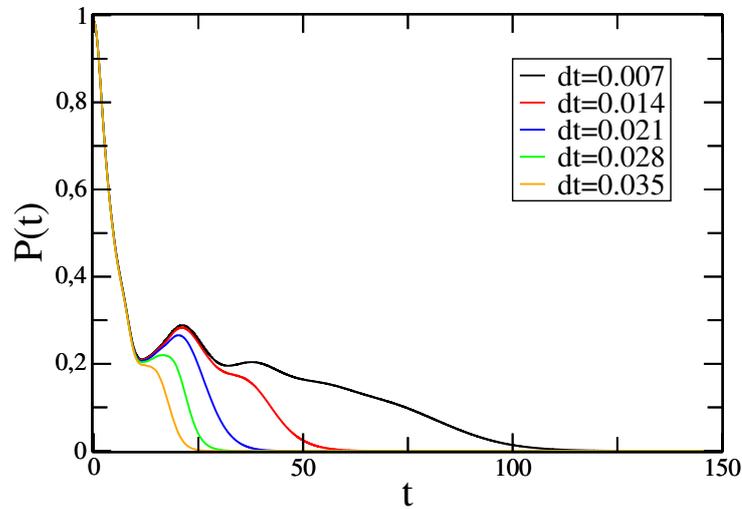


Figura 4.8: Probabilidad de supervivencia en función del tiempo. El parámetro del potencial es  $\lambda = 0,5$ , mientras que para la evolución los parámetros son  $\Delta x = 0,93$  y  $\Delta t = 0,007, 0,014, 0,021, 0,028, 0,035$ . (curvas negra, azul, verde, roja y naranja respectivamente)

Vemos que para estos parámetros de integración la curva de la probabilidad de supervivencia cambia significativamente respecto a lo que teníamos en la figura (4.7). Observemos por ejemplo la curva correspondiente a  $\Delta t = 0,007$  (figura 4.9). Vemos en ésta que para tiempos cortos se presenta una caída abrupta de la probabilidad de supervivencia. Luego, para tiempos entre  $t \sim 10$  y  $t \sim 120$  la función  $P(t)$  presenta un decaimiento más suave, con algunas oscilaciones no periódicas, para luego anularse para  $t > 120$ .

En un principio no fue claro qué región presenta el comportamiento exponencial buscado. De la descripción anterior de las curvas, se deduce que ésta debe buscarse en el intervalo  $t \in [15, 120]$ , y una primera intuición nos lleva

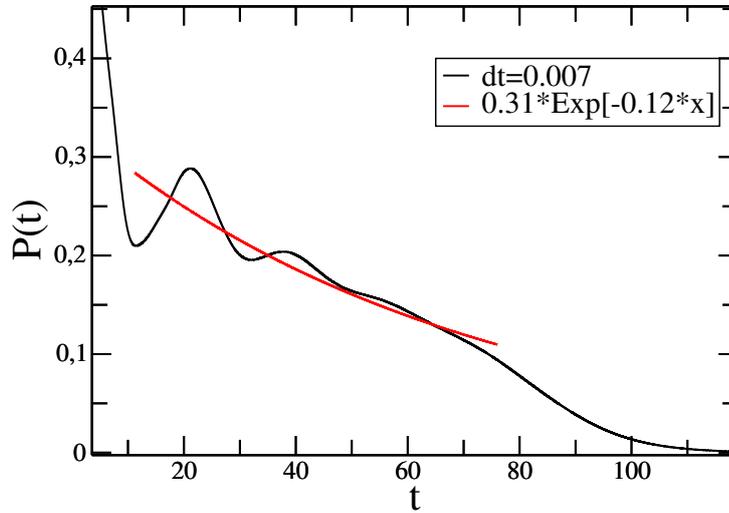


Figura 4.9: Probabilidad de supervivencia en función del tiempo. La curva roja es el ajuste realizado.

a buscarla en el final del mismo, donde la probabilidad de supervivencia no presenta perturbaciones ( $t \in [50, 100]$ ). Sin embargo, la acumulación de datos nos llevó a ver que esta región no es la adecuada, sino que deberíamos buscar en la región donde las oscilaciones son más acusadas ( $t \in [20, 50]$ ). En la figura (4.9) vemos como esta región, a pesar de no ser suave, se aproxima razonablemente con una exponencial. Lo que tenemos entonces, como bien se puede ver en la ecuación (2.42), es un comportamiento oscilatorio modulado por un decaimiento exponencial, producto de que los dos comportamientos descritos allí para tiempos largos determinan a  $P(t)$ .

El ajuste realizado a los datos de la figura (4.9) es, como dijimos, para la evolución con parámetros  $\lambda = 0,5$ ,  $\Delta t = 0,007$  y  $\Delta x = 0,93$ . Se realizó el mismo tipo de ajuste para  $\Delta t = 0,0049$  y a la precisión a la que trabajamos los parámetros de ajuste son indistinguibles. El ancho de la resonancia resultante es  $\Gamma = 0,012$ , mientras que al calcularlo variacionalmente obtuvimos los valores  $\Gamma_1 = 0,0094$  y  $\Gamma_2 = 0,0067$ , para el primer y segundo estado excitado respectivamente. Vemos que el valor obtenido mediante la evolución de la condición inicial es mayor a los obtenidos variacionalmente. Más aún, habíamos dicho que una mejor aproximación a  $\Gamma$  era  $\Gamma_2$  por obtenerse a partir de una autoestado de mayor energía.

En la figura (4.10) tenemos la probabilidad de supervivencia del mismo sistema pero con parámetro del potencial  $\lambda = 0,65$  y  $\Delta t = 0,0049$ . Aquí obtuvimos  $\Gamma = 0,030$ , mientras que mediante el método variacional obtuvimos

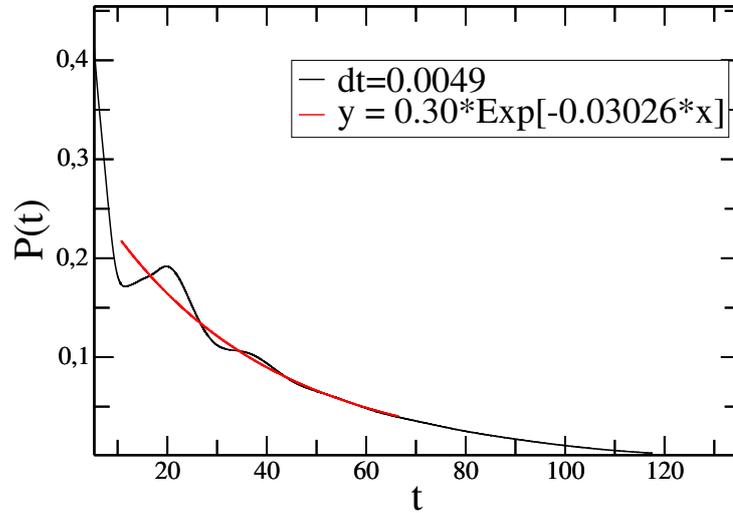


Figura 4.10: Probabilidad de supervivencia en función del tiempo para parámetros  $\lambda = 0,65$ ,  $\Delta t = 0,0049$  y  $\Delta x = 0,93$ .

los valores  $\Gamma_1 = 0,024$  y  $\Gamma_2 = 0,039$ . Vemos como, con alejarnos del valor de  $\lambda$  para el cual el estado fundamental del sistema atraviesa el treshold, los valores del tiempo de vida media obtenido por ambos métodos son más consistentes entre sí; esto puede deberse a que el comportamiento exponencial se hace más evidente en el caso  $\lambda = 0,65$ .

Por último consideramos qué pasaría si cambiamos el paso de integración temporal. En la figura (4.11) tenemos la probabilidad de supervivencia para los parámetros  $\lambda = 0,65$ ,  $\Delta x = 0,46$  y  $\Delta t = 0,0014$

De este ajuste obtenemos para el ancho de la resonancia el valor  $\Gamma = 0,39$ . Vemos que este valor es más cercano a  $\Gamma_2$  obtenido variacionalmente.

Otra cantidad que puede calcularse es la entropía del sistema en función del tiempo. En la figura (4.12) podemos ver esta cantidad calculada para el sistema con  $\lambda = 0,65$ ,  $\Delta t = 0,007$  y para la integración espacial tomamos  $\Delta x = 0,93$  y  $\Delta x = 0,46$ . Vemos como entropía calculada con un menor paso temporal presenta un comportamiento más suave, siendo monótonamente creciente una vez que el sistema entra en el régimen temporal dominado por la presencia de la resonancia. Un dato a tener en cuenta es que esta cantidad adopta valores mayores a  $S = 0,5$ , mientras que en el cálculo variacional la entropía es siempre menor que este valor.

Los resultados obtenidos hasta ahora para la entropía lineal no nos permiten concluir acerca de la relación entre  $S(t)$  y  $S_{var}$  (entropía obtenida variacionalmente). En ese sentido, creemos que una integración más precisa

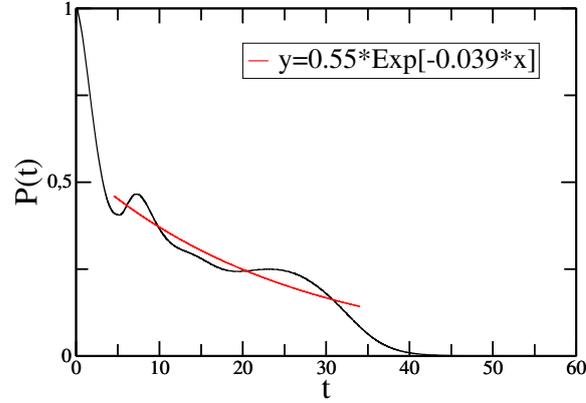


Figura 4.11: Probabilidad de supervivencia en función del tiempo para parámetros  $\lambda = 0,65$ ,  $\Delta t = 0,0014$  y  $\Delta x = 0,46$ .

resultará en:

1.  $S(t)$  suave para tiempos donde la probabilidad de supervivencia está dominada por la presencia de la resonancia.
2.  $S(t) \in [S_{var} - \Delta, S_{var} + \Delta]$ , con  $\Delta$  determinado por propiedades de la entropía compleja obtenida a partir del método de *complex scaling*.

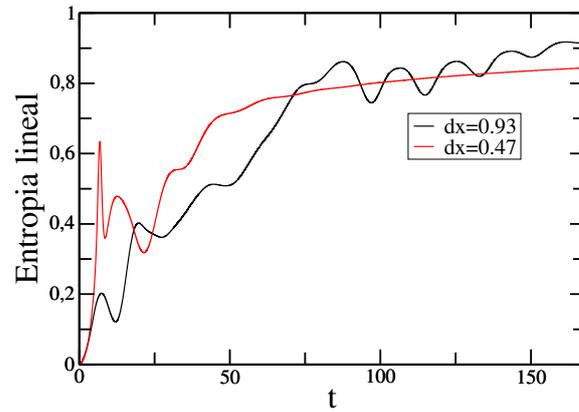


Figura 4.12: Entropía lineal en función del tiempo, para parámetros del sistema:  $\lambda = 0,65$ ,  $\Delta t = 0,007$  y  $\Delta x = 0,93$  (curva negra) y  $\Delta x = 0,46$  (curva roja).



## Capítulo 5

# Conclusiones y perspectivas futuras

Presentamos en este trabajo dos métodos de obtención del tiempo de vida medio de un estado resonante: mediante métodos variacionales y mediante la evolución temporal del sistema. Logramos obtener dicha cantidad mediante los dos métodos empleados, con bastante coincidencia en los valores obtenidos.

En el caso del tratamiento variacional del problema, obtuvimos resultados satisfactorios al reproducir los trabajos en los que nos basamos [7, 8]. Más aún, lo aprendido en la reproducción de los mismos nos permitió obtener información confiable sobre el sistema que propusimos para el trabajo.

En cuanto a la evolución dinámica del sistema, si bien los resultados obtenidos parecen indicar concordancia con el método variacional, el método de evolución temporal utilizado no es óptimo, y los parámetros de evolución con que trabajamos no nos permitieron localizar la zona de decaimiento puramente exponencial para la probabilidad de supervivencia. Creemos que aplicando métodos de integración más sofisticados obtendremos mejores resultados, y es éste el objetivo que nos proponemos para seguir con este trabajo. No obstante concluimos que es posible obtener mediante evolución temporal y el estudio de la probabilidad de supervivencia la misma información que variacionalmente.

En cuanto a la entropía calculada mediante el método dinámico, creemos que el valor asintótico que adopta debería coincidir con la entropía calculada variacionalmente. Es posible que esto no sea así debido a que es un cantidad más sensible al método y los pasos de integración, por lo que seguiremos estudiando esta cantidad una vez aplicados métodos más eficaces.

Por último, la dependencia de los resultados con las condiciones iniciales implementadas en el estudio dinámico del sistema, no fue estudiada exhaus-

tivamente. Si bien la resonancia es una propiedad intrínseca del sistema, con lo cual la condición inicial no debería afectar los resultados, creemos conveniente explorar esta posibilidad.

Queda como trabajo a futuro implementar mejores métodos de integración para la evolución temporal del sistema, como también utilizar potenciales más suaves. Si bien vimos que el pozo esférico cuadrado funciona razonablemente, es probable que un potencial constante a trozos perjudique la estabilidad del método de integración numérica. Además de esto, sabemos que los algoritmos implementados para el método variacional pueden ser simplificados, de modo de poder trabajar con una base de funciones de mayor dimensión y así obtener resultados más precisos.

Otro tema que quedó pendiente es implementar el estudio realizado en sistemas de una partícula. Tenemos ya los programas para ello funcionando, pero no pudimos aún juntar una cantidad significativa de datos como para saber como proceder. También en este aspecto se seguirá trabajando.

# Apéndice A

## Modelo de una partícula.

Inicialmente, nos propusimos comenzar estudiando un sistema de una partícula con el objetivo de reconocer en él los estados resonantes. La falta de tiempo y el hecho de que el tratamiento de este sistema no fue tan simple como esperábamos, no nos permitió cumplir este objetivo, pero sí calculamos analíticamente lo necesario para proceder. En este apéndice presentamos los cálculos hechos.

El potencial propuesto para esta parte del trabajo es  $V(r)$  de la forma

$$V(r) = \begin{cases} -u & \text{si } 0 \leq r \leq r_0 \\ v & \text{si } r_0 \leq r \leq r_1 \\ 0 & \text{si } r_1 \leq r. \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

En primer lugar abordaremos el problema variacional, utilizando la base de  $N$  funciones

$$\phi_i = \sqrt{\frac{\beta^3}{4\pi(i+1)(i+2)}} e^{-\beta r/2} L_i^{(2)}(\beta r), \quad (\text{A.2})$$

donde  $\beta$  es un parámetro variacional no lineal y  $L_i^{(2)}$  son los polinomios de Laguerre. Aplicaremos a continuación este método para encontrar el ancho de la resonancia ( $\Gamma$ ) mediante el análisis de la densidad de estados (4.13).

Por otro lado abordaremos la evolución dinámica del mismo problema, de acuerdo a lo expuesto en la sección (2.5.1). En la sección (2.1) vimos que los estados resonantes decaen exponencialmente en el tiempo, en el régimen temporal adecuado dicho decaimiento se da según la ecuación (2.5). Si en el sistema descrito por (A.1) ponemos como condición inicial alguna función que sea no nula sólo dentro del pozo, y estudiamos la probabilidad de supervivencia (2.38) en función del tiempo, deberíamos distinguir el momento

en que la probabilidad disminuye obedeciendo el decaimiento exponencial propio de los estados resonantes. Una vez identificada esta región es posible ajustar la curva de decaimiento para encontrar el ancho de la resonancia,  $\Gamma$ .

## A.1. Método Espectral

Los elementos de matriz del Hamiltoniano de una partícula

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V(r) \quad (\text{A.3})$$

donde el potencial  $V(r)$  está dado por (A.1), pueden separarse en elementos de la energía potencial y cinética. Los de la energía cinética de una partícula son los expresados en (3.11), mientras que los de la energía potencial adoptan la forma

$$\begin{aligned} V_{n,m} = & \frac{-1}{\sqrt{(n+1)n(m+1)m}} \times \\ & \left[ u \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{q=0}^{m-1} \frac{(-1)^{p+q}(n+1)!(m+1)!(p+q+2)!}{p!q!(n-p-1)!(m-q-1)!(q+2)!(p+2)!} \right. \\ & + \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{q=0}^{m-1} \sum_{k=0}^{p+q+2} \frac{(-1)^{p+q}(n+1)!(m+1)!(p+q+2)!}{p!q!k!(n-p-1)!(m-q-1)!(q+2)!(p+2)!} \times \\ & \left. (-e^{-\beta r_0}(\beta r_0)^k(u+v) + ve^{-\beta r_1}(\beta r_1)^k) \right] \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

Con estos elementos de matriz y los de la energía cinética (3.11) abordaremos el problema variacionalmente.

## A.2. Evolución temporal

En este sistema podemos utilizar el método descrito en (2.5.1). Para simplificar las cuentas y mejorar así la precisión del método, vamos a resolver la ecuación de Schrödinger radial reducida. Recordemos [12] que en potenciales centrales, como el que tenemos en este caso, contamos con la ecuación de radial de Schrödinger

$$\left[ \frac{p_r^2}{2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] R_l(r) = ER_l(r) \quad (\text{A.5})$$

donde  $p_r$  es el operador momento radial

$$p_r = -i\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r, \quad (\text{A.6})$$

$l$  el número cuántico correspondiente al momento angular y  $R_l(r)$  la función de onda radial del sistema. Definiendo  $R_l(r) = u_l(r)/r$ , podemos escribir la ecuación radial reducida para  $u_l(r)$

$$\left[ \frac{p^2}{2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] u_l(r) = E u_l(r) \quad (\text{A.7})$$

donde ahora el operador momento es

$$p = -i \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{A.8})$$

Como trabajamos con el estado fundamental del sistema, es decir, tenemos  $l = 0$ , la ecuación (A.7) es la de un Hamiltoniano unidimensional, lo cual es más sencillo de resolver.

Observemos que para obtener la probabilidad de supervivencia es indistinto trabajar con  $R_l(r)$  o  $u_l(r)$  ya que

$$\begin{aligned} \langle u_l(r, t=0) | u_l(r, t) \rangle &= \int_0^\infty u_l^*(r, t=0) u_l(r, t) dr & (\text{A.9}) \\ &= \int_0^\infty u_l^*(r, t=0) u_l(r, t) \frac{r^2}{r^2} dr \\ &= \int_0^\infty R_l^*(r, t=0) R_l(r, t) r^2 dr \\ &= \frac{\langle R_l(r, t=0) | R_l(r, t) \rangle}{4\pi} \end{aligned}$$

Tenemos por lo tanto

$$P_{red}(t) = \frac{P(t)}{16\pi^2} \quad (\text{A.10})$$

donde  $P_{red}(t)$  es lo que obtenemos al trabajar con la función de onda reducida  $u_l(r)$ . Pero como nos interesa el coeficiente dentro de la exponencial en  $P(t)$ , este factor que multiplica a toda la función no altera el resultados obtenidos.



# Bibliografía

- [1] G. Gamow, *Zs. f. Phys.* **51**, 204 (1928); *Zs. f. Phys.* **52**, 510 (1928).
- [2] A. Ramos and O. Osenda, *Journal of Physics B* **47**, 15502 (2014).
- [3] L. Fonda, G. C. Ghirardi and A. Rimini, *Rep. Prog. Phys.* **41**, 587 (1978).
- [4] A. D. Dente, R. A. Bustos-Marín and H. M. Pastawski, *Phys. Rev. A* **78**, 062116 (2008).
- [5] W.P. Reinhardt and S. Han, *Int. J. Quantum Chem.* **57**, 327 (1996).
- [6] N. Moiseyev, *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. (Cambridge, New York, 2011)
- [7] F. M. Pont, O. Osenda, J. H. Toloza and P. Serra, *Phys. Rev. A* **81**, 042518 (2010).
- [8] O. Osenda and P. Serra, *Phys. Rev. A* **75**, 042331 (2007).
- [9] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* 7th ed. (Elsevier, EE. UU., 2007)
- [10] W. H. Press, B. P. Flannery and S. A. Teuk, *Numerical Recipes*. Vol. I, 2nd ed. (Cambridge, EE. UU., 1992)
- [11] A. Ferrón, O. Osenda and P. Serra, *Phys. Rev. A* **79**, 032509 (2009).
- [12] A. Galindo and P. Pascual, *Quantum Mechanics*. Vol. II. (Springler-Verlag, Germany, 1990)
- [13] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. (Cambridge, UK, 2000)
- [14] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (John Wiley, New York, 1998)

- [15] W. A. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* (Academin, New York, 1977)
- [16] F. L. Dubeibe, *Int. J. Modern Physics C* **21**, 1391 (2010)
- [17] R: Usmani, *Linear Algebra Appl.* **212**, 413 (1994)
- [18] A. Alzetta, and E. d'Ambrogio, *Nuclear Physics* **82**, 683 (1966)
- [19] S. Abdullah, J. P. Coe, and I. D'Amico, *Phys. Rev. B* **80**, 235302 (2009).
- [20] O. Osenda, P. Serra, and S. Kais, *Int. J. Quantum. Inform.* **6**, 303 (2008).