

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y
COMPUTACIÓN.

TESIS DE DOCTORADO

Estudio de sistemas cuánticos de partículas confinadas

Autor:
Mariano GARAGIOLA

Director:
Dr. Omar OSENDA

*Esta tesis es presentada como requisito
para optar por el grado de Doctor en Física.*

2 de Marzo de 2018



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

Universidad Nacional de Córdoba

Resumen

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación.

Doctor en Física

Estudio de sistemas cuánticos de partículas confinadas

por Mariano GARAGIOLA

Los sistemas cuánticos de partículas confinadas conforman una de las áreas de la física con muchas aplicaciones en tecnología. Motivados por esto, en esta tesis estudiamos sistemas de pocos cuerpos confinados utilizando distintos abordajes posibles sobre cada uno de los sistemas. Podemos dividir la tesis en dos bloques.

El primer bloque corresponde al estudio de partículas confinadas en puntos cuánticos semiconductores. Dentro de este bloque, a su vez, estudiamos dos sistemas conceptualmente distintos, el primer sistema está relacionado al confinamiento de un excitón en un punto cuántico con simetría esférica, mientras que el segundo está relacionado con la ligadura de estados resonantes de dos electrones en un punto cuántico con simetría cilíndrica. Respecto al confinamiento del excitón, analizamos el espectro del sistema utilizando dos métodos distintos: la aproximación de masas efectivas y el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Dentro de la aproximación de masas efectivas, también estudiamos las transiciones entre los estados cuánticos cuando se aplica un campo externo al sistema.

Utilizando la aproximación de masas efectivas, analizamos el fenómeno de ligadura de estados resonantes de uno y dos electrones en un punto cuántico cuando se aplica un campo magnético sobre el sistema, en particular nos concentramos en analizar dicho fenómeno en la aproximación de confinamiento lateral fuerte.

El segundo bloque está dedicado a las ocupaciones, o los orbitales naturales y a las medidas de entrelazamiento de sistemas de dos partículas confinadas en un potencial armónico. Estudiamos las moléculas de Wigner y el modelo de Calogero. En este bloque, partimos de la función de onda exacta del sistema y utilizamos distintas cantidades provenientes de la teoría de información cuántica para estudiar el entrelazamiento entre las partículas, las ocupaciones y los orbitales naturales de la matriz densidad reducida.

Palabras claves: mecánica cuántica, puntos cuánticos, excitones, método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, modelo de Calogero, información cuántica, entropía de von Neumann.

Clasificación (PACS): 03.65.Ge, 03.67.-a, 04.20.Jb, 71.35.-y, 72.80.Cw, 72.80.Ey, 73.21.La.

Universidad Nacional de Córdoba

Abstract

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación.

Doctor en Física

Estudio de sistemas cuánticos de partículas confinadas

por Mariano GARAGIOLA

The quantum system of confined particles form one of the areas of physics with many applications in technology. Motivated by this, in this thesis, using different possible approaches, few-body quantum systems are analyzed. The thesis can be splitted in two blocks.

The first block is devoted to the study of semiconductor quantum dots. In particular, we studied two conceptually different systems. First, the spectral properties of confined excitons in spherical quantum dots are studied within the framework of the effective mass approximation and the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method. The transitions between different quantum states are also analyzed. Second, using the effective mass approximation, the binding of one- and two-electron resonant states are studied. In this case, the nanostructure is a cylindrical quantum dot and an homogeneous magnetic field is applied to the system.

In the second block of the thesis, the natural orbitals, occupation numbers and entanglement entropies of a two-particle Wigner molecule and the two-particle Calogero model are studied. Starting with the exact wave function of the system, the occupation numbers and the natural orbitals of the reduced density matrix are computed and with this the entanglement entropies.

Keywords: quantum mechanics, quantum dots, excitons, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method, Calogero model, quantum information, von Neumann entropy.

Clasificación (PACS): 03.65.Ge, 03.67.-a, 04.20.Jb, 71.35.-y, 72.80.Cw, 72.80.Ey, 73.21.La.

Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a quienes me ayudaron y acompañaron a lo largo del tiempo que me tomó realizar mi doctorado.

En primer lugar a quien fué mi director, Omar Osenda, quien logró transmitirme parte de su conocimiento en física y de su experiencia en investigación. Agradezco su paciencia y sobre todo la confianza que depositó en mi.

A la Universidad Pública, en particular a la Universidad Nacional de Córdoba.

A las instituciones que apoyaron y financiaron mi doctorado, especialmente al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), al Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG) y a la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FAMAF).

A integrantes del Grupo de la Teoría de la Materia Condensada de FAMAF con los cuales hice trabajos de investigación.

A los compañeros de la oficina 272: José, Luis, Cristian y Raúl.

A mi familia que siempre de alguna u otra forma logró acompañarme, especialmente a mis padres y a mis hermanos.

Un agradecimiento muy especial es para Meli, que me acompañó y apoyó desde el inicio.

Índice general

Resumen	III
Abstract	V
Acknowledgements	VII
Índice general	X
Índice de figuras	XII
1. Introducción	1
2. Excitón en un punto cuántico heterogéneo	7
2.1. Introducción	7
2.2. Modelo	9
2.3. Potencial electrostático	12
2.4. Resultados de una partícula	14
2.5. Resultados de dos partículas	17
2.6. Control de estados excitónicos	19
2.7. Resumen y conclusiones	23
3. Niveles excitónicos y propiedades espectrales de puntos cuánticos	25
3.1. Introducción	25
3.2. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	26
3.3. Exciton en un punto cuántico multicapa	30
3.4. Propiedades espectrales de un punto cuántico doble	34
3.5. Resumen y conclusiones	37
4. Ligadura de estados metastables de dos electrones	39
4.1. Introducción	39
4.2. Modelo y aproximación de confinamiento lateral	41
4.3. Problema de un electrón	42
4.4. Problema de un electrón: confinamiento lateral modificado	49
4.5. Problema de dos electrones	50
4.6. Resumen y conclusiones	53
5. Crossover en cuantificadores de entrelazamiento para el modelo de Calogero	57
5.1. Introducción	57
5.2. Entropías de información cuántica	60
5.3. El modelo de Calogero para dos partículas	62
5.3.1. Caso unidimensional	62
5.3.2. Dos o más dimensiones	63

5.4.	Números de ocupación y entropía de von Neumann: caso unidimensional	64
5.5.	Entropía de Rényi y soporte finito de la matriz densidad reducida . . .	66
5.6.	Números de ocupación y entropía de von Neumann: caso bidimensional	70
5.7.	Tratamiento analítico del modelo de Calogero	72
5.8.	<i>Crossover</i> de dimensión dos a uno	76
5.9.	Resumen y conclusiones	78
6.	Entrelazamiento en moléculas de Wigner de dos partículas	81
6.1.	Introducción	81
6.2.	Sistemas bidimensionales de dos partículas confinadas	83
6.3.	Derivación de las ocupaciones exactas	84
6.4.	Entropías en el límite de interacción fuerte	86
6.5.	Potenciales de interacción de largo alcance	90
6.5.1.	Interacción de potencia inversa	90
6.5.2.	Interacción de tipo inversa del logaritmo	92
6.6.	Potenciales de interacción de corto alcance	92
6.6.1.	Interacción de potencia inversa apantallada	93
6.6.2.	Interacción Gaussiana repulsiva	94
6.7.	Resumen y conclusiones	96
7.	Conclusiones	99
A.	Uso de B-splines en Mecánica Cuántica	105
A.1.	Descripción de los B -splines	105
A.2.	La base de B -splines	106
A.3.	Resolviendo la ecuación de Schrödinger	107
A.3.1.	Problema de una partícula $1D$	107
A.4.	Bases usadas	108
A.4.1.	Exciton en un punto cuántico heterogéneo	108
A.4.2.	Niveles excitónicos y propiedades espectrales de puntos cuánticos multicapas	109
A.4.3.	Ligadura de estados metastables de dos electrones en puntos cuánticos semiconductores con campo magnético	110
	Bibliografía	113

Índice de figuras

1.1. Ley de Moore	2
2.1. Punto cuántico esférico multicapa y su respectiva estructura de bandas.	10
2.2. Comparación de los estados de un electrón en pozo finito y los estados de un electrón en un pozo infinito.	15
2.3. Energías de un electrón en un punto cuántico con y sin los efectos del potencial de auto-polarización.	16
2.4. Densidades de probabilidad de un electrón en un punto cuántico heterogéneo.	17
2.5. Energía de ligadura de un excitón en un punto cuántico	18
2.6. Energía de ligadura del estado fundamental de un excitón para distintos métodos.	20
2.7. Evolución temporal de un qubit basado en estados excitónicos	22
2.8. Pérdida promedio de la evolución temporal del estado de un excitón	23
3.1. Diagrama de bandas para el modelo $k \cdot p$	28
3.2. Espectro de energía de un punto cuánticos esférico en el modelo $k \cdot p$	31
3.3. Espectro de energía de un punto cuántico esférico cuando se consideran la interacción entre un electrón y un hueco.	33
3.4. Energía de ligadura de un excitón en un punto cuántico con simetría esférica	34
3.5. Esquema de un punto cuántico doble y los respectivos perfiles de las bandas de valencia y de conducción	35
3.6. Espectro de energía de un punto cuántico doble	36
3.7. Energía de ligadura del estado fundamental del excitón en punto cuántico doble y posición del máximo de las densidades de probabilidad del electrón y del hueco	37
4.1. Esquema del nano-hilo en el cual se encuentra un punto cuántico con simetría cilíndrica.	43
4.2. Energías de un electrón como función del campo magnético	44
4.3. Purity, entropía de von Neumann y densidades radiales de un electrón en un punto cuántico cilíndrico con campo magnético	46
4.4. Energías más bajas de un electrón en un punto cuántico con distintas aproximación del modelo longitudinal	48
4.5. Parte real de la energía de la resonancia y energía del problema longitudinal con $\psi_{2D}(\rho)$ como función radial	49
4.6. Autovalores más bajos para del problema unidimensional efectivo en la aproximación de confinamiento lateral modificada	50
4.7. Diferencia de energía para el autovalor más bajo del problema de dos electrones y la energía del primer nivel de Landau de dos electrones no interactuantes.	52

4.8. Pureza y entropía de von Neumann del estado fundamental del problema de dos electrones	54
5.1. Ocupaciones para el estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional de fermiones y bosones.	65
5.2. Entropía de von Neumann para el estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional de fermiones y bosones.	66
5.3. Análisis de escaleo finito del cuarto número de ocupación del estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional.	67
5.4. Entropías de Rényi para el estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional de fermiones y bosones.	69
5.5. Entropías de Rényi y sus derivadas para el estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional de bosones.	70
5.6. Entropías de von Neumann del modelo de Calogero bidimensional de dos fermiones.	71
5.7. Entropías lineal y de von Neumann para el estado fundamental del modelo de Calogero bidimensional anisotrópico.	77
5.8. Análisis de la energía del estado fundamental del modelo de Calogero bidimensional anisotrópico.	78
6.1. Términos de las entropías bidimensionales de von Neumann, min-entropy y entropías de Rényi para dos partículas confinadas que interactúan mediante un potencial que depende de la distancia entre partículas.	88
6.2. Términos de las entropías de von Neumann y Rényi asociados a la coordenada x y sus derivadas para dos partículas confinadas que interactúan mediante un potencial que depende de la distancia entre partículas.	89
6.3. Ocupaciones en función de ε para el modelo de Calogero de dos partículas.	91
6.4. Entropía asociada a la coordenada x , S_x^α en el límite de interacción fuerte como función del exponente β	92
6.5. Entropías de Rényi para dos partículas confinadas con interacción de tipo inversa del logaritmo.	93
6.6. Potencial de interacción de tipo potencia inversa apantallada.	93
6.7. Entropía de von Neumann unidimensional para potencial de interacción de tipo potencia inversa apantallada.	94
6.8. Ocupaciones unidimensionales para potencial de interacción de tipo barrera Gaussiana.	95
A.1. Conjunto de funciones B -splines	106

Capítulo 1

Introducción

Durante las últimas décadas hemos presenciado un gran avance tecnológico a partir del cual hemos podido fabricar una gran variedad de dispositivos. Uno de los avances tecnológicos más grandes de la historia es la invención del transistor, dicho invento revolucionó la electrónica ya que, debido a los circuitos integrados¹, se pudo disminuir el tamaño de las componentes de los dispositivos electrónicos. Actualmente, los transistores están presentes en la mayoría de los aparatos electrónicos que conocemos. Luego de la invención del transistor se desarrollaron técnicas que permitieron fabricar dichos dispositivos con tamaño cada vez menor, de esta manera se pudo disminuir los costos de fabricación y al mismo tiempo mejorar las eficiencias de los dispositivos electrónicos.

En el año 1965, el cofundador de Intel, Gordon E. Moore, afirmó que el número de transistores por unidad de superficie en circuitos integrados se duplica cada 18 meses, esta tendencia es conocida como la Ley de Moore. Hoy en día es común encontrar distintas versiones o interpretaciones de la Ley de Moore, como por ejemplo la velocidad de procesamiento de los micro-procesadores de las computadoras.

Desde el punto de vista tecnológico, en la actualidad, se está llegando al límite de la cantidad de transistores que pueden colocarse por unidad de área. Esto se debe a que los circuitos integrados no disipan potencia lo suficientemente rápido. Por otro lado, al fabricar transistores de dimensiones cada vez más chicas los efectos cuánticos se vuelven cada vez más relevantes. Estos efectos modifican el funcionamiento y la eficiencia de los circuitos al punto que no se sabe con precisión si están funcionando en forma correcta o no.

Es importante entender estos sistemas si se quiere continuar con los avances tecnológicos. En la actualidad es posible realizar experimentos y manipular la materia a escala nanométrica, lo cual ha motivado el avance de la nanociencia y nanotecnología, cuya escala de trabajo característica las liga con la mecánica cuántica. La habilidad de manipulación de la materia en dicha escala fomentó el estudio teórico y numérico de diferentes sistemas tales como: nanoestructuras, cavidades ópticas, trampas de iones, entre otros.

Los estudios realizados sobre estos sistemas no solo se basan en las propiedades espectrales y los observables de un sistema cuántico, sino que también se analiza el contenido de información del estado cuántico. La teoría de información cuántica aplicada a diferentes sistemas permite realizar nuevos análisis relacionados con el acoplamiento entre el sistema cuántico y el entorno en el cual se encuentra, la posibilidad de manipular coherentemente dichos sistemas y la transmisión de la información contenida en dicho sistema.

¹Un circuito integrado, también conocido como chip o microchip, es una estructura de pequeñas dimensiones de material semiconductor, normalmente silicio, de algunos milímetros cuadrados de superficie, sobre la que se fabrican circuitos electrónicos.

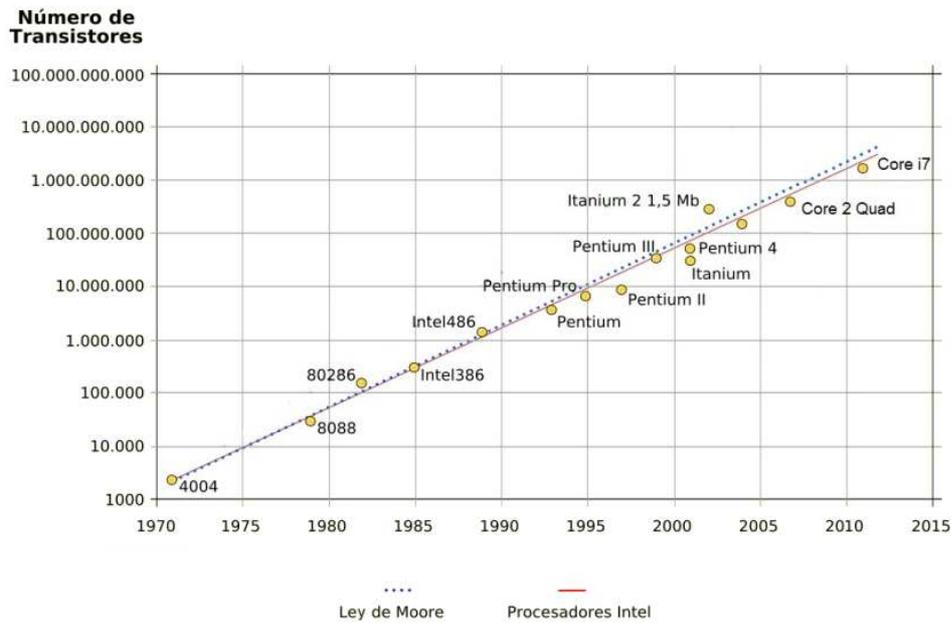


FIGURA 1.1: Ley de Moore postulada por Gordon E. Moore. Dicha ley afirma que el número de transistores en un circuito integrado se duplica cada 18 meses.

Una gran variedad de sistemas, como partículas confinadas en puntos cuánticos, iones atrapados en trampas o cavidades ópticas, moléculas, entre otros, pueden ser modelados como sistemas cuánticos de pocos cuerpos, para los cuales existe un conjunto de diversos métodos que permiten abordar todos estos sistemas. Este trabajo está dedicado al estudio de algunos de estos sistemas cuánticos. Consideramos Hamiltonianos que modelan sistemas como iones en trampas y electrones, huecos y excitones confinados en puntos cuánticos. Estudiamos las propiedades espectrales, localización, proceso de ligadura de estados resonantes, control de estados cuánticos mediante campos externos y el contenido de información cuántica de los estados mediante el cálculo de diferentes medidas de entrelazamiento.

En este trabajo, los sistemas cuánticos estudiados fueron abordados utilizando métodos variacionales y exactos, analizando principalmente el comportamiento de los autovalores y autoestados del Hamiltoniano o de los autovalores de la matriz densidad reducida junto con las cantidades que pueden derivarse u obtenerse de éstos como entropías de entrelazamiento. Respecto a los resultados obtenidos, una gran parte de éstos corresponden a resultados obtenidos en forma numérica, para lo cual se escribieron programas de computadoras que permitieran resolver las ecuaciones correspondientes, entre los lenguajes de programación utilizados se encuentran: Fortran, C, Python y Octave. La implementación numérica del método variacional de Rayleigh-Ritz, usando como funciones base el conjunto conocido como *B-splines*, derivó en la dirección conjunta, con el Dr. Nicolás Wolowick, de una tesis de grado de la carrera Licenciatura en Ciencias de la Computación, la cual tiene como objetivo optimizar los tiempos de cómputo de la implementación numérica de dicho método. Esta tesis fue presentada en la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación el día 26 de marzo de 2018 y el título de la misma es: *Optimización del cómputo para la resolución del problema de una y dos partículas en un pozo de potencial usando B-splines*.

En cada capítulo de esta tesis se aborda una problemática distinta que está representada por distintos problemas, cada uno de estos problemas consiste de un sistema cuántico, el cual se desea estudiar, y el método empleado para hacerlo. La tesis puede separarse en dos partes. En la primera parte, estudiamos sistemas de una y dos partículas en puntos cuánticos semiconductores, analizamos el espectro de cada sistema, estados ligados y estados resonantes, y comparamos distintas aproximaciones que pueden emplearse. La segunda parte está dedicada al estudio de las ocupaciones, orbitales naturales y entropías de entrelazamiento de sistemas de dos partículas confinadas por potenciales armónicos. Estudiamos las moléculas de Wigner y el modelo de Calogero. En particular el modelo de Calogero es un sistema de gran importancia en la física del estado sólido por su relación con el efecto Hall cuántico fraccionario y la estadística fraccionaria.

Como cada capítulo está dedicado a una problemática distinta, cada uno está organizado de forma tal que contiene una introducción y conclusión propia.

Presentamos a continuación la organización de la tesis y los contenidos de cada capítulo.

El capítulo 2 está centrado en el estudio de las propiedades espectrales de electrones, huecos y excitones confinados en puntos cuánticos semiconductores con simetría esférica. Un punto cuántico es una nanoestructura semiconductor que se caracteriza por confinar el movimiento en las tres direcciones de los electrones, los huecos o excitones. éstos pueden fabricarse mediante potenciales eléctricos o por la combinación de distintos materiales semiconductores. Ya que estos dispositivos se caracterizan por confinar el movimiento en las tres direcciones espaciales, el espectro de energía es típicamente discreto, es por este motivo que muchas veces son llamados *átomos artificiales*. Al igual que en átomos, es posible inducir transiciones entre los estados de energía discreta aplicando campos externos al sistema, pero el espectro discreto de los puntos cuánticos se diferencia del espectro de los átomos en que, en el caso de los puntos cuánticos el espectro depende de las dimensiones del mismo, esta cualidad los vuelve particularmente interesantes y aumenta el número de potenciales aplicaciones tecnológicas. Utilizando la aproximación masas efectivas definimos el Hamiltoniano de una partícula confinada en el punto cuántico heterogéneo y analizamos los distintos términos que constituyen el Hamiltoniano y sus consecuencias, como por ejemplo, las condiciones de contorno y de empalme de la función de onda, el potencial de confinamiento y el potencial de auto-polarización. A continuación, analizamos la energía de ligadura del par interactuante electrón-hueco (excitón) y las transiciones entre los autoestados excitónicos cuando se aplica un campo externo dependiente del tiempo. Para obtener el espectro del Hamiltoniano excitónico, nuevamente analizamos los distintos términos que lo constituyen y mostramos cómo determinar, en forma analítica, el potencial de interacción entre el electrón y el hueco cuando el punto cuántico está formado por dos o más materiales. Para analizar las transiciones entre los distintos estados excitónicos, escribimos el Hamiltoniano de interacción con campo externo en una aproximación semiclásica del campo y hacemos uso de la teoría de segunda cuantificación para obtener ecuaciones que nos permitan analizar la dependencia temporal del estado cuántico.

El capítulo 3 está dedicado al estudio del espectro de dos tipos de puntos cuánticos, un punto cuántico simple y un punto cuántico doble, utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, es un método semi-empírico desarrollado inicialmente para calcular la estructura de bandas de materiales cristalinos. Con los años, este método ha sido implementado para estudiar distintos tipos de estructuras como puntos cuánticos, nano hilos semiconductores, pozos cuánticos semiconductores, entre otros. Una de las características más importantes que tiene el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, es la posibilidad de

considerar distintas bandas que forman la estructura, esto permite obtener información, respecto a las propiedades física del sistema, que con otros métodos no puede ser obtenida, como es el caso de la estructura del espectro en la aproximación de masas efectivas. Para calcular el espectro de las nano estructuras consideradas, vamos a aplicar el método variacional al Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas junto con la aproximación de función de onda envolvente, de esta forma también podemos obtener las funciones de onda asociadas a cada autoestado. Para determinar los efectos de la interacción entre un electrón y un hueco vamos a aplicar el método de Hartree.

En el capítulo 4 nos concentramos en los estados de uno y dos electrones en un punto cuántico con simetría cilíndrica bajo la acción de un campo magnético constante y uniforme. En particular, analizamos los estados resonantes del sistema. Los estados resonantes describen sistemas en los que una o más partículas permanecen cuasi-ligadas durante un intervalo finito de tiempo asociado al tiempo de vida del estado. La presencia de un campo magnético genera un confinamiento en el plano transversal al eje en el cual se aplica dicho campo. Si sumado a esto, el electrón está sometido a un potencial que modela al punto cuántico, es posible utilizar el campo magnético para ligar los estados resonantes en el punto cuántico. Comenzaremos analizando el proceso de ligadura de estados resonantes de un electrón cuando se aplica un campo magnético a la estructura, utilizaremos la aproximación de masas efectivas y la aproximación de confinamiento lateral fuerte para obtener un modelo unidimensional efectivo que reproduzca el proceso de ligadura. La estructura del punto cuántico será de forma tal que no existan estados ligados de un electrón en ausencia de campo magnético, por lo tanto la energía de ligadura, en estas condiciones, está dada por la energía del problema de un electrón en un campo magnético. Estudiando el entrelazamiento entre las coordenadas espaciales en la función de onda del estado fundamental, determinamos las regiones en las cuales la función de onda puede ser considerada separable en las coordenadas. Este análisis lo haremos usando cantidades provenientes de la teoría de información cuántica. Compararemos diferentes formas de realizar la aproximación de confinamiento lateral fuerte con los resultados obtenidos del problema tridimensional y determinaremos las regiones de validez de cada una de las distintas aproximaciones de confinamiento lateral estudiadas. A continuación estudiaremos el estado resonante de dos electrones dentro de la aproximación de confinamiento lateral fuerte, veremos que en este problema existen dos umbrales, uno que corresponde al umbral de cero electrones en el punto cuántico y el otro al umbral de un electrón en el punto cuántico. Nuevamente utilizaremos cantidades relacionadas al entrelazamiento para obtener conclusiones del sistema, pero en este caso analizaremos el entrelazamiento entre las partículas para caracterizar la función de onda del estado resonante cada vez que cruza un umbral.

En el capítulo 5 analizamos el modelo de Calogero de dos partículas en una y dos dimensiones. Calculamos las entropías de entrelazamiento para el estado fundamental del modelo de Calogero de dos partículas. Este modelo ha sido muy estudiado en el ámbito de la materia condensada por estar relacionado con distintos sistemas de la física, en particular con el efecto Hall cuántico fraccionario y la estadística fraccionaria. Iniciamos el análisis calculando los números de ocupación de la matriz densidad reducida de una partícula y distintas entropías cuánticas, nuestros resultados muestran que para aquellos valores de los parámetros del sistema para los cuales la matriz densidad reducida tiene un número finito de autovalores no nulos, las entropías de Rényi muestran un comportamiento no analítico, de esta forma esta cantidad puede ser un herramienta que permita detectar cuándo una matriz densidad tiene soporte finito. Además, a partir de la aproximación armónica, logramos evaluar tanto los números de ocupación como las entropías cuánticas en el

límite de interacción fuerte, de esta forma demostramos la presencia de un *crossover* dimensional en el sistema.

En el capítulo 6, continuamos con el análisis de los números de ocupación y de las entropías cuánticas pero, en este capítulo, nos concentramos en las moléculas de Wigner. Mostramos cómo las distintas entropías nos permiten diferenciar interacciones de largo y corto alcance entre las partículas. Las moléculas de Wigner son el análogo finito de cristales de Wigner, es decir, cristales electrónicos que se forman cuando la energía potencial domina sobre la energía cinética en el régimen de densidades bajas. A lo largo de este capítulo generalizaremos el procedimiento empleado para el modelo de Calogero al problema de dos partículas interactuantes confinadas en un potencial armónico anisotrópico. En primer lugar determinamos expresiones analíticas para los números de ocupación de la matriz densidad de una partícula en el límite de interacción fuerte, y basados en estos cálculos, evaluamos distintas entropías de entrelazamiento. La motivación principal es determinar la influencia de la anisotropía del confinamiento sobre las entropías y el efecto del alcance del confinamiento sobre estas cantidades físicas. Los resultados muestran que, en el caso de interacciones de largo alcance, las entropías son finitas para el caso de confinamiento anisotrópico y divergen para el caso de confinamiento isotrópico. Para el caso de interacciones de corto alcance, las entropías divergen sin importar la anisotropía del confinamiento.

En el capítulo 7 resumimos las conclusiones de cada uno de los capítulos de la tesis y agregamos las perspectivas de trabajo futuro que pueden realizarse sobre cada sistema analizado.

Ya que los sistemas de los capítulos 2, 3 y 4 fueron estudiados utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz utilizando el conjunto de B -splines como base de los respectivos espacios de Hilbert, en el apéndice A, damos la definición del conjunto de función y sus características, mostrando también la forma en la cual se calculan las funciones y cómo es su implementación para resolver problemas de mecánica cuántica. Además, mostramos las distintas bases utilizadas para cada uno de los problemas estudiados con dicho conjunto de funciones.

Capítulo 2

Excitón en un punto cuántico heterogéneo

Los puntos cuánticos, en particular el confinamiento de electrones y huecos en estos dispositivos, son sistemas intensamente estudiados, tanto en forma teórica como experimental, por sus propiedades ópticas y electrónicas. En este capítulo vamos a estudiar las propiedades espectrales de electrones, huecos y excitones confinados en un punto cuántico multi-capa con simetría esférica. A continuación, estudiamos la posibilidad de controlar, mediante campos externos, la dinámica de estados excitónicos para generar transiciones entre éstos. El modelo presentado incluye un tratamiento riguroso del potencial de interacción entre el electrón y el hueco. Se presentan resultados numéricos, obtenidos a partir del método variacional, para el estado fundamental y estados excitados, y se comparan distintas aproximaciones que pueden realizarse sobre cada sistema. Los resultados obtenidos muestran que la energía de ligadura del excitón es una función decreciente del tamaño de la región de confinamiento y que es posible generar transiciones entre los dos estados con menor energía con pérdida de coherencia despreciable.

2.1. Introducción

La física de puntos cuánticos es una de las áreas de investigación más activas en el campo de heteroestructuras semiconductoras de baja dimensión [1, 2]. En estos “átomos artificiales”, los electrones y huecos son confinados en las tres dimensiones espaciales, dando lugar a un espectro de energía discreto, similar al que se encuentra en sistemas atómicos. Esta característica hace a los puntos cuánticos cualitativamente diferentes de los pozos e hilos cuánticos ¹.

Las técnicas de espectroscopía óptica son usadas para la caracterización de los puntos cuánticos ya que éstas permiten conocer, en forma muy precisa, el espectro electrónico del sistema, por ejemplo, el par interactuante electrón-hueco, también llamado excitón, contribuye al espectro de absorción para energías menores al *gap* de energía del semiconductor en cuestión. En base a esto, una gran cantidad de trabajos, tanto teóricos como experimentales, se ha dedicado al estudio y entendimiento de estos sistemas cero dimensionales. Gran parte de estos trabajos se concentran en los punto cuánticos homogéneos [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. El principal resultado es

¹Los pozos cuánticos y los hilos cuánticos son estructuras semiconductoras que confinan el movimiento de electrones y huecos en una o dos dimensiones, es decir, en los pozos cuánticos las partículas están restringidas a moverse solo en dos dimensiones y en los hilos cuánticos solo pueden moverse en una dimensión, por este motivo son llamadas sistemas dos dimensionales y unidimensionales, respectivamente. Siguiendo este razonamiento, como en los puntos cuánticos las partículas están confinadas en las tres dimensiones, éstos suelen llamarse sistema cero dimensionales.

que cuando el tamaño del punto cuántico disminuye, los efectos del confinamiento aumentan el gap de energía de una partícula y la interacción electrostática y de intercambio entre el electrón y el hueco, causando una fuerte dependencia entre el tamaño del punto cuántico y la energía del excitón. Sin embargo, solo recientemente, los puntos cuánticos heterogéneos comenzaron a ser estudiados en profundidad [11, 12, 13, 14, 15, 16]. Estos puntos cuánticos heterogéneos, como consecuencia del proceso de fabricación², pueden ser modelados con un potencial del tipo pozo de potencial, el cual confina a los portadores de carga dentro del punto cuántico. Este confinamiento evita que las partículas se localicen cerca de los bordes de la estructura, donde ocurren procesos que no pueden ser controlados y no son del todo entendidos, como por ejemplo el proceso de atrapar partículas en las interfaces de los materiales del punto cuántico [17].

Existen diferentes técnicas o métodos que pueden aplicarse al estudio del confinamiento de partículas confinadas en puntos cuánticos, como modelos *tight-binding*, métodos basados en la teoría del funcional densidad (DFT por su sigla en inglés, *Density Functional Theory*), método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, entre otros. Una de las técnicas más usadas es la aproximación de masas efectivas, la cual ha sido implementada tanto para el estudio de electrones [18] y de excitones en puntos cuánticos [15]. Dentro de este marco de trabajo, a su vez, distintos tipos de aproximaciones se han aplicado como es el caso de la aproximación de confinamiento fuerte [19] y métodos perturbativos [20].

Cuando se estudia el confinamiento de un excitón en un punto cuántico hay varias características del sistema a tener cuenta que aumentan la complejidad del problema, como por ejemplo la interacción entre el electrón y el hueco. En la aproximación de masas efectivas, dicha interacción suele estar dada por la interacción de Coulomb entre las partículas [21], pero si se está considerando un punto cuántico formado por dos o más materiales es necesario considerar las cargas de polarización que se inducen en las interfaces de los materiales [19], llevando así a una interacción electrostática más compleja. A su vez, en estos sistemas, hay que considerar el hecho de que varios parámetros dependen de los materiales, como lo es el caso de las masas efectivas de las partículas, por lo que el Hamiltoniano del sistema debe ser escrito de tal forma que se respete la propiedad de ser un operador hermitiano (o hermítico). Es importante notar que otros parámetros como las energías de las bandas de valencia y de conducción y el *gap* toman distintos valores para distintos materiales, pero estos parámetros son los que definen el potencial de confinamiento del punto cuántico.

Uno de los motivos por los cuales se estudian los excitones confinados en puntos cuánticos es su posible implementación como procesador de información cuántica [22, 23, 24, 25]. Se han conseguido avances significativos en la creación y manipulación de estados excitónicos en puntos cuánticos [26, 27] y nuevas técnicas, que permiten el acoplamiento entre distintos estados excitónicos mediante campos externos [25], proveen un avance en el campo de la computación cuántica aplicada a la física del estado sólido.

En este capítulo vamos a estudiar el confinamiento de un excitón en un punto cuántico heterogéneo, inicialmente nos concentraremos en las propiedades espectrales del sistema y luego estudiaremos cómo realizar transiciones entre los estados base de un qubit definidos a partir de estados excitónicos. Primero estudiaremos el problema de una partícula con carga eléctrica confinada en el punto cuántico, para

²En la actualidad existen diferentes técnicas de fabricación de nanoestructuras, muchas de estas técnicas permiten crear heteroestructuras, es decir, nanoestructuras fabricadas con diferentes materiales. Usualmente se combinan semiconductores que posean redes cristalinas similares.

ésto vamos a usar el método variacional de Rayleigh-Ritz haciendo énfasis en las condiciones de empalme que deben satisfacer los estados cuánticos para mantener la hermiticidad del Hamiltoniano y en el potencial electrostático generado por las cargas inducidas en las interfaces de los materiales. A continuación estudiaremos el sistema del par interactuante electrón-hueco, donde nuevamente haremos uso de un potencial electrostático que tenga en cuenta los efectos de polarización y analizaremos la energía de ligadura del par interactuante. Finalmente, usaremos un modelo simple para realizar transiciones entre estados excitónicos usando campos externos.

El capítulo está organizado de la siguiente forma. En la sección 2.2 presentamos el modelo de una y dos partículas confinadas en un punto cuántico heterogéneo en la aproximación de masas efectivas, en la sección 2.3 presentamos una forma de obtener la interacción electrostática entre el electrón y el hueco y el potencial que sufre cada partícula debido a las cargas de polarización en las interfaces de los materiales. A continuación mostramos los resultados obtenidos para una partícula en la sección 2.4, mientras que en la sección 2.5 mostramos los resultados para el problema de un excitón confinado en el punto cuántico. En la sección 2.6, presentamos un modelo de evolución temporal de la función de onda excitónica usando campos externos. Finalmente, discutiremos los resultados obtenidos en la sección 2.7.

2.2. Modelo

La aproximación de masas efectivas en heteroestructuras puede obtenerse aplicando el modelo de función de onda envolvente a estos sistemas. Este modelo consiste en dos suposiciones:

i) En cada material, la función de onda es expandida en términos de las funciones de onda de Bloch para el vector de onda en consideración, por ejemplo para el caso de una estructura con dos materiales,

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_n f_n^{(A)}(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{0}}^{(A)}(\mathbf{r}), & \text{para } \mathbf{r} \text{ en el material } A. \\ \sum_n f_n^{(B)}(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{0}}^{(B)}(\mathbf{r}), & \text{para } \mathbf{r} \text{ en el material } B. \end{cases}, \quad (2.1)$$

donde n es el índice de banda y usamos las funciones de Bloch en el vector de onda $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$, que es el punto donde se encuentra el máximo de la banda de valencia y mínimo de la banda de conducción en semiconductores de *gap* directo.

ii) Las funciones de onda de Bloch son iguales en todos los materiales

$$u_{n,\mathbf{k}}^{(A)}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}^{(B)}(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

Esta segunda condición es cierta en la gran mayoría de materiales que suelen usarse para la fabricación de puntos cuánticos semiconductores, estos materiales tienen estructuras cristalinas similares.

Por lo tanto, la función de onda de la hetero-estructura, $\psi(\mathbf{r})$ es una suma de productos de una función que varía rápidamente, las funciones de Bloch $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, y funciones que varían más lentamente, las cuales son llamadas funciones envolventes, $f_n(\mathbf{r})$. De esta forma es posible obtener una ecuación para las funciones envolventes, dicha ecuación está dada por un Hamiltoniano de la forma

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

donde m^* es la masa efectiva de la partícula y $V(\mathbf{r})$ es el potencial el cual está dado por la relación entre las diferentes bandas de energía de los materiales.

En la aproximación de masas efectivas, el Hamiltoniano para la función de onda envolvente de un excitón confinado en un punto cuántico es la forma

$$H = H_e + H_h + V_{elec}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \quad (2.4)$$

donde $V_{elec}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ es el potencial electrostático entre el electrón y el hueco, H_e y H_h son los Hamiltonianos para el electrón y para el hueco respectivamente.

De ahora en adelante vamos a considerar un punto cuántico con simetría esférica formado por dos materiales como se muestra en la figura 2.1. El núcleo central, de radio a , y la última capa, de radio interior b , están formados del mismo material el cual tiene una constante dieléctrica ϵ_2 , la capa del medio, de radio interior a y radio exterior b , está formada por otro material con constante dieléctrica ϵ_1 . En la figura 2.1 también se muestran los perfiles de las bandas de valencia y de conducción para la estructura considerada, estos perfiles corresponden a una estructura del tipo *I* y tiene la particularidad que los electrones y los huecos se confinan en el material con gap más chico. En este caso, la región $a < r < b$ funciona como un pozo de potencial tanto para el electrón como para el hueco. Este tipo de estructura se logra eligiendo adecuadamente los materiales para fabricar el punto cuántico.

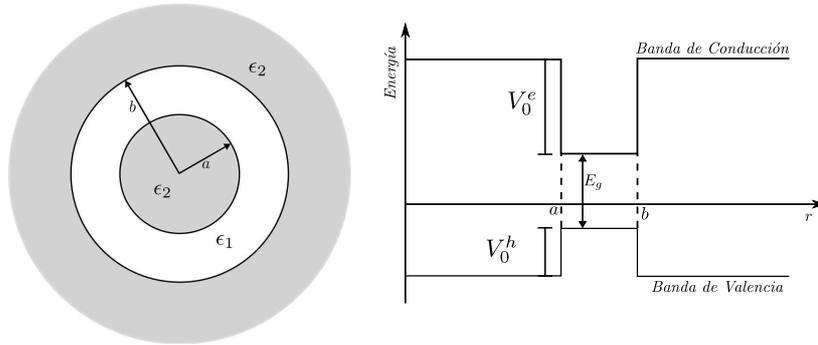


FIGURA 2.1: Gráfico esquemático del modelo de punto cuántico estudiado y los perfiles de bandas correspondiente.

Es posible combinar algunos materiales para obtener otro tipo de perfiles para las bandas de conducción y de valencia el cual es conocido como tipo *II*. En éste los electrones y los huecos se localizan en regiones distintas del espacio. En este capítulo nos vamos a concentrar en un punto cuántico de tipo *I* como el mostrado en la figura 2.1.

El Hamiltoniano de un partícula en un punto cuántico con simetría esférica es

$$H_j = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_j \left(\frac{1}{m_j^*} \nabla_j \right) + V_j(r_j) + V_{ap}(r_j), \quad j = e, h, \quad (2.5)$$

donde m^* es la masa efectiva de cada partícula, la cual depende de los materiales que forman el punto cuántico. Como consecuencia, en una heteroestructura la masa efectiva es función de las coordenadas espaciales, por este motivo el término cinético del Hamiltoniano debe ser escrito en forma simétrica para garantizar el carácter hermitiano del operador. En este sentido, las condiciones de empalme de la función de onda también deben considerar este comportamiento de la masa efectiva. Dichas condiciones de empalme son

$$\psi(r = a^-) = \psi(r = a^+), \quad (2.6)$$

$$\psi(r = b^-) = \psi(r = b^+), \quad (2.7)$$

$$\left(\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dr} \right) \Big|_{r=a^-} = \left(\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dr} \right) \Big|_{r=a^+}, \quad (2.8)$$

$$\left(\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dr} \right) \Big|_{r=b^-} = \left(\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dr} \right) \Big|_{r=b^+}. \quad (2.9)$$

El término $V_j(r)$ en Ec. (2.5) es el potencial de confinamiento de cada partícula, este potencial está dado por los perfiles de las bandas de conducción y de valencia de la estructura que se esté considerando. El perfil de la banda de conducción da el potencial de confinamiento del electrón y el perfil de la banda de valencia da el potencial para el hueco. Por último, $V_{ap}(r)$ es el potencial de auto-polarización que está generado por las cargas inducidas en las interfaces de los materiales por la presencia de una carga negativa (electrón) o positiva (hueco) en la estructura.

Usualmente, el potencial electrostático entre el electrón y el hueco, $V_{elec}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ en Ec. (2.4), es considerado como el potencial de Coulomb entre una carga positiva y una carga negativa, pero si el excitón se encuentra confinado en una heteroestructura hecha de diferentes materiales, este enfoque simplifica la situación. Teniendo en cuenta esto, es necesario un enfoque más general en el cual se consideren los efectos generados por el cambio en la constante dieléctrica de los materiales. En la sección 2.3 mostramos cómo obtener una expresión analítica para el potencial electrostático entre el electrón y el hueco y los potenciales de auto-polarización, en el cual se considera que la estructura está formada por distintos materiales.

El potencial de confinamiento en la Ec. (2.5) se define a partir de los perfiles de las bandas de conducción y de valencia de la estructura, como estamos considerando una estructura del tipo *I* donde los electrones y los huecos se localizan en la misma región el potencial de confinamiento es de la forma

$$V_j(r) = \begin{cases} V_0^j & \text{si } 0 < r \leq a \\ 0 & \text{si } a < r \leq b \\ V_0^j & \text{si } b \leq r \end{cases}, \quad j = e, h, \quad (2.10)$$

donde V_0^e es la diferencia de energía entre la banda de conducción del material de núcleo y la banda de conducción del material del pozo, mientras que V_0^h es la diferencia de energía entre la banda de valencia del material del pozo y la banda de valencia del material del núcleo.

En nuestro caso, el punto cuántico está formado de la siguiente forma: el núcleo y la capa exterior son de *CdS* mientras que el material de la segunda capa es *HgS*. En la tabla 2.1 mostramos los parámetros para estos materiales. Por último, para esta elección particular de materiales tenemos que $V_0^e = 1.35 \text{ eV}$ y $V_0^h = 0.65 \text{ eV}$.

CUADRO 2.1: Parámetros de los materiales del punto cuántico, *CdS* y *HgS*.

Material	E_g	m_e^*	m_h^*	ϵ
<i>CdS</i>	2.42 eV	0.2	0.7	$\epsilon_2 = 5.5$
<i>HgS</i>	0.42 eV	0.036	0.040	$\epsilon_1 = 11.36$

Todos los resultados numéricos que vamos a presentar en las próximas secciones de este capítulo se obtuvieron usando el método variacional de Rayleigh-Ritz sobre el Hamiltoniano correspondiente y tomando como base del espacio de Hilbert las funciones B -splines. En el apéndice A detallamos qué son las funciones B -splines y mostramos cómo es su implementación en problemas de mecánica cuántica.

2.3. Potencial electrostático

En esta sección veremos cómo obtener una expresión analítica para la interacción electrostática entre el electrón y el hueco cuando ambas partículas se encuentran confinadas en un punto cuántico con simetría esférica.

Vamos a considerar dos partículas, una con carga q_1 en la posición \mathbf{r}_1 y la segunda con carga q_2 en la posición \mathbf{r}_2 . La magnitud que queremos calcular es el potencial electrostático en el punto \mathbf{r}_1 producido por una carga en el punto \mathbf{r}_2 . Para esto, tenemos que resolver la ecuación de Poisson

$$\nabla_{\mathbf{r}_1} [\epsilon(\mathbf{r}_1) \nabla_{\mathbf{r}_1} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)] = -4\pi \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (2.11)$$

donde $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es la función de Green y ϵ es la constante dieléctrica de los materiales que constituyen el punto cuántico. En particular, hacemos explícita la dependencia de la constante dieléctrica respecto a las coordenadas espaciales. Como la estructura que estamos considerando está formada por distintos materiales, los cuales tienen distintas constantes dieléctricas, tenemos que resolver la Ec. (2.11) en cada región, correspondiente al cada material, y luego usar condiciones de empalme en las interfaces de los materiales.

Comenzaremos suponiendo que la carga q_2 , se encuentra en la región del pozo de potencial, es decir que $a < r_2 < b$, por lo tanto la ecuación que hay que resolver es

$$\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} -\frac{4\pi}{\epsilon_1} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) & \text{si } a < r_1 < b \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (2.12)$$

y las condiciones de empalme son

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{r_1=a^-} = G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{r_1=a^+}, \quad (2.13)$$

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{r_1=b^-} = G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{r_1=b^+}, \quad (2.14)$$

$$\epsilon_2 \frac{dG}{dr_1} \Big|_{r_1=a^-} = \epsilon_1 \frac{dG}{dr_1} \Big|_{r_1=a^+}, \quad (2.15)$$

$$\epsilon_1 \frac{dG}{dr_1} \Big|_{r_1=b^-} = \epsilon_2 \frac{dG}{dr_1} \Big|_{r_1=b^+}, \quad (2.16)$$

y además debe satisfacer las condiciones de contorno,

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) < \infty \quad \text{cuando } r \rightarrow 0, \quad (2.17)$$

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow 0 \quad \text{si } r \rightarrow \infty. \quad (2.18)$$

Para resolver la Ec. (2.12) proponemos una solución de la forma

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l,m} A_{l,m}(\theta_2, \varphi_2) Y_{l,m}(\theta_1, \varphi_1) g_l(r_1, r_2), \quad (2.19)$$

reemplazando Ec. (2.19) en la Ec. (2.12) y usando la relación

$$\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{1}{r_1^2} \delta(r_1 - r_2) \delta(\varphi_1 - \varphi_2) \delta(\cos(\theta_1) - \cos(\theta_2)), \quad (2.20)$$

se puede demostrar que $A_{l,m}(\theta_2, \varphi_2) = Y_{l,m}^*(\theta_2, \varphi_2)$ y la ecuación radial para $g_l(r_1, r_2)$ es

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_1} \frac{d^2}{dr_1^2} [r_1 g_l(r_1, r_2)] - \frac{l(l+1)}{r_1^2} g_l(r_1, r_2) &= -\frac{4\pi}{\epsilon_1 r_1^2} \delta(r_1 - r_2), & \text{si } a < r_1 < b, \\ \frac{1}{r_1} \frac{d^2}{dr_1^2} [r_1 g_l(r_1, r_2)] - \frac{l(l+1)}{r_1^2} g_l(r_1, r_2) &= 0, & \text{otro caso.} \end{aligned} \quad (2.21)$$

La solución a estas ecuaciones son

$$\begin{aligned} g_l(r_1, r_2) &= A(r_2) r_1^l + B(r_2) r_1^{-(l+1)}, & \text{si } r_1 < a, \\ g_l(r_1, r_2) &= \begin{cases} C(r_2) r_1^l + D(r_2) r_1^{-(l+1)} & r_1 < r_2, \\ C'(r_2) r_1^l + D'(r_2) r_1^{-(l+1)} & r_2 < r_1, \end{cases} & \text{si } a < r_1 < b \\ g_l(r_1, r_2) &= E(r_2) r_1^l + F(r_2) r_1^{-(l+1)}, & \text{si } b < r_1, \end{aligned} \quad (2.22)$$

donde los coeficientes A, B, C, C', D, D', E, F son funciones de la variable r_2 y son determinados por las condiciones de empalme Ecs. (2.13), (2.14), (2.15) y (2.16), las condiciones de contorno Ecs. (2.17) y (2.18) y la condición de simetría $g_l(r_1, r_2) = g_l(r_2, r_1)$.

Después de realizar los cálculos necesarios se obtiene que la función $g_l(r_1, r_2)$ es

$$g_l(r_1, r_2) = \begin{cases} \frac{4\pi}{\epsilon_1(2l+1)(1-pq)} [1 + p a^{-(2l+1)}] [q r_2^l + r_2^{-(l+1)}] r_1^l & 0 < r_1 < a, \\ \frac{4\pi}{\epsilon_1(2l+1)(1-pq)} [r_<^l + p r_<^{-(l+1)}] [q r_>^l + r_>^{-(l+1)}] & a < r_1 < b, \\ \frac{4\pi}{\epsilon_1(2l+1)(1-pq)} [r_2^l + p r_2^{-(l+1)}] [q b^{2l+1} + 1] r_1^{-(l+1)} & b < r_1, \end{cases} \quad (2.23)$$

donde $r_< = \min(r_1, r_2)$, $r_> = \max(r_1, r_2)$,

$$p = \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2) l a^{(2l+1)}}{[\epsilon_2 l + \epsilon_1 (l + 1)]}, \quad (2.24)$$

y

$$q = \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2) (l + 1) b^{-(2l+1)}}{[\epsilon_1 l + \epsilon_2 (l + 1)]}. \quad (2.25)$$

Realizando el mismo procedimiento se puede obtener la expresión analítica de la función $g_l(r_1, r_2)$ para los dos casos faltantes, es decir, para los casos en los cuales la carga q_2 se encuentra en la región $0 < r_2 < a$ y en la región $b < r_2$.

Entonces para el caso $0 < r_2 < a$

$$g_l(r_1, r_2) = \begin{cases} \frac{4\pi}{\epsilon_2 \alpha} r_2^l \left[r_1^l + \alpha r_1^{-(l+1)} \right] & 0 < r_1 < a \\ C r_2^l \left[q r_1^l + r_1^{-(l+1)} \right] & a < r_1 < b \\ F r_2^l r_1^{-(l+1)} & b < r_1 \end{cases}, \quad (2.26)$$

donde

$$\alpha = \frac{\frac{\epsilon_2 l a^{l-1}}{\epsilon_1 [q l a^{l-1} - (l+1) a^{-(l+2)}]} - \frac{a^l}{q a^l + a^{-(l+1)}}}{\frac{\epsilon_2 (l+1) a^{-(l+2)}}{\epsilon_1 [q l a^{l-1} - (l+1) a^{-(l+2)}]} + \frac{a^{-(l+1)}}{q a^l + a^{-(l+1)}}} \quad (2.27)$$

$$\text{y } C = \frac{4\pi}{\epsilon_2 \alpha} \frac{a^l + \alpha a^{-(l+1)}}{q a^l + a^{-(l+1)}}, \quad F = \frac{4\pi}{\epsilon_2 \alpha} \frac{b^{l+1} (a^l + \alpha a^{-(l+1)})}{(q b^l + b^{-(l+1)}) (q a^l + a^{-(l+1)})}.$$

Por último, para el caso en que $b < r_2$

$$g_l(r_1, r_2) = \begin{cases} A r_2^{-(l+1)} r_1^l & 0 < r_1 < a \\ B r_2^{-(l+1)} [r_1^l + p r_1^{-(l+1)}] & a < r_1 < b \\ \frac{4\pi}{\epsilon_2 (2l+1)} [r_2^l + \beta r_2^{-(l+1)}] r_1^{-(l+1)} & b < r_1 \end{cases}, \quad (2.28)$$

con

$$\beta = \frac{\frac{\epsilon_2 l b^{l-1}}{\epsilon_1 [l b^{l-1} - (l+1) p b^{-(l+2)}]} - \frac{b^l}{b^l + p b^{-(l+1)}}}{\frac{\epsilon_2 (l+1) b^{-(l+2)}}{\epsilon_1 [l b^{l-1} - (l+1) p b^{-(l+2)}]} + \frac{b^{-(l+1)}}{b^l + p b^{-(l+1)}}}, \quad (2.29)$$

$$\text{y } A = \frac{4\pi}{\epsilon_2 (2l+1)} \frac{(b^l + \beta b^{-(l+1)}) (1 + p a^{-(2l+1)})}{b^l + p b^{-(l+1)}} \quad \text{y } B = \frac{4\pi}{\epsilon_2 (2l+1)} \frac{b^l + \beta b^{-(l+1)}}{b^l + p b^{-(l+1)}}.$$

Una vez obtenida la función de Green del problema electrostático es posible calcular el potencial asociado con la relación

$$V_{elec}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = q_1 q_2 G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.30)$$

El potencial electrostático en la Ec. (2.30) es el potencial al cual está sometido una partícula con carga eléctrica q_1 en la posición \mathbf{r}_1 generado por una partícula con carga q_2 en la posición \mathbf{r}_2 . Si queremos obtener el potencial electrostático de autopolarización, es decir, el potencial generado por las cargas de polarización inducidas por la presencia de una carga, tenemos que tomar el caso cuando $q_1 = q_2$ y $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ en la Ec. (2.30).

2.4. Resultados de una partícula

Vamos a comenzar estudiando el confinamiento de una partícula en un punto cuántico heterogéneo con simetría esférica, en particular nos vamos a concentrar en el caso de un electrón. La idea es comparar distintas aproximaciones que pueden encontrarse en la literatura y determinar su rango de validez. Por ejemplo, la aproximación de confinamiento fuerte, la cual asume que el electrón está confinado por un pozo infinito. También queremos determinar la influencia del potencial generado por las cargas de polarización en las interfaces de los materiales.

El Hamiltoniano, dentro de la aproximación de masa efectiva, para un electrón confinado en punto cuántico esférico está dado por la Ec. (2.5). Como estamos interesados en los estados ligados del sistema, vamos a asumir que el potencial debido a las cargas de polarización afectan al electrón solo cuando éste se encuentra en la capa intermedia del punto cuántico, es decir para $a < r < b$, por lo tanto el potencial de auto-polarización es

$$V_{ap}(r) = \begin{cases} \frac{e^2}{2\epsilon_1} \sum_l \frac{1}{1-pq} \left(q r^{2l} + \frac{p}{r^{2l+1}} + \frac{pq}{r} \right) & a < r < b \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (2.31)$$

donde p y q están dados por las Ecs. (2.24) y (2.25) respectivamente. Es importante notar que si se toma el caso $\epsilon_1 = \epsilon_2$, el potencial de auto-polarización en Ec. (2.31) es nulo para todo valor de la coordenada radial, es decir no hay efectos de polarización.

Para mostrar los resultados obtenidos con este modelo elegimos el valor del parámetro b igual al radio de Bohr de un excitón en el material HgS , esto es $b = 31.71 \text{ nm}$, por lo tanto el radio a puede tomar cualquier valor entre cero y b . Este problema fue estudiado usando el límite de confinamiento fuerte [19], es decir, el potencial de confinamiento es un pozo infinito.

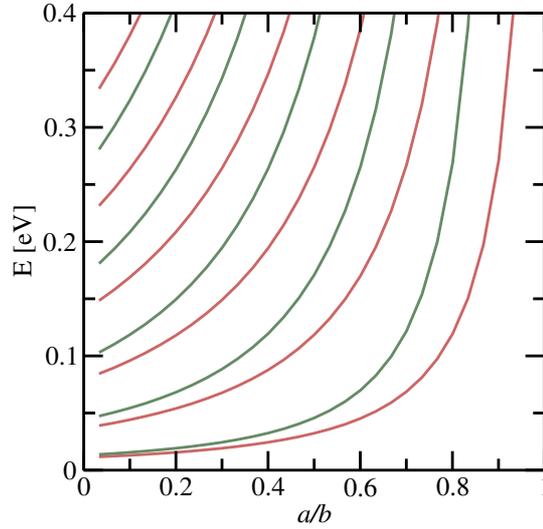


FIGURA 2.2: Primeros autovalores para el problema de un electrón confinado en un punto cuántico esférico, las curvas de color rojo corresponden al problema de un electrón en un pozo finito, las curvas de color verde corresponden al problema de un electrón en un pozo infinito. En ambos casos se consideran los efectos del potencial de auto-polarización.

En la figura 2.2 mostramos los autovalores del Hamiltoniano de un electrón en un punto cuántico para el caso en el que el confinamiento esté dado por un pozo de potencial finito (curvas rojas) y para el caso en el cual el confinamiento está dado por un pozo infinito (curvas verdes). Todos estos estados corresponden a estados con momento angular nulo, $l = 0$. Los resultados se muestran como función del cociente a/b . En ambos casos consideramos los efectos del potencial de auto-polarización. A partir de esta figura podemos observar que el autovalor del pozo infinito es una buena aproximación al estado fundamental del pozo finito para valores chicos de a/b , pero para valores de $a/b > 0.5$ o para los estados excitados la diferencia entre los

autovalores es considerable y la aproximación de confinamiento fuerte no permite obtener una buena estimación de las energías del pozo finito.

Otro factor importante a discutir es la inclusión, o no, del término de auto polarización, Ec. (2.31), en el Hamiltoniano de una partícula, Ec. (2.5). Es usual encontrar en la literatura trabajos en los cuales no se tienen en cuenta estos efectos [21, 28, 29]. La figura 2.3, muestra el comportamiento de los autovalores más bajos como función del cociente a/b , para los casos en los que se consideran los efectos del potencial de auto-polarización, $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$, y cuando no se consideran, $\epsilon_1 = \epsilon_2$. Los números entre paréntesis en la figura indican los números cuánticos correspondientes a cada estado, están en la forma $(n_r l)$ con n_r el número cuántico radial y l el número cuántico del momento angular de la función de onda.

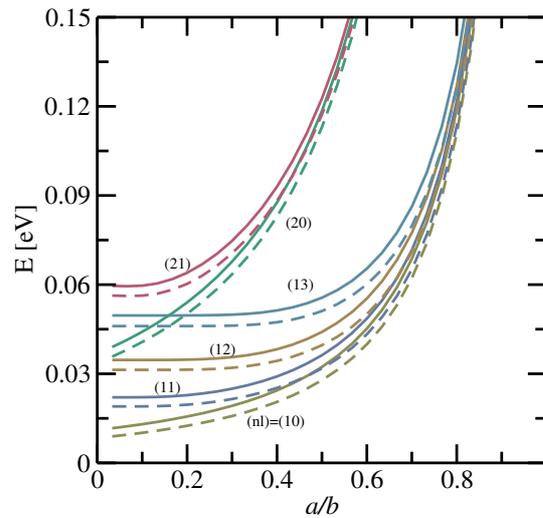


FIGURA 2.3: Autovalores del problema de un electrón en un punto cuántico heterogéneo para diferente número cuántico radial, n_r , y diferente momento angular, l . Las curvas continuas son para el caso que se consideran los efectos de potencial de auto-polarización, $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$, las curvas entrecortadas son para el caso en que no hay efectos de auto-polarización, $\epsilon_1 = \epsilon_2$.

Como primera observación de la figura 2.3, tenemos que la presencia de cargas inducidas aumenta la energía de los estados del electrón, mostrando que el efecto no puede ser despreciado. Sin embargo podría ser tratado en forma perturbativa dependiendo de las dimensiones del punto cuántico. Cuando el radio interior a aumenta, la influencia de las cargas inducidas se vuelve menos importante. Esto puede entenderse de la siguiente manera, cuando el ancho del pozo del punto cuántico se hace lo suficientemente chico, los estados del electrón no dependen del momento angular, además el potencial electrostático generado por las cargas inducidas en una de las superficies se contrarresta con el potencial generado por las cargas en la otra superficie, generando así que el potencial de auto-polarización sea despreciable.

Por último, en la figura 2.4 mostramos las densidades de probabilidad de los primeros cuatro estados del electrón en el punto cuántico con $a/b = 0.5$. Todos los estados mostrados corresponden a estados con momento angular nulo, es decir $l = 0$, y para las dimensiones elegidas estos estados son estados ligados, por lo tanto su localización es dentro del pozo de potencial y a partir de la figura puede apreciarse el comportamiento de la función de onda cerca de las interfaces de los

materiales del punto cuántico, este comportamiento está dado por las condiciones de empalme mencionadas en las Ecs. (2.6), (2.7), (2.8) y (2.9).

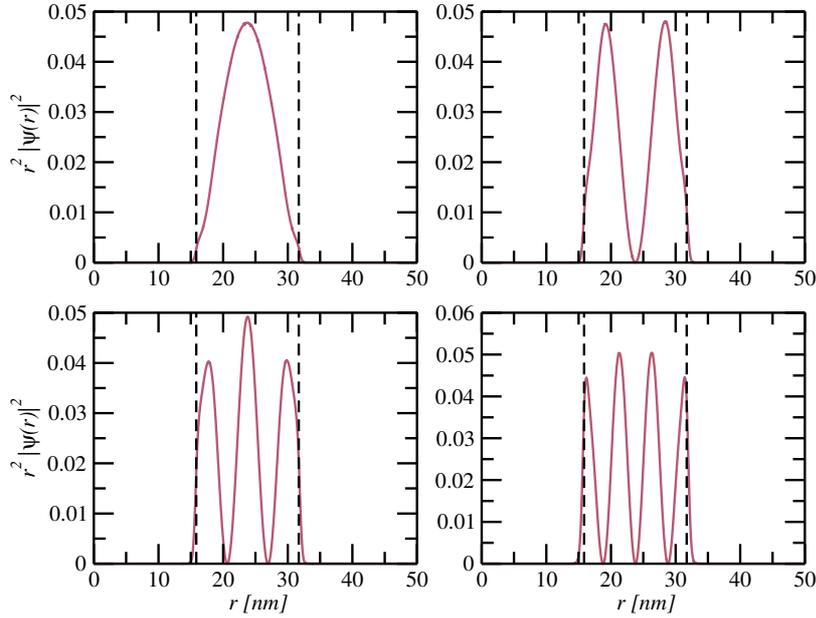


FIGURA 2.4: Densidades de probabilidad radial de los primeros cuatro estados, con momento angular nulo, de un electrón confinado en un punto cuántico heterogéneo. Las líneas verticales entrecortadas son los límites del pozo de potencial.

Antes de pasar a la siguiente sección, es importante mencionar que si bien el problema del confinamiento de un hueco en un punto cuántico heterogéneo es distinto al del electrón, ya que los parámetros son distintos, el comportamiento cualitativo de ambos problemas es el mismo, es por esta razón que no mostramos los resultados para el caso del hueco.

2.5. Resultados de dos partículas

Ahora nos vamos a concentrar en el problema del par interactuante electrón-hueco, es decir, un excitón confinado en un punto cuántico heterogéneo. El Hamiltoniano para este sistema está dado por la Ec. (2.4). Para escribir la interacción electrostática entre las partículas vamos a continuar con la misma suposición realizada en la sección anterior sobre la localización de las partículas. Dentro de esta aproximación el potencial de interacción es

$$V_{elec}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = -\frac{e^2}{\epsilon_1} \sum_{l,m} Y_{lm}(\theta_e, \varphi_e) Y_{lm}^*(\theta_h, \varphi_h) \times \frac{4\pi}{(2l+1)(1-pq)} [r_{<}^l + p r_{<}^{-(l+1)}][r_{>}^{-(l+1)} + q r_{>}^l], \quad (2.32)$$

donde p y q están dados por las Ecs. (2.24) y (2.25) respectivamente, $r_{<} = \min(r_e, r_h)$ y $r_{>} = \max(r_e, r_h)$. Este potencial se obtiene tomando $q_1 = -q_2 = -e$, $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_e$ y $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_h$ en las Ecs. (2.19), (2.23) y (2.30).

Si bien el electrón y el hueco pueden ser consideradas partículas distinguibles, el estado cuántico del excitón no va a ser un estado separable, de hecho existe un entrelazamiento entre las partículas debido a la interacción entre ellas, pero en cierto régimen algunos autores consideran que la función de onda del excitón es separable, es decir es producto de dos funciones de onda, una correspondiente al electrón y otra al hueco [19].

En nuestro modelo, podemos definir la energía de ligadura del excitón como el valor de expectación de la interacción electrostática entre las partículas, en forma matemática esto es

$$E_{lig} = -\langle \psi_\alpha | V_{elec}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) | \psi_\alpha \rangle, \quad (2.33)$$

donde $|\psi_\alpha\rangle$ es el autoestado del Hamiltoniano del excitón. Definida de esta forma, la energía de ligadura es una cantidad positiva.

En la figura 2.5 mostramos el comportamiento de la energía de ligadura del excitón en un punto cuántico como función del cociente a/b . Los estados cuánticos estudiados son estados en los cuales el electrón y el hueco tienen momento angular nulo, es decir $l_e = l_h = m_e = m_h = 0$. En la figura se pueden observar dos conjuntos de datos bien definidos, el conjunto superior, con líneas continuas, corresponden al problema en el cual se consideran los efectos de polarización tanto el Hamiltoniano de una partícula como en la interacción entre el electrón y el hueco, mientras que el conjunto inferior, con líneas entrecortadas, es para el caso en el que no hay cargas de polarización y la interacción que liga las partículas es el potencial de Coulomb

$$V_c(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \frac{-e^2}{\epsilon_1 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}. \quad (2.34)$$

Si bien el comportamiento cualitativo de los dos conjuntos de datos es similar hay que tener en cuenta los valores numéricos obtenidos para dos casos, los cuales muestran la influencia de las cargas de polarización en la estructura, estas cargas logran que el electrón y el hueco estén más ligados.

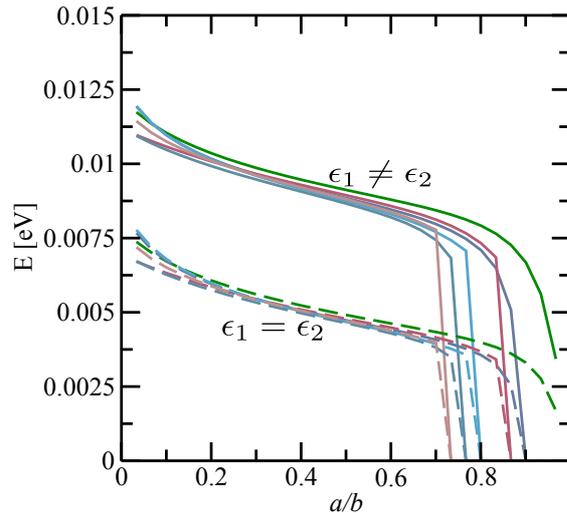


FIGURA 2.5: Energía de ligadura de un excitón confinado en un punto cuántico heterogéneo. Se muestran los resultados obtenidos para el caso en el que se tienen en cuenta las cargas de polarización ($\epsilon_1 \neq \epsilon_2$) y para el caso en el que no se consideran las cargas de polarización ($\epsilon_1 = \epsilon_2$). Los estados considerados tienen momento angular nulo.

La característica más notable en ambos conjuntos de datos es que todas las curvas decrecen en forma monótona como función de a/b . Este comportamiento se puede explicar de la siguiente manera, cuando se incrementa el radio del núcleo del punto cuántico, el electrón y el hueco son empujados hacia los bordes externos del pozo de potencial, llevando a un incremento de la distancia relativa entre las partículas y como consecuencia a un decrecimiento de la energía de ligadura. El cambio abrupto en las curvas, a partir de los cuales la energía de ligadura se vuelve despreciable, ocurre en los radios donde una de las partículas deja de estar confinada por el pozo de potencial, por lo tanto podemos asumir que el electrón y el hueco dejan de interactuar.

Un método frecuentemente utilizado para obtener las energías de los estados excitónicos es el método perturbativo aplicado sobre el potencial de interacción entre las partículas. Para evaluar los límites de dicha aproximación resolvimos el problema numéricamente utilizando el método variacional sobre el Hamiltoniano del excitón, Ec. (2.4), y resolviendo por separado el Hamiltoniano para de partícula y luego aplicando teoría de perturbaciones sobre la interacción de la partícula. En la figura 2.6 se muestra, como función del cociente a/b , la energía de ligadura, Ec. (2.33), para los siguientes casos: la curva superior corresponde a la energía de ligadura del estado fundamental del excitón obtenido diagonalizando el Hamiltoniano Ec. (2.4), la curva siguiente es la energía de ligadura para el estado fundamental del excitón en el cual no se incluyen los efectos de autopolarización, Ec. (2.31), en el Hamiltoniano de una partícula, Ec. (2.5). Las dos curvas siguientes corresponden a los mismos problemas pero donde se utilizó la teoría de perturbaciones sobre la interacción entre las partículas. En todos los casos la interacción es el potencial dado en la ecuación (2.32).

A partir de la figura 2.6 podemos observar que los efectos del potencial de autopolarización incrementan la energía de ligadura, pero su efecto no es muy notable y además no modifica el comportamiento de dicha cantidad. Por otro lado, vemos que para pozos de potencial anchos, $a/b < 0.2$, el método perturbativo no da una buena aproximación de la energía de ligadura, mientras que para pozos angostos, todos los métodos estudiados tienen el mismo comportamiento y la diferencia entre éstos es despreciable.

2.6. Control de estados excitónicos

Uno de los principales motivos por los cuales se estudia el confinamiento de partículas en puntos cuánticos es que éstos son una plataforma muy atractiva para el procesamiento de información cuántica, debido a las propiedades ópticas y electrónicas de estos sistemas. En esta sección vamos a estudiar cómo lograr transiciones entre los distintos estados excitónicos cuando se aplica un campo externo dependiente del tiempo sobre el sistema.

Para describir la interacción del campo externo aplicado y los estados del sistema es necesario agregar el siguiente término al Hamiltoniano excitónico,

$$H_{ext}(t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t), \quad (2.35)$$

donde \mathbf{d} es el vector momento dipolar eléctrico del par electrón-hueco y $\mathbf{E}(t)$ es el campo eléctrico externo aplicado sobre el sistema. En el formalismo de segunda

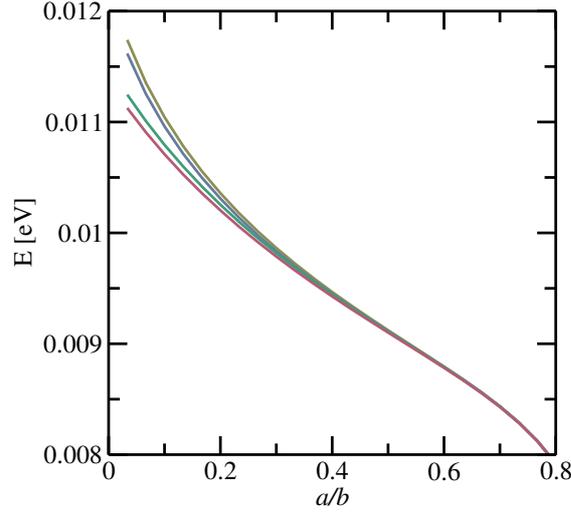


FIGURA 2.6: Energía de ligadura del estado fundamental del excitón. La curva superior se obtiene a partir del estado fundamental del Hamiltoniano Ec. (2.4). La siguiente curva el estado fundamental se obtiene diagonalizando el Hamiltoniano Ec. (2.4) pero no se incluye el potencial de autopolarización en el Hamiltoniano de una partícula. Las dos curvas más bajas son los mismos casos pero la interacción entre el electrón y el hueco es tratada como una perturbación.

cuantificación, el Hamiltoniano de interacción con el campo externo puede ser escrito como

$$H_{ext}(t) = -E(t) \sum_{n,m} \left[\mu_{nm}^* a_n^\dagger b_m^\dagger + \mu_{nm} a_n b_m \right], \quad (2.36)$$

donde a_n^\dagger (a_n) es el operador creación (aniquilación) de un electrón en la banda de conducción y b_m^\dagger (b_m) es el operador creación (aniquilación) de un hueco en la banda de valencia. La dependencia temporal del campo eléctrico es una dependencia sinusoidal $E(t) = \varepsilon_0 \cos(\omega t)$. Los índices n y m corresponden a las componentes de la parte del electrón y del hueco de la función de onda del excitón. Los coeficientes μ_{nm} en la Ec. (2.36) son los elementos de matriz del operador momento dipolar, dados por

$$\mu_{nm} = \mu_{bulk} \int \phi_n^e(\mathbf{r}) \phi_m^h(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.37)$$

donde μ_{bulk} es el momento dipolar correspondiente a la transición de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción en el sólido, las funciones $\phi^e(\mathbf{r})$ y $\phi^h(\mathbf{r})$ son las componentes del electrón y del hueco de la función de onda del excitón.

Para analizar las transiciones entre los estados cuánticos del excitón tenemos que determinar la evolución temporal de los estados, esta evolución está gobernada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad (2.38)$$

donde Ψ es el estado cuántico y H es el Hamiltoniano del excitón al cual se le agrega el término de interacción con el campo externo.

Como estamos interesados en estudiar las transiciones entre estados excitónicos con el fin de usarlo como procesador de información cuántica vamos a definir los estados base de un qubit a partir de los estados excitónicos. El estado $|0\rangle$ lo asignaremos al estado vacío, esto es, no hay un excitón confinado en el punto cuántico, mientras que el estado $|1\rangle$ lo definimos como el estado fundamental del excitón. Vale la pena mencionar que el estado vacío está definido como la ausencia de electrones en la banda de conducción y la ausencia de huecos en la banda de valencia.

Para analizar las transiciones entre los estados base del qubit haremos la evolución temporal del estado cuántico inicializado en el estado $|0\rangle$. En el caso de que el qubit sea ideal, las transiciones entre los estados se producirían perfectamente, es decir, $|U_0(t)|^2 + |U_1(t)|^2 = 1$ donde $|U_0(t)|$ y $|U_1(t)|$ son las probabilidades, dependientes del tiempo, de que el excitón esté en el estado $|0\rangle$ o en el estado $|1\rangle$ respectivamente, esto se traduce en que no existe una pérdida de probabilidad. En un sistema más realista esto no se cumple, por lo tanto existe probabilidad de que $|U_0(t)|^2 + |U_1(t)|^2 < 1$. La pérdida o *leakage*, por su término en inglés, es una buena medida para determinar el desempeño de un sistema como un qubit. Para un dado tiempo t , se define como $1 - (|U_0(t)|^2 + |U_1(t)|^2)$. Su origen se debe a que el campo externo usado para generar transiciones entre los estados base del qubit también produce transiciones a estados excitados del excitón. Otro motivo por el cual hay una pérdida de probabilidad es la interacción con el entorno del sistema, por ejemplo en sólidos, las vibraciones de las redes cristalinas suelen generar pérdida de probabilidad de los estados cuánticos.

Para obtener la evolución temporal del estado cuántico vamos a usar un método estándar, el cual consiste en expandir la función de onda dependiente del tiempo en términos de los autoestados del Hamiltoniano, y luego derivar un sistema de ecuaciones diferenciales para los coeficientes. Matemáticamente esto es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n U_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\mathbf{r}), \quad (2.39)$$

donde

$$H\Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r}), \quad (2.40)$$

es el problema de autovalores y H es el Hamiltoniano definido en la Ec. (2.4). A partir de estas ecuaciones es posible deducir un sistema de ecuaciones para los coeficientes $U_n(t)$,

$$i \frac{\partial U_k(t)}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t) \langle \Phi_k | H_{ext} | \Phi_n \rangle e^{i\omega_{kn}t}, \quad (2.41)$$

donde $\omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar$.

Para mostrar los resultados numéricos vamos utilizar el punto cuántico de las secciones anteriores y vamos fijar el valor $a/b = 0.5$. En la figura 2.7, se muestra el comportamiento de las probabilidades de ocupación $|U_0(t)|^2$ y $|U_1(t)|^2$ como función del tiempo para distintas intensidades del campo externo. En los tres casos mostrados la frecuencia del campo externo es la frecuencia de resonancia del excitón, es decir $\omega_{res} = E_0/\hbar$, con E_0 la energía del estado fundamental del excitón. Para obtener estos resultados, resolvimos el sistema de ecuaciones definidos en Ec. (2.41) utilizando el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden y utilizamos un total de 30 estados.

De la figura 2.7, se observa que se pueden lograr transiciones entre los estados del qubit en tiempos del orden del pico-segundo o en tiempos menores, sin una gran

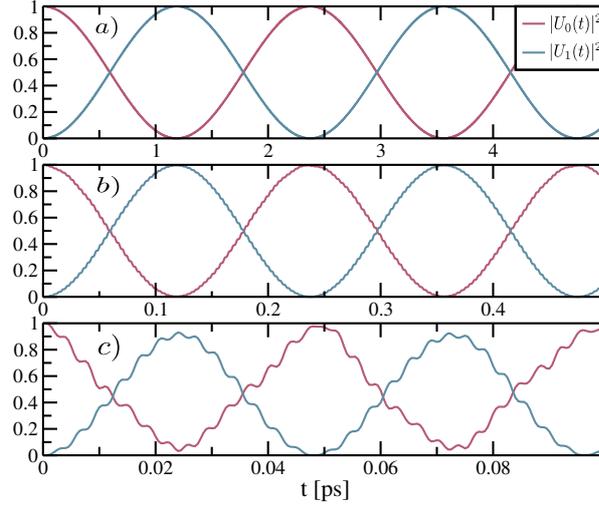


FIGURA 2.7: Evolución temporal de las probabilidades de ocupación de los estados de qubit para distintas intensidades del campo externo. De arriba a abajo, a) intensidad de campo $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^{-3} \text{ eV/nm}$, b) $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$ y c) $\varepsilon_0 = 5 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$.

pérdida de probabilidad, pero al aumentar la intensidad del campo externo aplicado al sistema la evolución temporal del sistema se vuelve menos armónico y a la vez aumenta la pérdida generada en cada transición.

Como mencionamos antes y en base lo mostrado en la figura 2.7, las probabilidades de ocupación no alcanzan el valor de la unidad, es decir la transición no es perfecta entre los dos estados del qubit. De todas formas, para sistemas con un número finito de estados, hay una probabilidad finita de que el estado del sistema vuelva a su estado inicial para tiempos suficientemente largos. En nuestro caso, para resolver el sistema de ecuaciones definidos en Ec. (2.41), tuvimos que restringirnos a un número finito de estados excitónicos, por este motivo es útil introducir la pérdida promedio, L_p , la cual está definida como,

$$L_p = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} [1 - (|U_0(t')|^2 + |U_1(t')|^2)] dt'. \quad (2.42)$$

En la figura 2.8 se muestra el promedio temporal de la pérdida, definido en Ec. (2.42). En la figura de la izquierda se muestran como función de la intensidad del campo externo y en la figura de la derecha como función de la frecuencia del campo externo. Los datos en la figura 2.8a) se muestran en escala log-log y cada conjunto de datos corresponde a una frecuencia del campo externo distinta. Podemos observar que la pérdida se comporta en forma lineal para intensidades de campo menores a 0.02 eV/nm para todas las frecuencias, pero al sobrestimar la frecuencia de resonancia la pérdida aumenta respecto a subestimar dicha frecuencia, lo cual muestra la importancia de conocer la frecuencia de resonancia y de poder sintonizarla con el menor error posible.

Por otro lado, en la figura 2.8b), tenemos la pérdida como función de la frecuencia para distintas intensidades de campos, las cuales corresponden a las usadas en la figura 2.7. La curva más baja se obtiene usando una intensidad de $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^{-3} \text{ eV/nm}$, la segunda curva es para $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$, por último, la tercer curva para $\varepsilon_0 = 5 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$. En este caso tenemos que la pérdida es menor cuando la intensidad del campo es baja, pero aún así hay frecuencias para las cuales la pérdida

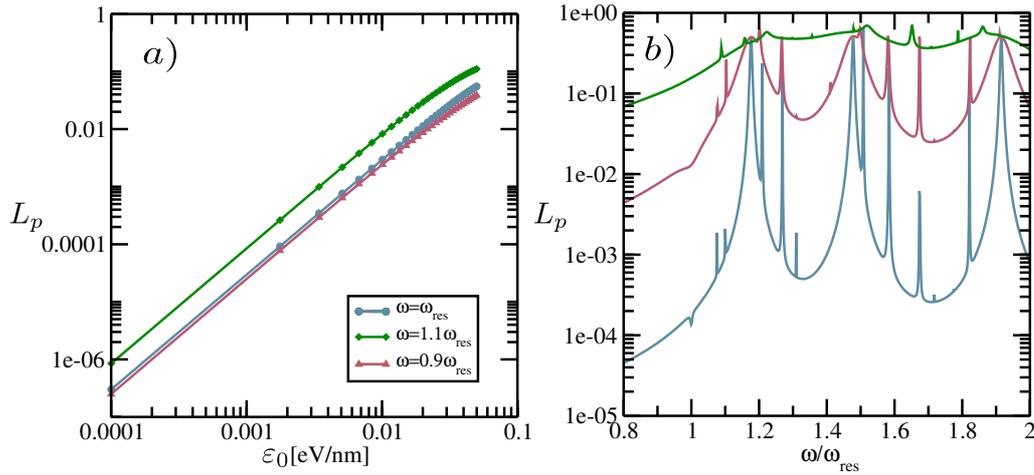


FIGURA 2.8: *a)* Pérdida de probabilidad como función de la intensidad del campo externo, para distintas frecuencias de sintonización. *b)* Pérdida de probabilidad como función de la frecuencia del campo externo para distintas intensidades, las cuales corresponde a las usadas en la figura 2.7. De abajo hacia arriba las intensidades usadas son $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^{-3} \text{ eV/nm}$, $\varepsilon_0 = 1 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$ y $\varepsilon_0 = 5 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$.

toma valores cercanos a la unidad, es decir, la pérdida es máxima por lo tanto el sistema se encuentra en un estado cuántico el cual no corresponde a los estados base del qubit. Los picos que pueden apreciarse en la figura, corresponden a transiciones a estados excitónicos con energías cercanas a las del estado fundamental. Vale la pena mencionar que si la intensidad de campo es lo suficientemente baja, no se generan transiciones entre los estados, es decir, la probabilidad $|U_0(t)|^2$ oscila entre dos valores, pero nunca se anula, y la probabilidad $|U_1(t)|^2$ también oscila entre dos valores pero nunca toma el valor de la unidad. Esto no se podría apreciar en la figura 2.8, ya que la pérdida promedio sería despreciable, por lo tanto la intensidad de campo utilizada tiene que ser tal que se generen las transiciones entre los estados base de qubit.

En conclusión es posible generar transiciones entre los estados base de qubit con pérdida de probabilidad despreciable cuando la frecuencia del campo es igual a la frecuencia de resonancia entre los estados, $\omega_0 = \omega_{res} = E_0/\hbar$ y con intensidades de campo $\varepsilon_0 < 1 \cdot 10^{-2} \text{ eV/nm}$. Hay que tener presente que si la intensidad de campo es mucho más chica no se generan transiciones entre los estados.

2.7. Resumen y conclusiones

En este capítulo estudiamos las propiedades espectrales de partículas confinadas en puntos cuánticos semiconductores heterogéneos con simetría esférica y, a partir de un modelo simple, analizamos las transiciones entre los estados cuánticos de un excitón confinado en la estructura.

Para resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo utilizamos el método variacional de Rayleigh-Ritz y el conjunto de funciones *B*-splines como base del espacio, en particular se tuvo especial cuidado en la definición de la base para que ésta nos permita obtener buenas aproximaciones tanto de los autovalores de cada Hamiltoniano estudiado y de las funciones de onda correspondientes, es

decir, que las funciones de onda variacionales obtenidas satisfagan las condiciones de empalme descritas en las Ecs. (2.6), (2.7), (2.8) y (2.9).

Iniciamos nuestro estudio con el problema de una partícula (electrón o hueco) confinada en un punto cuántico. Realizamos una comparación entre distintos enfoques que hicimos especial énfasis en el potencial que se genera por la presencia de una partícula con carga eléctrica en una estructura en la cual la constante dieléctrica cambia de valor de un material a otro. Encontramos que el espectro de los estados ligados de la partícula confinada depende del tipo de confinamiento que se considere, es decir, si el confinamiento se modela como un pozo finito o un pozo infinito (aproximación de confinamiento fuerte). Para pozos de potencial anchos, en ambos modelos se obtiene una buena aproximación del estado fundamental, pero para pozos angostos o para estados excitados, las energías obtenidas a partir del modelo de confinamiento fuerte difieren notablemente de los resultados obtenidos usando un pozo de potencial finito. En conclusión es para una descripción precisa del espectro del punto cuántico hay que considerar un potencial de confinamiento finito.

Por otro lado, analizamos la importancia del potencial de auto-polarización, el cual podemos decir que puede ser tratado en forma perturbativa casi para cualquier dimensión del punto cuántico analizada. En particular, para pozos de potencial angostos este potencial puede ser despreciado.

Respecto al problema del par interactuante electrón-hueco, analizamos la energía de ligadura, Ec. (2.33), de dicho sistema. Encontramos que dicha energía decrece en forma monótona cuando se aumenta el radio del núcleo del punto cuántico y esto puede ser interpretado como un aumento en la distancia entre las partículas. Es importante resaltar que dicho comportamiento se manifiesta para el caso en el que se consideran las cargas de polarización en las interfaces de los materiales y en el caso en que no se consideran dichas cargas. Aún así, la magnitud de la energía de ligadura en ambos casos es distinta y los resultados obtenidos muestran que las cargas de polarización incrementan la energía de ligadura.

Por último, a partir de los estados excitónicos obtenidos definimos los estados base para un qubit, en particular elegimos el estado vacío y el estado fundamental como los estados base y estudiamos la posibilidad de hacer transiciones entre dichos estados cuando se aplica un campo externo al sistema. Encontramos que es posible generar transiciones entre los estados base de qubit con poca pérdida de probabilidad en escalas de tiempo del orden de los pico-segundos.

Capítulo 3

Niveles excitónicos y propiedades espectrales de puntos cuánticos multicapas

En este capítulo presentamos el estudio de las propiedades espectrales de puntos cuánticos con simetría esférica dentro del marco de trabajo del método $k \cdot p$ de ocho bandas. Mostramos resultados numéricos de los niveles de energía de las distintas bandas consideradas en el modelo para dos puntos cuánticos semiconductores formados por distintos materiales. Utilizando el método iterativo de Hartree calculamos la energía de ligadura del par interactuante electrón-hueco. Encontramos que la energía de ligadura del estado fundamental de un excitón en un punto cuántico simple es una función decreciente del radio del núcleo. Para el caso de un punto cuántico doble, la energía de ligadura muestra un salto en su comportamiento, el cual puede estar relacionado con la localización de los estados electrónicos del sistema.

3.1. Introducción

Comprender el proceso de fabricación de nanoestructuras es un requisito para entender las propiedades básicas del confinamiento de partículas en dichas estructuras. Frecuentemente, la descripción de puntos cuánticos comienza con la introducción de diferentes esquemas de clasificación, por ejemplo la caracterización del confinamiento según la relación de la longitud de confinamiento y el radio de Bohr del excitón en el correspondiente material (confinamiento fuerte, medio o débil). Otra clasificación posible es a partir de la relación entre la energía de confinamiento y la energía de los fonones, o la diferencia en las constantes dieléctricas entre los materiales semiconductores que constituyen la nanoestructura.

Por lo tanto, el proceso de fabricación y caracterización tienen que proveer con información útil para el estudio de las propiedades electrónicas y ópticas de las nanoestructuras. La información más importante que puede obtenerse del análisis de fabricación está relacionada con las dimensiones, la estructura de la red cristalina, la caracterización de las interfaces de los materiales, entre otros.

Por estos motivos es importante tener modelos teóricos que consideren las distintas características de las nanoestructuras que se generan en el proceso de fabricación. En algunos métodos, como lo es el caso de la aproximación de masas efectivas, estas características son consideradas de manera indirecta, no son consideradas o requieren de un tratamiento matemático previo. Por ejemplo, la masa efectiva de las partículas en un semiconductor se obtiene de considerar la interacción entre las distintas bandas de energía y por ende se considera la estructura cristalina. Otro ejemplo es

la interacción electrostática entre el electrón y el hueco en un punto cuántico, como mostramos en el capítulo 2. El hecho de que la constante dieléctrica dependa de las coordenadas espaciales lleva a un potencial de interacción distinto al potencial de Coulomb.

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ es un método semi-empírico que ha sido aplicado en forma exitosa para calcular la estructura de bandas y las propiedades espectrales de sólidos [30, 31], puntos cuánticos [32, 33] y nano-hilos semiconductores [34, 35]. Este método se deduce a partir de primeros principios y se caracteriza por depender fuertemente de la estructura que se está estudiando y de los materiales que la conforman.

En este capítulo vamos a aplicar el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para estudiar las propiedades espectrales de partículas confinadas en puntos cuánticos semiconductores. En la sección 3.2 vamos a realizar una breve descripción del método y su aplicación tanto a materiales *bulk* como en heteroestructuras. La sección 3.3 está dedicada al estudio del confinamiento de electrones, huecos y excitones en un punto cuántico igual al considerado en el capítulo 2, pero ahora lo vamos a hacer utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. En la sección 3.4 vamos a estudiar un punto cuántico doble, el cual fue analizado dentro de la aproximación de masas efectivas y por último discutiremos los resultados obtenidos en la sección 3.5.

3.2. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

En esta sección vamos a hacer una breve descripción del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, mostrando la deducción de sus principales ecuaciones. En particular vamos a mostrar cómo podemos implementar el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ cuando se quiere estudiar el espectro de una heteroestructura fabricada por diferentes materiales semiconductores.

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ puede ser derivado de la ecuación de Schrödinger de un electrón en un potencial periódico. Usando el teorema de Bloch la solución de dicha ecuación se expresa como

$$\Phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

donde n es el índice de la banda, \mathbf{k} es vector de onda en la primera zona de Brillouin y $u_{n,\mathbf{k}}$ son las funciones de Bloch que tiene la periodicidad de la red cristalina. Vamos a asumir que el Hamiltoniano de un electrón en el sólido consiste del término cinético, un potencial periódico y la interacción espín-órbita:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p}, \quad (3.2)$$

con m_0 la masa del electrón libre.

A partir de las Ecs. (3.1) y (3.2) es posible obtener la ecuación para las funciones $u_{n,\mathbf{k}}$

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{k} \right] u_{n,\mathbf{k}} = E_{n,\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}, \quad (3.3)$$

en $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$, la Ec. (3.3) se reduce a

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V \right) u_{n,\mathbf{0}} = E_{n,\mathbf{0}} u_{n,\mathbf{0}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.4)$$

Ecuaciones similares se pueden obtener para cualquier vector de onda \mathbf{k} . Ya que las funciones $u_{n,0}$ son funciones periódicas, la Ec. (3.4) es más simple de resolver que la ecuación dada por el Hamiltoniano en Ec. (3.2), además las soluciones de la Ec. (3.4) forman un conjunto completo y ortogonal de funciones bases, por lo tanto, una vez que $E_{n,0}$ y $u_{n,0}$ son obtenidos, se puede aplicar teoría de perturbaciones sobre los términos $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$, $\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m_0}$ y $\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{k}$ de la Ec. (3.3). Este método para la calcular la relación de dispersión de las bandas es conocido como el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. En general el método puede aplicarse para calcular la relación de dispersión cerca de cualquier punto \mathbf{k}_0 expandiendo Ec. (3.3) alrededor de dicho punto, pero dada la dependencia de los términos perturbativos con el vector de onda el método funciona mejor para valores chicos de \mathbf{k} .

Una de las aplicaciones más directas que tiene el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ es la aproximación de masas efectivas. Esta aproximación se obtiene aplicando la teoría de perturbaciones a una única banda. Si asumimos que la banda n es no degenerada, la energía $E_{n,\mathbf{k}}$ puede obtenerse de la expansión hasta segundo orden en \mathbf{k} en términos de las energías $E_{n',0}$ del Hamiltoniano no perturbado, es decir

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n,0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n',0} \rangle|^2}{E_{n,\mathbf{k}} - E_{n',\mathbf{k}}}. \quad (3.5)$$

El término lineal en \mathbf{k} desaparece porque se asume que $E_{n,0}$ es un mínimo o un máximo. A partir de la Ec. (3.5) se define la masa efectiva, m^* , como

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2 k^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n,0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n',0} \rangle|^2}{E_{n,\mathbf{k}} - E_{n',\mathbf{k}}}, \quad (3.6)$$

de esta forma, la relación de dispersión es

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (3.7)$$

Por ejemplo, si consideramos que n es el índice de la banda de valencia, la Ec. (3.7) nos dice que el electrón se comporta como una partícula libre, es decir una onda plana, pero la masa del electrón en el sólido difiere de la masa del electrón libre, esto se debe al acoplamiento entre los estados electrónicos en diferentes bandas.

Si bien el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ permite calcular la estructura de bandas de un sólido, es generalmente usado para estudiar las bandas de conducción y de valencia. Para ello se implementa el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas, en el cual se considera la banda de conducción, la banda de valencia y la interacción espín-órbita. Con estas consideraciones se obtiene una representación matricial para el Hamiltoniano cuyos autovalores representan la energía de cada banda. Por ejemplo, para una estructura cristalina zincblende, el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas es

$$H = \begin{pmatrix} A & 0 & V^* & 0 & \sqrt{3}V & -\sqrt{2}U & -U & \sqrt{2}V^* \\ 0 & A & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V^* & 0 & -V & \sqrt{2}V & U \\ V & -\sqrt{2}U & -P+Q & -S^* & R & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V & -S & -P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\ \sqrt{3}V^* & 0 & R^* & 0 & -P-Q & S^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R^* \\ -\sqrt{2}U & -V^* & 0 & R^* & S & -P+Q & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \\ -U & \sqrt{2}V^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}R^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}Q & -P-\Delta & 0 \\ \sqrt{2}V & U & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R & \sqrt{\frac{3}{2}}S & 0 & -P-\Delta \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Los elementos en el Hamiltoniano Ec. (3.8) están dados por

$$A = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (3.9)$$

$$P = -E_v + \gamma_1 \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (3.10)$$

$$Q = \gamma_2 \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (3.11)$$

$$R = -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} [\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y], \quad (3.12)$$

$$S = \sqrt{3}\gamma_3 \frac{\hbar^2}{m_0} k_z (k_x - ik_y), \quad (3.13)$$

$$U = \frac{i}{\sqrt{3}} P_0 k_z, \quad (3.14)$$

$$V = \frac{i}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y), \quad (3.15)$$

donde E_c es la energía de la banda de conducción, E_v es la energía de la banda de valencia, el *gap* entre las bandas de valencia y de conducción es entonces $E_g = E_c - E_v$, γ_1 , γ_2 y γ_3 son los parámetros de Luttinger que se determinan experimentalmente, Δ es la interacción espín-órbita y P_0 es el acoplamiento entre las bandas de conducción y de valencia, dicha cantidad está relacionada con la energía de Kane, E_p , por la relación

$$E_p = \frac{2m_0 P_0^2}{\hbar^2}. \quad (3.16)$$

En la figura 3.1 mostramos un esquema de las bandas de energía empleadas en el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas. Se puede observar el *gap* de energía, energía de *split-off* que representa la interacción espín-órbita, Δ , y la energía de Kane E_p .

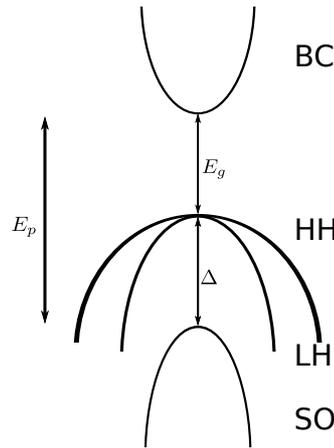


FIGURA 3.1: Diagrama de bandas para el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas, con la banda de conducción (BC) y la banda de valencia (BV), la cual se divide en tres subbandas, una para el hueco pesado (*heavy hole*, HH), una para el hueco liviano (*light hole*, LH) y la interacción espín-órbita (*spin-orbit* SO).

Para obtener la representación matricial del Hamiltoniano hay que evaluar los elementos de matriz de dicho operador en las funciones de Bloch. Las funciones de

Bloch dependen de la red cristalina que se esté considerando, por lo tanto para cada red o para cada sólido hay una representación matricial del Hamiltoniano. La base usada para obtener el Hamiltoniano en Ec. (3.8) es

$$u_{1/2}^c = S \uparrow, \quad (3.17)$$

$$u_{-1/2}^c = S \downarrow, \quad (3.18)$$

$$u_{3/2,3/2}^v = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY) \uparrow, \quad (3.19)$$

$$u_{3/2,1/2}^v = \frac{i}{\sqrt{6}}[(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow], \quad (3.20)$$

$$u_{3/2,-1/2}^v = \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow], \quad (3.21)$$

$$u_{3/2,-3/2}^v = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY) \downarrow, \quad (3.22)$$

$$u_{1/2,1/2}^v = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY) \downarrow + Z \uparrow], \quad (3.23)$$

$$u_{1/2,-1/2}^v = \frac{i}{\sqrt{3}}[-(X - iY) \uparrow + Z \downarrow]. \quad (3.24)$$

Hasta ahora, todo lo que dijimos sobre el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ es para materiales *bulk*, es decir un único material sólido, pero este método también puede aplicarse a heteroestructuras como puntos cuánticos, pozos cuánticos o super redes formadas por dos o más materiales. Para estudiar heteroestructuras mediante el uso del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se hace uso de la teoría de Bastard [36] conocida como aproximación de función de onda envolvente. En el capítulo 2 explicamos en qué consiste esta aproximación cuando el Hamiltoniano del sistema está escrito en la aproximación de masas efectivas. En este capítulo vamos a ver cómo aplicar la aproximación de función de onda envolvente dentro del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

La aproximación de función de onda envolvente asume que, en cada material (por ejemplo materiales A y B), la función de onda puede expandirse en términos de una parte periódica, funciones de onda de Bloch, de la siguiente forma,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n f_n^{(A,B)}(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{0}}^{(A,B)}(\mathbf{r}), \quad (3.25)$$

y luego utilizar las condiciones de empalme en las interfaces de los materiales. La siguiente suposición es que las funciones periódicas, $u_{n,\mathbf{k}}$, en cada material son iguales. ésta es una buena aproximación para materiales con similitudes tanto químicas como estructurales.

En la ecuación (3.25), las funciones $f_n(\mathbf{r})$ son llamadas funciones de onda envolvente, las cuales varían mucho más lento que las funciones periódicas $u_{n,\mathbf{0}}(\mathbf{r})$.

Si se considera solo una banda, se recupera la aproximación de masas efectivas, tal como fue utilizada en el capítulo 2. En cambio, si se consideran más bandas es posible obtener un sistema de ecuaciones diferenciales para las funciones envolventes reemplazando $k_j = -i \frac{\partial}{\partial x_j}$ con $j = x, y, z$. El sistema de ecuaciones es entonces

$$H \mathbf{f}(\mathbf{r}) = E \mathbf{f}(\mathbf{r}), \quad (3.26)$$

donde $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ es un vector y cada componente es la función de onda envolvente correspondiente a cada banda, es decir

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{r}) \\ f_2(\mathbf{r}) \\ f_3(\mathbf{r}) \\ f_4(\mathbf{r}) \\ f_5(\mathbf{r}) \\ f_6(\mathbf{r}) \\ f_7(\mathbf{r}) \\ f_8(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

3.3. Exciton en un punto cuántico multicapa

En esta sección vamos a estudiar el espectro de un punto cuántico esférico igual al analizado en el capítulo 2, pero ahora lo vamos a hacer en el marco de trabajo del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

El espectro de energía del punto cuántico se obtiene utilizando la aproximación de función de onda envolvente dentro del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, donde el Hamiltoniano del sistema está dado por la ecuación (3.8) y los parámetros de los materiales son

CUADRO 3.1: Parámetros de los materiales *CdS* y *HgS* utilizados en el punto cuántico.

	E_g	E_p	Δ	ϵ	γ_1	γ_2	γ_3
<i>CdS</i>	2.42 eV	19.6 eV	0.08 eV	5.5	0.814	0.307	0.307
<i>HgS</i>	0.42 eV	21.0 eV	0.08 eV	11.36	12.2	4.2	4.2

$$\text{CBO} = 1.35 \text{ eV}$$

$$\text{VBO} = 0.65 \text{ eV}$$

En la tabla 3.1, CBO (*conduction band offset* por su sigla en inglés) es la diferencia de energía entre las bandas de conducción de los materiales y VBO (*valence band offset* por su sigla en inglés) es la diferencia de energía entre las bandas de valencia de los materiales.

En la figura 3.2 presentamos los autovalores del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, Ec. (3.8), para un punto cuántico con simetría esférica como el descrito por la figura 2.1. En la figura 3.2a) se muestran las energías correspondientes a la banda de conducción como función del radio del núcleo del punto cuántico, mientras que en la figura 3.2b) se muestran las energías de la banda de valencia. Para este caso, el radio exterior del punto cuántico lo fijamos en el valor 15 nm.

Los autovalores y autofunciones del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, Ec. (3.8), se obtuvieron utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz con el conjunto de funciones *B*-splines como base del espacio de Hilbert. En la sección A.4.2 del apéndice A, mostramos cómo realizar dicha implementación y damos las características de la base.

A partir de la figura 3.2a) podemos ver cómo a medida que el radio del núcleo del punto cuántico aumenta, es decir, disminuye el ancho de la capa intermedia, disminuye el número de estados electrónicos ligados dentro del punto cuántico. Lo mismo sucede con los estados de hueco en la banda de valencia, figura 3.2b). En

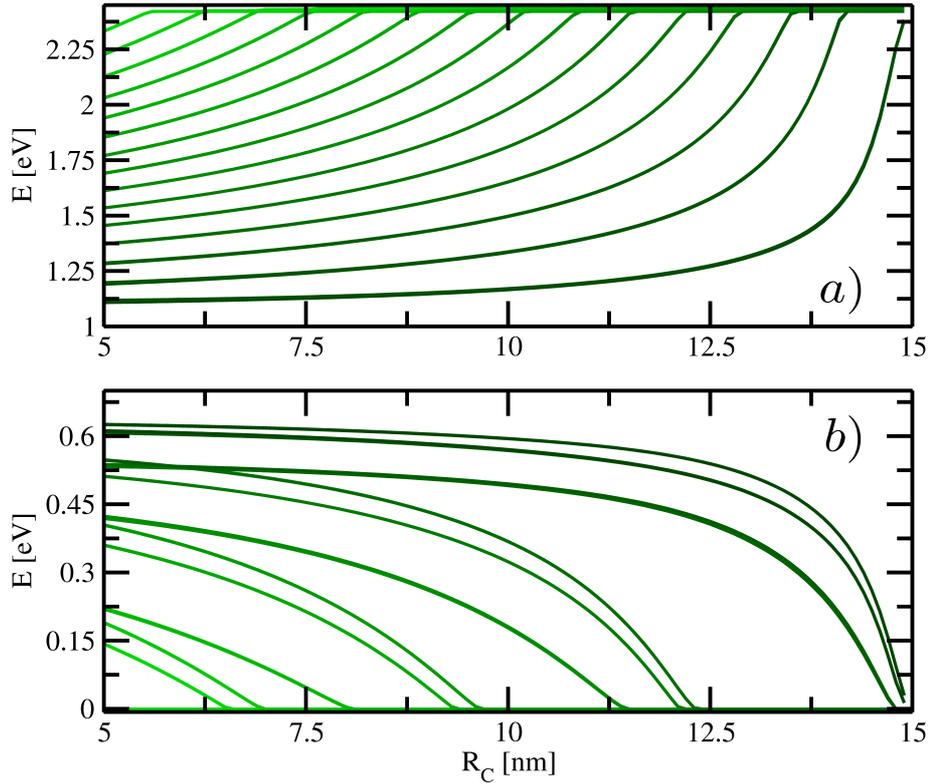


FIGURA 3.2: Espectro de energía de un punto cuántico con simetría esférica, figura 2.1. *a)* niveles de energía para la banda de conducción, *b)* niveles de energía para la banda de valencia.

el capítulo 2, dijimos que el punto cuántico elegido se caracterizaba por confinar a los electrones y a los huecos en la misma región espacial. En la aproximación de masas efectivas, el operador energía potencial del hueco se asemeja a una barrera de potencial (ver figura 2.1), pero dicho potencial es atractivo para los huecos, por lo tanto hay que imponer dicha condición sobre el sistema, por ejemplo, haciendo que el potencial del tipo barrera sea un pozo de potencial cuando se estudian los estados del hueco. ésto se debe a que la masa efectiva del hueco es negativa, ya que proviene de evaluar la derivada segunda de la energía respecto al vector de onda, y dicha cantidad es negativa como puede observarse en el diagrama 3.1 [30].

En la figura 3.2*b)*, también pueden observarse curvas que tienen distintos comportamientos, por ejemplo los cruces evitados para algunos radios del núcleo, fenómeno que no sucede en los estados electrónicos en la banda de conducción. Estos cruces entre los distintos niveles de energía son consecuencia de la interacción entre las distintas bandas de energías consideradas en el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y no pueden observarse utilizando la aproximación de masas efectivas.

Los resultados mostrados hasta ahora, utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, muestran los distintos efectos que se generan a partir de considerar más de una banda de energía para obtener el espectro del sistema, pero no muestran los efectos de la interacción entre un electrón y un hueco, es decir no muestran los efectos excitónicos. Para determinar estos efectos y obtener la energía de ligadura de un excitón vamos a usar la aproximación de Hartree [33, 37]. En la literatura existen otros métodos posibles para determinar los efectos excitónicos en nanoestructuras, ver las referencias [38, 39, 40].

En la aproximación de Hartree, asumimos que la función de onda del excitón es separable en las coordenadas de cada partícula, es decir se puede escribir como el producto de una función de onda asociada al electrón y una función de onda asociada al hueco. Matemáticamente $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_e(\mathbf{r}_e)\psi_h(\mathbf{r}_h)$, donde las funciones $\psi_e(\mathbf{r}_e)$ y $\psi_h(\mathbf{r}_h)$ se determinan en forma autoconsistente resolviendo las siguientes ecuaciones

$$[H + V_e] \psi_h = \tilde{E}_h \psi_h, \quad (3.28)$$

$$[H + V_h] \psi_e = \tilde{E}_e \psi_e, \quad (3.29)$$

donde los potenciales V_e y V_h son los potenciales electrostáticos generados por el electrón y el hueco respectivamente. Estos potenciales se determinan resolviendo la ecuación de Poisson correspondiente

$$-e|\psi_e|^2 = \epsilon_0 \nabla (\epsilon_s(\mathbf{r}) \nabla V_e), \quad (3.30)$$

$$e|\psi_h|^2 = \epsilon_0 \nabla (\epsilon_s(\mathbf{r}) \nabla V_h). \quad (3.31)$$

En las ecuaciones (3.28) y (3.29), H es el Hamiltoniano del sistema, en nuestro caso es el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas dado por la Ec. (3.8), E_e es la energía del electrón (menor autovalor en la banda de conducción) y E_h es la energía del hueco (mayor autovalor en la banda de valencia). Con todo esto, la energía de ligadura es [37]

$$E_b = (E_e - E_h) - (\tilde{E}_e - \tilde{E}_h) = (E_e - \tilde{E}_e) + (\tilde{E}_h - E_h). \quad (3.32)$$

En resumen, las energías y funciones de onda en la aproximación de Hartree se obtienen después de un cierto número de iteraciones. Se comienza calculando los autovalores y autovectores del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, Ec. (3.8), y se determinan las energías E_e y E_h y sus correspondientes funciones de onda $\psi_e(\mathbf{r})$ y $\psi_h(\mathbf{r})$. La primera iteración consiste en primero resolver las ecuaciones de Poisson, Ecs. (3.30) y (3.31), y luego calcular los nuevos autovalores y autovectores de los Hamiltonianos modificados, es decir, resolver las Ecs. (3.28) y (3.29). En este punto hay que tener en cuenta que solo el mayor autovalor de la banda de valencia de la Ec. (3.28) y el menor autovalor de la banda de conducción de la Ec. (3.29) son los únicos autovalores que tienen sentido físico ya que son los únicos autovalores que están siendo modificados por el método de Hartree, los demás autovalores de cada ecuación no tienen por qué tener sentido físico. Las siguientes iteraciones del método consisten en repetir el procedimiento de la primera iteración hasta que el método converja.

En este punto vale la pena hacer la siguiente observación: la interacción entre el electrón y el hueco es considerada cuando se resuelven, por separado, las Ecs. (3.28) y (3.29) y donde los potenciales de interacción están dados por las Ecs. (3.30) y (3.31). Estos potenciales tienen en cuenta la estructura del punto cuántico y por lo tanto el comportamiento de la constante dieléctrica del dispositivo.

En la figura 3.3a) se muestra la corrección al estado del electrón en la banda de conducción y en la figura 3.3b) la corrección al estado del hueco en la banda de valencia. Las curvas negras corresponden a los autovalores del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ tal como se muestran en la figura 3.2, las curvas rojas son los autovalores del electrón y del hueco luego de aplicar el método de Hartree para considerar los efectos de la interacción entre las partículas. Podemos observar que los autovalores modificados

por el método de Hartree siguen bastante cerca a los autovalores iniciales del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, a medida que aumenta el radio del núcleo las correcciones se vuelven menos importantes.

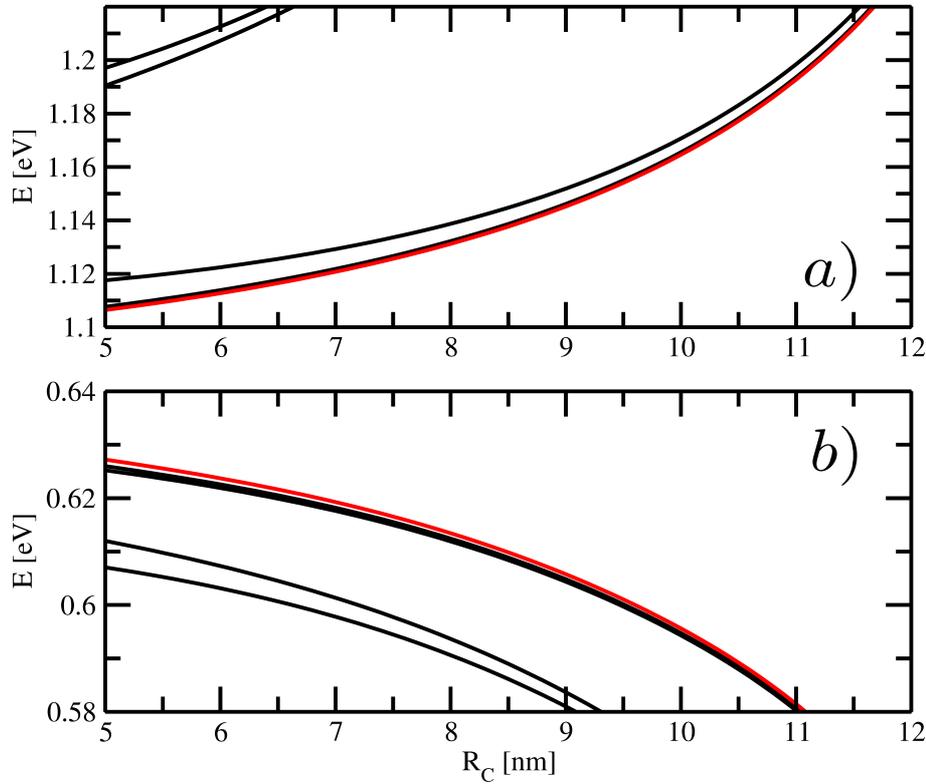


FIGURA 3.3: *a)* Correcciones al menor autovalor de la banda de conducción y *b)* correcciones al mayor autovalor de la banda de valencia, obtenidos a partir del método de Hartree. Las curvas negras corresponden a los autovalores del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, Ec. (3.8), y las curvas rojas son los autovalores modificados por el método de Hartree según las Ecs. (3.28), (3.29), (3.30) y (3.31).

En la figura 3.4 mostramos la energía de ligadura del excitón definida en la Ec. (3.32). En esta figura se pueden observar dos comportamientos distintos: inicialmente a medida que aumenta el radio del núcleo del punto cuántico la energía de ligadura del excitón decrece, un comportamiento similar a lo mostrado en la figura 2.5, luego dicha cantidad aumenta hasta un cierto radio para el cual ya no hay más estados ligados en el punto cuántico. El comportamiento mostrado por la energía de ligadura del excitón puede ser entendida de la siguiente manera: para radios del núcleo menores a $R_c = 12.6 \text{ nm}$, el electrón y el hueco tienden a estar lo más alejado posible, por esta razón es que cuando aumentamos R_c , disminuye la energía de ligadura, mientras que para radios mayores a $R_c = 12.6 \text{ nm}$, la situación se invierte y las partículas tienden a acercarse. Este es un comportamiento muy distinto al encontrado cuando estudiamos el mismo sistema dentro de la aproximación de masas efectivas en el capítulo 2, por este motivo es necesario continuar el estudio utilizando los dos enfoques.

Otra diferencia que encontramos entre los dos métodos empleados para el estudio de un excitón en un punto cuántico esférico, es la magnitud de la energía de ligadura obtenida en cada caso. En caso de los resultados obtenidos con método

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, la energía de ligadura es, aproximadamente, cinco veces más chica que la energía de ligadura obtenida dentro de la aproximación de masas efectivas. Hasta ahora no encontramos el motivo por el cual puede existir esta diferencia entre los distintos métodos.

Vale la pena mencionar que en la figura 3.4 solo se observa una única curva, correspondiente a lo que podemos llamar el estado fundamental del excitón. Esto es porque el método utilizado solo permite determinar los efectos de la interacción entre el electrón y el hueco para un único estado. Los demás estados cuánticos obtenidos a partir de el método de Hartree en el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ pueden no tener significado físico.

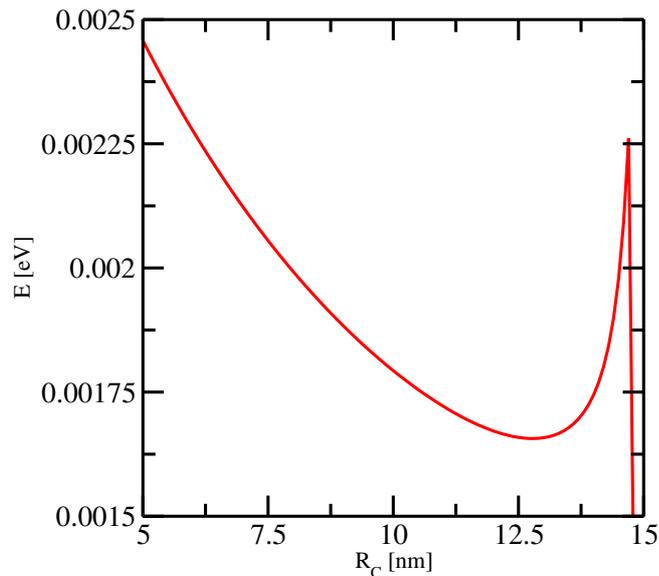


FIGURA 3.4: Energía de ligadura para el estado fundamental de un excitón confinado en punto cuántico con simetría esférica obtenida a partir de la aproximación de Hartree dentro del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

3.4. Propiedades espectrales de un punto cuántico doble

Recientemente, Ferrón y colaboradores, estudiaron, dentro de la aproximación de masas efectivas, el espectro y las densidades de probabilidad de un electrón confinado en un punto cuántico doble con simetría esférica [41, 42]. Encontraron que dependiendo de los parámetros del punto cuántico se puede determinar la localización espacial de los distintos estados cuánticos del sistema.

Un punto cuántico doble es una nanoestructura que presenta dos regiones del espacio en las cuales se pueden confinar las partículas. En la figura 3.5 mostramos un esquema de un punto cuántico doble junto con un diagrama de los perfiles de las bandas de valencia y de conducción. En esta sección vamos a estudiar, utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, las propiedades espectrales de un punto cuántico doble formado por los materiales *ZnS* (sulfuro de zinc) y *CdSe* (seleniuro de cadmio) igual al considerado en la referencia [42].

La estructura que vamos a estudiar está compuesta por un núcleo de *ZnS* de radio R_c , seguido por una primer capa de *CdSe* de radio exterior $R_1 = R_c + 0.8 \text{ nm}$, la tercer capa del punto está formada de *ZnS* la cual tiene un radio exterior $R_2 =$

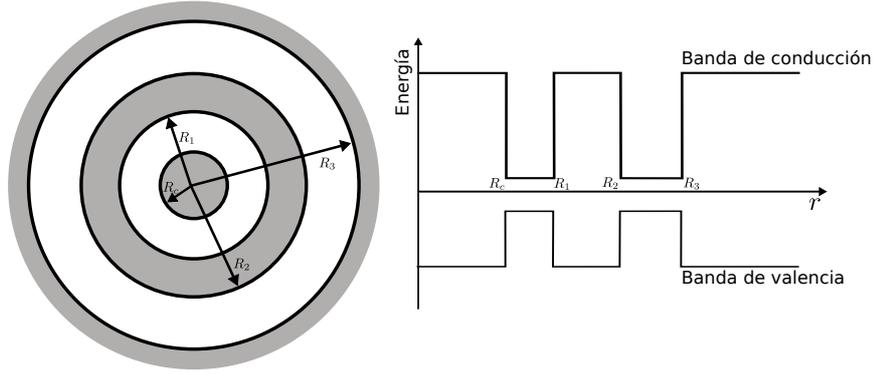


FIGURA 3.5: Esquema de un punto cuántico doble formado por dos materiales distintos y diagrama de los perfiles de las bandas de conducción y de valencia de la nanoestructura.

$R_1 + 3.5 \text{ nm}$, otra capa de $CdSe$ con radio exterior $R_3 = R_2 + 1 \text{ nm}$ y por último, el material que cubre toda la estructura es nuevamente ZnS .

En la referencia [42], los autores encontraron que dependiendo del radio del núcleo del punto cuántico, se pueden localizar los autoestados electrónicos con números cuánticos $n_r = 1$ y $l = 0, 1$, en el pozo interior del punto cuántico, mientras que el resto de los autoestados se localizan en el pozo exterior. Esta posibilidad de poder aislar dos autoestados del resto hace que este tipo de nanoestructura sea un candidato ideal para controlar los estados cuánticos con el objetivo de utilizarlo como procesadores de información cuántica.

Para los materiales elegidos para esta sección, los parámetros que usaremos en el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ están mostrados en la tabla 3.2.

CUADRO 3.2: Parámetros de los materiales ZnS y $CdSe$ utilizados en el punto cuántico doble.

	E_g	E_p	Δ	ϵ	γ_1	γ_2	γ_3
ZnS	3.68 eV	20.4 eV	0.074 eV	5.7	2.12	0.51	1.56
$CdSe$	1.75 eV	17.4 eV	0.24 eV	6.3	4.4	1.6	2.68

$$\text{CBO} = 0.9 \text{ eV}$$

$$\text{VBO} = 1.03 \text{ eV}$$

Los autovalores del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, tanto aquellos correspondientes a la banda de conducción como a los correspondientes a la banda de valencia, se muestran en la figura 3.6 como función del radio del núcleo. Vale la pena mencionar que el espectro del sistema es más complejo que el mostrado en la figura y que no existe un par de autovalores que estén energéticamente aislados del resto. El escaso número de autovalores mostrados se debe a que, en los cálculos numéricos, nos restringimos a estados con momento angular $l = 0$ y $l = 1$, ya que aumentar dicho número cuántico implica un costo computacional muy alto. En la referencia [42], dentro de la aproximación de masas efectivas, los autores calculan los estados de la banda de conducción del punto cuántico con estados de hasta $l = 20$, donde puede apreciarse la complejidad del espectro. Aún así, los resultados obtenidos con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

coinciden con los resultados obtenidos por Ferrón y colaboradores y encontramos que ocurre el mismo fenómeno respecto a la localización de los estados electrónicos.

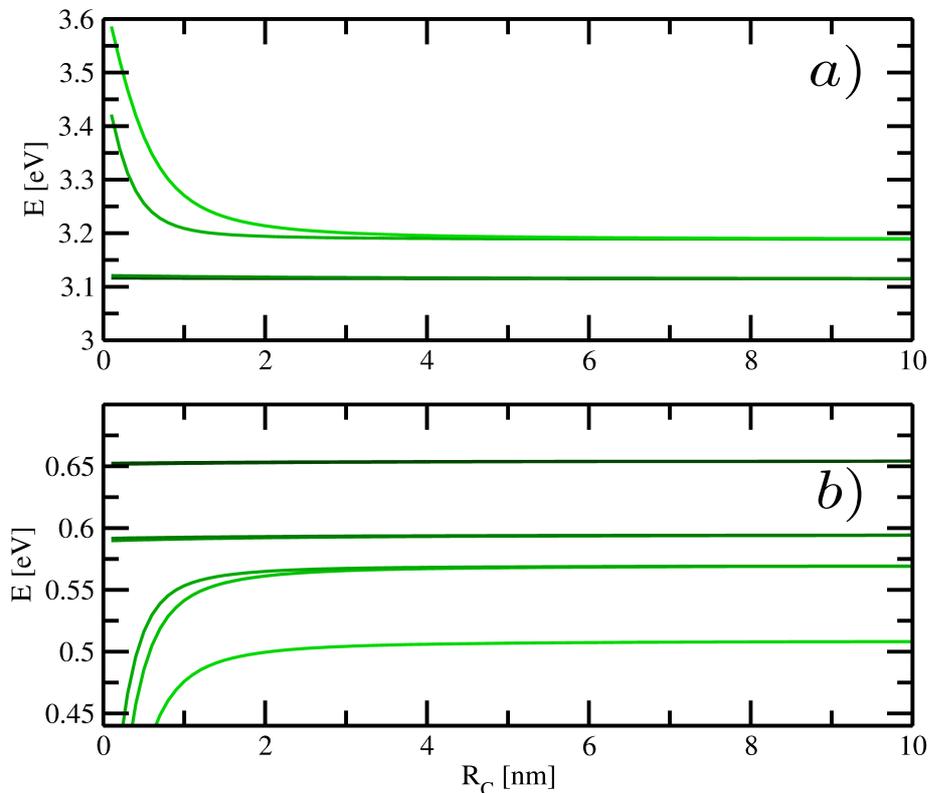


FIGURA 3.6: Espectro de energía de un punto cuántico doble con simetría esférica. *a)* niveles de energía para la banda de conducción, *b)* niveles de energía para la banda de valencia.

Después de analizar el espectro y los estados del Hamiltoniano del sistema, E_c (3.8), surge la pregunta sobre qué consecuencias o qué efectos genera, sobre las energías y los estados cuánticos, la interacción entre un electrón y un hueco en el punto cuántico. Por este motivo, utilizando el método de Hartree aplicado a los estados cuánticos obtenidos por el método $k \cdot p$, analizamos los efectos de esta interacción en este sistema.

En la figura 3.7a), mostramos la energía de ligadura del estado fundamental del excitón en el punto cuántico doble considerado. Podemos observar que para $R_c = 1 \text{ nm}$, la energía de ligadura presenta un salto en su comportamiento, luego de este salto, decae en forma continua como función del radio del núcleo. En base al salto que ocurre en la energía de ligadura en $R_c = 1 \text{ nm}$, analizamos el valor de la coordenada radial donde la densidad de probabilidad, tanto para el estado del electrón como para el estado del hueco, alcanza su máximo valor. Los resultados se muestran en la figura 3.7b), donde las curvas rojas corresponden a los estados del electrón y las verdes a los estados del hueco, además las curvas continuas son para los autovectores del Hamiltoniano $k \cdot p$ y las curvas entrecortadas son los mismos estados después de aplicar el método de Hartree, es decir cuando se consideran los efectos de la interacción. A partir de esta figura, podemos observar los efectos de la interacción entre las partículas, de hecho se observa que la posición del máximo de la densidad del estado del electrón, también presenta un salto en su comportamiento para $R_c = 1 \text{ nm}$, similar al salto que ocurre en la energía de ligadura. Hasta ahora

no hemos analizado en más detalle al sistema, para lograr explicar por qué ocurre el salto en estas cantidades.

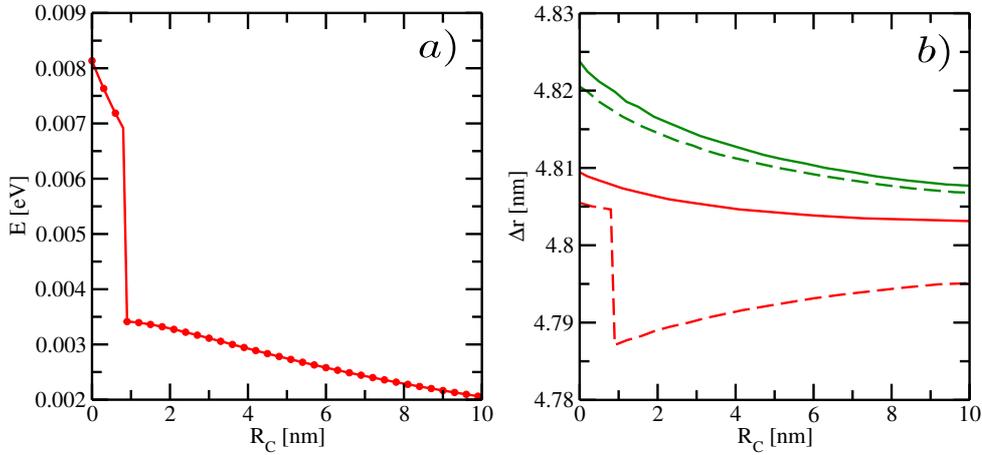


FIGURA 3.7: a) Energía de ligadura del estado fundamental de un excitón en un punto cuántico doble como función del radio del núcleo. b) Posición del máximo de las densidades de probabilidad, respecto al radio del núcleo ($\Delta r = r_{\text{máx}} - R_c$), de los estados del electrón (curvas rojas) y del hueco (curvas verdes), las curvas continuas corresponden a los autovectores del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, mientras que las curvas entrecortadas son los autovectores después de aplicar el método de Hartree.

Un hecho interesante que surge a partir de este sistema es la relación que puede existir entre los resultados mostrados en este capítulo y los resultados obtenidos por Ferrón y colaboradores en la referencia [42]. Estos autores, analizan dos posibles configuraciones del punto cuántico: el dispositivo 1, definido con $R_c = 1 \text{ nm}$, presenta dos estados, con números cuánticos $n_r = 1, l = 0$ y $n_r = 1, l = 1$, localizados en el pozo interior del punto cuántico, mientras que el dispositivo 2, definido con $R_c = 2 \text{ nm}$, presenta tres estados localizados en el pozo interior del punto cuántico, a los dos estados anteriores se le suma el estado con $n_r = 1$ y $l = 2$.

En base a esto surge la pregunta si existe alguna relación entre los resultados obtenidos en este capítulo y los correspondientes obtenidos por Ferrón y colaboradores. Lo más notorio es que la energía de ligadura del excitón, Fig. 3.7a), corresponden al estado fundamental de las partículas, mientras que los resultados obtenidos por Ferrón corresponde a estados excitados del electrón, por lo tanto es posible que, de alguna manera, la localización de los estados excitados electrónicos afecten a la interacción entre el electrón y el hueco.

3.5. Resumen y conclusiones

En este capítulo estudiamos el confinamiento de partículas, electrones y huecos, en puntos cuánticos con simetría esférica utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Analizamos un punto cuántico simple, igual al considerado en el capítulo 2, y un punto cuántico doble que fue estudiado utilizando la aproximación de masas efectivas [42] y utilizamos la aproximación de Hartree para determinar los efectos de la interacción en el estado fundamental de un excitón.

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, es un método semiempírico inicialmente desarrollado para estudiar la estructura de banda de materiales *bulk*, pero fue exitosamente implementado

para estudiar distintos tipos de heteroestructuras. Dentro de este método es posible incluir distintos efectos que pueden afectar al espectro del sistema, por ejemplo, incluir el tensor de deformación cuando se estudian los puntos cuánticos autoensamblados [43]. Este particular efecto modifica notablemente el espectro del sistema y los potenciales de confinamiento de las partículas. En este capítulo, no consideramos los efectos de deformación o efectos piezoeléctricos, dichos efectos deberían de ser considerados o al menos analizados inicialmente para determinar si pueden o no ser despreciados.

En ambos sistemas estudiados, obtuvimos que el espectro electrónico es similar al obtenido por la aproximación de masas efectivas, pero dentro del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se pueden apreciar los efectos de la interacción entre las distintas bandas consideradas. Para el caso del punto cuántico simple, sección 3.3, pudimos estimar la energía de ligadura del excitón, para el caso del punto cuántico doble, dicha cantidad muestra un salto en su comportamiento el cual no pudimos explicar aún, pero es posible que esté relacionado con la localización de los estados electrónicos del sistema, como sugiere la figura 3.7b). Esto último abre la posibilidad de continuar trabajando con ese sistema en busca de dicha relación. Para ello habría que determinar alguna cantidad que relacione los distintos estados y analizarla en detalle.

Capítulo 4

Ligadura de estados metastables de dos electrones en puntos cuánticos semiconductores con campo magnético

Es este capítulo vamos a estudiar la ligadura de estados resonantes de dos electrones confinados en un punto cuántico con simetría cilíndrica dentro de un nanohilo semiconductor. En el marco de la aproximación de masas efectivas vamos a calcular el espectro del sistema de dos electrones, y en particular vamos a buscar un método simple que nos permita calcular la energía de ligadura tanto para el sistema de un electrón como para el sistema de dos electrones. Consideraremos un régimen de parámetros del sistema en el cual no hayan estados ligados en ausencia de campo magnético. Por lo tanto la energía de ligadura, en estas condiciones, está dada por la energía del primer nivel de Landau y la ligadura se produce cuando la energía del sistema es menor a la energía del primer nivel de Landau. Veremos que, para un punto cuántico cuyos materiales y dimensiones corresponden a configuraciones experimentales actuales, la ligadura de estados resonantes sucede para intensidades de campo magnético del orden de la decena de Teslas.

4.1. Introducción

La física de nano-estructuras semiconductoras permite, hoy en día, testear principios básicos de la mecánica cuántica. El efecto Aharonov-Bohm ha sido verificado midiendo corrientes oscilatorias en diferentes configuraciones [44], pero la habilidad de cargar eléctricamente nano-estructuras semiconductoras con pocos electrones colocó los experimentos en anillos semiconductores cerca de los requisitos para el experimento gedanken [45]. Más aún, el efecto puede ser observado usando electrones, huecos y excitones neutros [46]. De hecho, la posibilidad de elegir a voluntad el número de electrones de carga en una dada nano-estructura, junto con técnicas de interferometría, son los principales componentes que permiten controlar eléctricamente qubits en sólidos [47], o generar interferencia entre dos electrones indistinguibles [48]. También se propuso un experimento para verificar las desigualdades de Bell usando electrones balísticos en nano-hilos semiconductores [49]. Muchas de estas configuraciones involucran mediciones del transporte de carga a través de la muestra, las cuales pueden incluir puntos cuánticos o hetero-estructuras, y donde se producen procesos cuánticos tales como captura o emisión de portadores de carga y donde los estados meta-estables tienen una participación importante en el entendimiento de cómo medir las corrientes involucradas [50].

La física de la materia condensada es otra área que ha sido impulsada por el hecho de que varios fenómenos tales como, el efecto Hall cuántico fraccionario, el crossover BCS-BEC (teoría de superconductividad BCS y condensado de Bose-Einstein) en semiconductores [51], o cristales de Wigner [52], pueden ser observados en diferentes nano-estructuras.

En muchos casos, los fenómenos mencionados se manifiestan cuando se aplica un campo magnético al sistema. El campo magnético permite, por ejemplo, modificar la forma de la función de onda en puntos cuánticos de *InAs* [53]. En el año 2012, Nazmitdinov y colaboradores mostraron que un dado campo magnético induce transiciones, que involucran cambios de simetría, en estados excitados de dos electrones en puntos cuánticos. Dichas transiciones se manifiestan como cambios en medidas de entrelazamiento [54]. Intensidades de campos magnéticos relativamente chicas, también modifican el espectro de excitones y electrones atrapados en nanohilos [35, 55]. Estos efectos se deben principalmente a dos razones. La primera, la masa efectiva de los electrones en la mayoría de los semiconductores es chica, lo que lleva a que la función de onda de los niveles de Landau posea un radio del orden del nanometro cuando el campo magnético aplicado es del orden de la decena de Teslas. Segundo, la energía de los electrones confinados en una dada estructura es, en general, del orden de las decenas de *meV* (mili-electronvolt), lo cual coincide con la escala de energía de los niveles de Landau.

La estabilización de estados meta-estables debido a la presencia de un campo magnético fue inicialmente analizada por Avron, Herbst y Simon [56], donde argumentan sobre la existencia de iones negativos de Helio, hecho que fue demostrado recientemente en forma numérica [57]. En sistemas atómicos, la intensidad de campo necesaria para mostrar que el ancho de la resonancia es cero, es del orden de 10^5 Teslas [58]. Teniendo esto en mente, surge la pregunta si es posible, usando campos magnéticos con intensidades obtenibles en laboratorios, ligar estados resonantes de sistemas de pocos electrones en nano-dispositivos. En 1989, Sikorski [59], encontró que las energías de los estados electrónicos en puntos cuánticos hechos de *InSb*, efectivamente dependen de la intensidad del campo magnético, pero su estudio estaba restringido a los estados de baja energía en puntos cuánticos muy profundos. Esto no es un hecho menor ya que la primera evidencia de estados electrónicos discretos en nano-estructuras semiconductoras se encontró un año antes por Reed y colaboradores [60].

El esfuerzo teórico para entender el fenómeno no se detuvo, Buczko y Bassani analizaron los estados ligados y los estados resonantes de puntos cuánticos esféricos de *GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs* [61]. Bylicki y Jaskólski estudiaron la ligadura de estados resonantes de un electrón en un punto cuántico semiconductor [62], encontraron que el ancho y la forma de la resonancia es una función no creciente de la intensidad del campo magnético y que para intensidades lo suficientemente grandes, el ancho de la resonancia se anula. Estos autores también analizaron estados resonantes de sistemas de dos electrones en puntos cuánticos sin campo magnético [63], dicho sistema también fue estudiado por Sajeev y Moiseyev [64], aunque en este último caso los autores consideraron un modelo levemente distinto de punto cuántico. Recientemente, Ramos y Osenda analizaron los estados resonantes de un electrón en un punto cuántico con simetría cilíndrica al cual se le aplica un campo magnético, usando probabilidades de localización y cantidades físicas provenientes de la teoría de información cuántica como la Fidelidad del sistema [65].

La ligadura de estados resonantes en un punto cuántico de dos electrones es más difícil de analizar que el caso de un electrón, principalmente por la naturaleza de largo alcance y la intensidad de la interacción de Coulomb entre los electrones.

Sumado a esto, el sistema posee varios parámetros que son importantes, como por ejemplo, la masa efectiva de los electrones, longitudes características (cuyos valores dependen de la geometría del punto cuántico), los materiales elegidos para formar la estructura, intensidad de campo magnético, entre otros. En varios casos, el problema se simplifica al considerar que el campo magnético impone simetría azimutal y que por lo tanto el sistema en consideración tendrá la misma simetría.

En este capítulo vamos a estudiar la ligadura de estados resonantes de dos electrones, donde la estructura es un punto cuántico con simetría cilíndrica el cual se encuentra en un nano-hilo semiconductor. Vamos a considerar un sistema en el cual el eje de simetría del punto cuántico coincide con el eje de simetría del nano-hilo y a su vez, estos coinciden con el eje en el cual se aplica el campo magnético. Comenzaremos con el problema de un electrón y veremos que el problema puede ser tratado usando la aproximación de confinamiento lateral fuerte [66], a la cual le haremos modificaciones para conseguir una mejor coincidencia con el problema original y así lograr determinar el umbral de ligadura para el problema de un electrón. Luego, continuaremos el estudio del problema de dos electrones para presentar un análisis del fenómeno de ligadura. Finalmente vamos a discutir la implementación en una configuración experimental, similar al estudio realizado por Baretin y colaboradores [67].

El capítulo está organizado de la siguiente forma. En la sección 4.2 presentamos la aproximación de confinamiento lateral fuerte. En la sección 4.3 vamos a analizar el problema de un electrón y comparamos los resultados en tres dimensiones con los resultados obtenidos a partir de la aproximación de confinamiento lateral para luego proponer un modelo modificado de la aproximación de confinamiento lateral en la sección 4.4. En la sección 4.5 estudiaremos el problema de dos electrones usando la aproximación propuesta en la sección 4.4. Finalmente, discutiremos los resultados obtenidos y su implementación en configuraciones experimentales actuales en la sección 4.6.

4.2. Modelo y aproximación de confinamiento lateral

En esta sección vamos a considerar el problema de dos electrones en un punto cuántico con simetría cilíndrica, y vamos a utilizar la aproximación de masas efectivas para escribir el Hamiltoniano del sistema. En este modelo, cada electrón está confinado por un potencial, $V(\mathbf{r})$, y un campo magnético constante y uniforme es aplicado a lo largo del eje de simetría del punto cuántico, $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Para escribir el Hamiltoniano del sistema necesitamos el potencial vector tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Si el potencial vector, \mathbf{A} , cumple esta relación, cualquier nuevo potencial vector de la forma $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\lambda(\mathbf{r})$, también satisface la misma relación y no cambia la física del problema. Por lo tanto podemos elegir un potencial vector que tenga la misma simetría que nuestro problema, por lo que vamos a usar el gauge simétrico dado por

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} (-B y \hat{x} + B x \hat{y}) . \quad (4.1)$$

Usando este potencial, el Hamiltoniano del sistema es

$$H = h(1) + h(2) + W(1, 2), \quad (4.2)$$

donde $W(1, 2)$ es la interacción entre los electrones y el Hamiltoniano de una partícula, escrito en coordenadas cilíndricas, es

$$h(j) = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_j^2 + V(\rho_j, z_j) + \frac{1}{2} m_e^* \omega^2 \rho_j^2 - i\hbar\omega \frac{\partial}{\partial \phi_j}, \quad j = 1, 2, \quad (4.3)$$

donde m_e^* es la masa efectiva del electrón, $\omega = \frac{eB}{2m_e^*c}$ es la frecuencia de Larmor, y estamos usando que el potencial de confinamiento tiene simetría cilíndrica, es decir, solo depende de las coordenadas ρ y z . El espectro del Hamiltoniano se obtiene resolviendo el problema de autovalores y autovectores

$$H \Psi(1, 2) = E \Psi(1, 2). \quad (4.4)$$

Siguiendo el trabajo de Bednarek [66], en algunos casos es razonable asumir que la función de onda de dos electrones, $\Psi(1, 2)$, puede ser escrita como

$$\Psi(1, 2) = R_{\perp}(\rho_1, \rho_2, \phi_1, \phi_2) \psi(z_1, z_2), \quad (4.5)$$

es decir, asumimos que la función de onda total es *separable* en las coordenadas longitudinales, z , y transversales, ρ y ϕ . Si se introduce la Ec. (4.5) en la Ec. (4.4) y se integra en las variables transversales ρ y ϕ , se obtiene una ecuación efectiva unidimensional para el problema de dos electrones

$$H_{ef}(1, 2) \psi(z_1, z_2) = E \psi(z_1, z_2). \quad (4.6)$$

En este punto se pueden hacer algunas observaciones. Primero, después de realizar la aproximación de separabilidad, Ec. (4.5), el problema efectivo de la Ec. (4.6) se puede resolver usando diferentes métodos. Segundo, la función de onda propuesta en Ec. (4.5) se puede considerar como una función de prueba variacional, de esta forma, el autovalor más chico de la Ec. (4.6) es una cota superior a la energía del estado fundamental del problema tridimensional. Tercero, los Hamiltonianos efectivos de una partícula pueden ser tratados con una gran variedad de funciones transversales, ya sea en forma analítica o en forma numérica. Desafortunadamente, el término de interacción es más complicado y su tratamiento puede ser simple o complejo dependiendo de la función transversal elegida. Bednarek y colaboradores, eligieron como función transversal, R_{\perp} , el producto de las funciones de onda del estado fundamental del oscilador armónico en dimensión dos, $R_{\perp} = \phi_0(\rho_1) \phi_1(\rho_2)$. Esta elección permite un tratamiento analítico de la interacción de Coulomb entre los electrones, cuyos detalles se encuentran en la referencia [66].

Hasta ahora no dijimos cuál es el potencial de confinamiento de cada partícula. En la sección siguiente vamos a considerar un potencial de confinamiento particular y nos concentraremos en el problema de un electrón.

4.3. Problema de un electrón

La estructura que vamos a considerar en esta sección y en el resto del capítulo consiste de un punto cuántico cilíndrico de radio a_{ρ} y largo a_z , el cual se encuentra dentro de un nano-hilo de radio R . El punto cuántico está limitado por discos de radio R y largo $b_z/2$. En la figura 4.1 se puede observar un esquema cualitativo de la estructura. La presencia del campo magnético en la dirección longitudinal genera un confinamiento de las cargas en la dirección perpendicular, por lo tanto podemos

asumir que la longitud del confinamiento en la dirección radial (perpendicular al eje del cilindro) es mucho menor que el radio del nano-hilo y por ende asumir $R = \infty$.

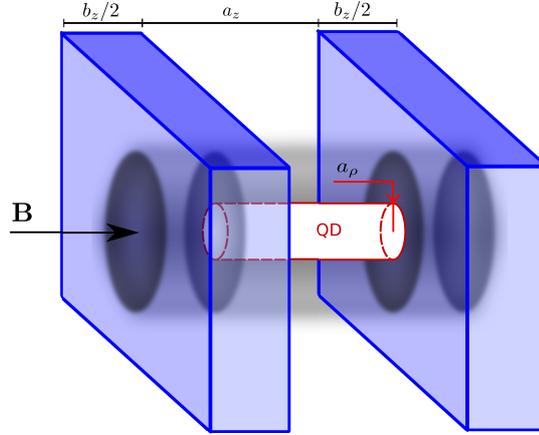


FIGURA 4.1: Esquema del nano-hilo en el cual se encuentra un punto cuántico con simetría cilíndrica.

Para la estructura mostrada en la figura 4.1, el potencial de confinamiento para una partícula puede ser modelado de la siguiente manera,

$$V(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } \rho \leq a_\rho \text{ y } |z| \leq a_z/2 \\ V_1 & \text{si } a_z/2 \leq |z| \leq (a_z + b_z)/2 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (4.7)$$

dicho en palabras, el potencial de confinamiento tiene un pozo de profundidad $-V_0$, largo a_z y radio a_ρ , el cual está limitado por dos planos infinitos los cuales son perpendiculares al eje del cilindro y cada plano tiene un ancho $b_z/2$. Los estados resonantes de un electrón, asociados al potencial de confinamiento de la Ec. (4.7) fueron estudiados en la referencia [65]. Para parámetros del potencial adecuados, el problema de un electrón no tiene estados ligados para $B = 0$. En esta sección vamos a estudiar el sistema para determinar si la propuesta de función de onda separable, Ec. (4.5), puede estimar el valor de la energía del estado fundamental del Hamiltoniano y qué características físicas del problema en tres dimensiones son bien descritas por el problema efectivo unidimensional.

El problema de autovalores y autovectores de esta sección y de este capítulo lo resolveremos usando el método variacional de Rayleigh-Ritz y el conjunto de B -splines como base del espacio de Hilbert. Cada problema, es decir, el problema de uno o dos electrones, en una o tres dimensiones, necesita una base específica que se ajuste al problema y que posea las simetrías y condiciones de contorno correspondientes. En el apéndice A mostramos una descripción del conjunto de funciones B -splines y en la sección A.4.3 mencionamos las distintas bases usadas en este capítulo.

En la figura 4.2 mostramos las energías más bajas del problema de un electrón, en tres dimensiones, como función de la intensidad de campo magnético. En este caso la masa efectiva que usamos es $m_e^* = 0.041m_e$, la cual corresponde al material $Ga_{0.47}In_{0.53}As$, usado comúnmente para la fabricación de puntos cuánticos dentro de sólidos de $GaAs$ [68]. Los parámetros del punto cuántico elegidos son $a_\rho = 7 \text{ nm}$, $a_z = 7 \text{ nm}$, $b_z = 2.5 \text{ nm}$, $V_1 = 0.37 \text{ eV}$ y $V_0 = 0.10884 \text{ eV}$. En las curvas mostradas en la figura podemos observar lo siguiente: primero, el menor autovalor cruza la

energía del primer nivel de Landau (línea roja cortada) para un campo magnético crítico $B_c \approx 17 T$. Segundo, por encima de la energía del primer nivel de Landau, la densidad de estados muestra un incremento, señalando la existencia de un umbral. En la referencia [65] estas características fueron analizadas detalladamente. En este caso, mostramos el espectro para resaltar que con la presencia del campo magnético, la energía del primer nivel de Landau es el umbral que separa los estados ligados de los estados del continuo. En otras palabras, la intensidad de campo magnético, B^* , donde el menor autovalor, $E_0(B^*)$, cruza la energía del primer nivel de Landau marca la ligadura de la resonancia. Si se analiza el comportamiento de la energía del estado fundamental para intensidades de campo decrecientes, la energía de la resonancia para $B < B^*$ es la continuación analítica del menor autovalor cuando éste entra al continuo. Contrariamente, para intensidades de campo crecientes, el tiempo de vida medio de la resonancia diverge para $B = B^*$ y el estado se vuelve ligado para $B > B^*$. Esto quiere decir que en nuestra configuración, en la cual no hay estados ligados para $B = 0$, la presencia de un autovalor aislado debajo del umbral es suficiente para marcar la ligadura de la resonancia. Esta es la forma en la cual vamos a determinar la ligadura de la resonancia en el problema de dos electrones.

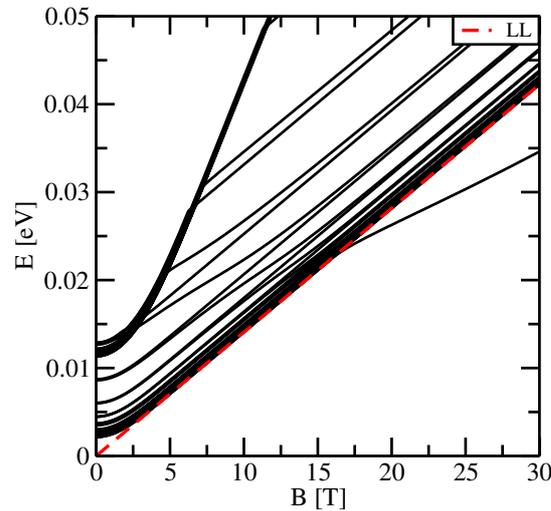


FIGURA 4.2: Energías más bajas como función de la intensidad de campo magnético para un electrón confinado en un punto cuántico cilíndrico definido por el potencial en la Ec. (4.7). La curva cortada roja es la energía del primer estado de Landau, $\hbar\omega$. Se puede observar que aumenta la densidad de autovalores para $E(B) > \hbar\omega$ y la estabilización de algunos autovalores continuos que ponen en evidencia la energía de resonancia.

No obstante, hay varias formas de identificar la ligadura además del cálculo del ancho de la resonancia (por ejemplo usando escaleo complejo exterior [69]). En la referencia [65] se usó la fidelidad [70] y la probabilidad de localización para detectar la ligadura del estado resonante. Nosotros vamos a usar la purity (por su término en inglés) [71] y la densidad radial. La purity es una cantidad usada generalmente para determinar si un dado estado cuántico es puro o mixto. En nuestro caso la vamos a usar para determinar si el estado del problema tridimensional puede ser aproximado por un estado separable como el de la Ec. (4.5).

Para un estado puro de un sistema bipartito, $|\chi(1, 2)\rangle$, la purity se define como

$$p = \text{Tr}(\rho_1^2), \quad \text{donde} \quad \rho_1 = \text{Tr}_2(|\chi(1, 2)\rangle\langle\chi(1, 2)|), \quad (4.8)$$

donde ρ_1 es el operador matriz densidad reducida, y la purity es la suma de sus autovalores al cuadrado. De la función de onda variacional, correspondiente al menor autovalor, $\psi^v(\rho, z)$, se pueden obtener dos operadores matriz densidad reducida

$$\delta(z, z') = \int (\psi^v(\rho, z))^* \psi^v(\rho, z') \rho d\rho, \quad (4.9)$$

y

$$\delta(\rho, \rho') = \int (\psi^v(\rho, z))^* \psi^v(\rho', z) dz. \quad (4.10)$$

Los autovalores de ambos operadores definidos en las Ecs. (4.9) y (4.10) pueden obtenerse numéricamente y resultan en la misma purity p .

En la figura 4.3a) mostramos el comportamiento de la purity p y de la entropía de von Neumann (ver sección 5.2) como función de la intensidad de campo magnético. Ambas cantidades muestran el mismo comportamiento: para $B < B^*$ la función es un producto de dos funciones que dependen de las coordenadas ρ y z por separado,

$$\psi^v \simeq f(\rho) g(z). \quad (4.11)$$

Para intensidades de campo suficientemente grandes, la función de onda, nuevamente, se vuelve un producto de dos funciones que dependen de las coordenadas ρ y z por separado. Sin embargo hay una región intermedia donde la función separable Ec. (4.11) es una mala aproximación para ψ^v .

En la figura 4.3 b) mostramos la densidad radial del estado fundamental para diferentes valores del campo magnético. Se puede observar cómo se manifiesta la transición de estados extendidos a estados localizados o ligados, en este caso por el cambio abrupto en la forma de la densidad a medida que se aumenta la intensidad de campo magnético. Más aún, para $B < B^*$, la forma de la densidad radial es similar a la densidad radial del primer nivel de Landau, mientras que para $B \gtrsim B^*$ la densidad radial se parece más a la densidad radial del estado fundamental del pozo radial bidimensional, V_{2D} , con parámetros iguales a los del pozo tridimensional

$$V_{2D}(\rho, \varphi) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } \rho \leq a_\rho \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}. \quad (4.12)$$

Si aumentamos aún más la intensidad de campo, $B \gg B^*$, se recupera la densidad radial del primer nivel de Landau, es decir, la forma de la densidad radial está determinada por el confinamiento debido al campo magnético.

Los resultados descriptos nos motiva a estudiar distintas aproximaciones para el problema longitudinal

$$h_z \psi_z(z) = \langle R(\rho) | h | R(\rho) \rangle \psi_z(z) = E \psi_z(z), \quad (4.13)$$

donde $R(\rho)$ es una función radial normalizada. El análisis realizado a partir de las figuras 4.3 a) y b) sugiere dos posibles funciones radiales, la primera es la función de onda del primer nivel Landau,

$$R(\rho) = \psi_{LLL} = \sqrt{\frac{2m_e^* \omega}{\hbar}} e^{-\frac{m_e^* \omega}{\hbar} \rho^2 / 2}. \quad (4.14)$$

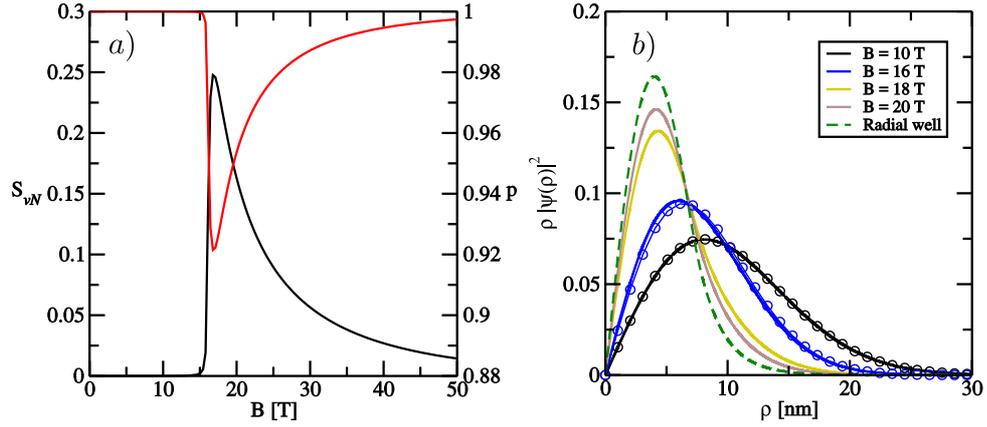


FIGURA 4.3: *a)* Purity p (línea roja) y entropía de von Neumann (línea negra) para el estado fundamental de un electrón en el punto cuántico como función de la intensidad de campo magnético B . El campo crítico es $B^* \approx 17T$. Para $B < B^*$ la purity toma el valor de uno (la entropía de von Neumann se anula), lo cual significa que la función de onda del problema tridimensional es separable en las coordenadas ρ y z . Si el campo magnético es lo suficientemente grande, la purity vuelve a tomar el valor de uno. Para $B \gtrsim B^*$, ambas cantidades muestran un incremento en la correlación entre las coordenadas a medida que nos acercamos a B^* . *b)* Densidades radiales para diferentes valores de la intensidad de campo magnético B . Las líneas continuas corresponden a las densidades radiales obtenidas de las funciones de onda variacionales del estado fundamental ($B = 10, 16, 18, 20$). Las densidades radiales del primer nivel de Landau se muestran con líneas continuas y círculo vacíos ($B = 10, 16$) y la línea cortada verde es la densidad radial exacta de la función de onda del estado fundamental de un electrón en un pozo radial Ec. (4.7). Notar que para $B < B^*$ la densidad radial variacional es similar a la densidad radial del primer nivel de Landau y para $B > B^*$ la densidad variacional se aproxima a la densidad de pozo radial.

La segunda es la función de onda del estado fundamental del problema en dos dimensiones con el potencial dado por la Ec. (4.12). Solo por completitud vamos a mostrar las principales ecuaciones para este problema.

La solución exacta de la ecuación de Schrödinger con potencial dado por la Ec. (4.12) puede ser escrito en términos de las funciones de Bessel

$$\psi_{2D}(\rho) = \begin{cases} AJ_0\left(\sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2}(V_0 - |E|)}\rho\right) & \text{si } \rho \leq a_\rho \\ BK_0\left(\sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2}|E|}\rho\right) & \text{si } \rho > a_\rho \end{cases}. \quad (4.15)$$

donde estamos considerando que $-V_0 < E < 0$. Definiendo $\varepsilon = 2m_e^*E/\hbar^2$ y $U_0 = 2m_e^*V_0/\hbar^2$, y usando las condiciones de empalme de la función de onda para $\rho = a_\rho$, se obtiene que la ecuación para la energía del estado fundamental es

$$\sqrt{U_0 - |\varepsilon|} \frac{J_1(\sqrt{U_0 - |\varepsilon|} a_\rho)}{J_0(\sqrt{U_0 - |\varepsilon|} a_\rho)} = \sqrt{|\varepsilon|} \frac{K_1(\sqrt{|\varepsilon|} a_\rho)}{K_0(\sqrt{|\varepsilon|} a_\rho)}. \quad (4.16)$$

Las constantes A y B se determinan a partir de la condición de normalización de la función de onda, J_0 y J_1 son las funciones de Bessel de primera especie y K_0 y K_1

son las funciones de Bessel modificadas de segunda especie.

Continuando con la aproximación de confinamiento lateral fuerte, el potencial en el Hamiltoniano longitudinal, Ec. (4.13), se construye en términos de la función radial elegida

$$V(z) = \langle R(\rho) | V(\rho, \varphi, z) | R(\rho) \rangle = \begin{cases} -V_0 V_R & \text{si } \rho \leq a_\rho \text{ y } |z| \leq a_z/2 \\ V_1 & \text{si } a_z/2 \leq |z| \leq (a_z + b_z)/2 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (4.17)$$

donde

$$V_R = \int_0^{a_\rho} |R(\rho)|^2 \rho d\rho. \quad (4.18)$$

El espectro del Hamiltoniano longitudinal lo calculamos numéricamente usando la aproximación variacional y el conjunto de B -splines como base del espacio, ver apéndice A.

En la figura 4.4 mostramos los autovalores más bajos obtenidos para el problema tridimensional de una partícula (línea azul), para el problema longitudinal definida a partir de considerar la función radial del pozo de potencial bidimensional, es decir, $R(\rho) = \psi_{2D}(\rho)$, (línea verde) y para el problema longitudinal usando como función radial el primer nivel de Landau, $R(\rho) = \psi_{LLL}(\rho)$ (línea roja), en todos los casos se muestran los autovalores como función de la intensidad de campo magnético. La energía del primer nivel de Landau corresponde a la línea negra cortada. Podemos observar que cada aproximación tiene sus ventajas y desventajas. El problema longitudinal construido con la función radial $\psi_{2D}(\rho)$ da una buena aproximación para el campo crítico donde sucede la ligadura de la partícula, y para intensidades entre los $20 T$ y los $45 T$, aproximadamente, da una buena estimación al autovalor del problema tridimensional. Por otro lado, la curva no muestra ningún cambio en su comportamiento cerca del umbral, por lo tanto, sin información adicional, este enfoque no ofrece una manera de detectar que el autovalor haya cruzado el umbral de ligadura.

El menor autovalor, E_{gs}^{LL} , obtenido usando la aproximación de confinamiento lateral con la función de onda radial del primer nivel de Landau, muestra un cambio significativo en su comportamiento. Para $B \lesssim 30 T$, E_{gs}^{LL} sigue muy cerca la energía del primer nivel de Landau, E_{LLL} , y para $B > 30 T$ es siempre más bajo que E_{LLL} . Para valores de intensidad más grandes, la curva lentamente se acerca al autovalor del problema tridimensional. Podemos concluir que el comportamiento cualitativo es correcto, pero el campo crítico en el cual ocurre la ligadura, B^* , está estimado con un error de $\approx 15 T$.

Por lo que hemos analizado previamente, es claro que ninguno de los dos enfoques usados para la aproximación de confinamiento lateral logra hacer una descripción del fenómeno de ligadura, por lo tanto es necesario modificar alguno de los enfoques usados o buscar uno nuevo, que nos lleve a un problema longitudinal el cual nos permita obtener una mejor aproximación a la energía del estado fundamental del problema tridimensional antes y después de que suceda la ligadura. Antes de introducir tal modificación (sección 4.4), vamos a analizar un poco más las dos aproximaciones longitudinales aplicadas hasta ahora.

Una de las suposiciones que apoyan este capítulo es que la energía de estados localizados que aparecen por debajo del umbral, en nuestro caso la energía del primer nivel de Landau, es la continuación analítica de la energía compleja del estado

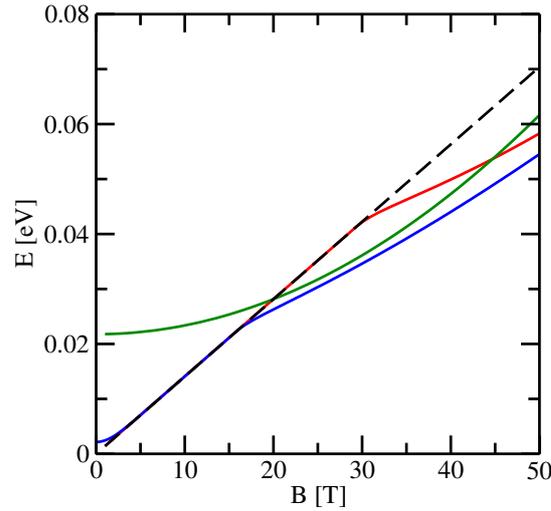


FIGURA 4.4: Autovalores más bajos obtenidos del problema tridimensional de un electrón (línea azul), del problema longitudinal usando $R(\rho) = \psi_{2D}(\rho)$ (línea verde), y del problema longitudinal usando $R(\rho) = \psi_{LLL}(\rho)$ (línea roja). La línea negra cortada corresponde a $\hbar\omega$.

resonante. Entonces, es razonable pensar que al elegir $\psi_{2D}(\rho)$ como función de onda radial en la aproximación de confinamiento lateral, podemos obtener una buena aproximación para la parte real de la energía del estado resonante en la región del continuo.

En la figura 4.5a) mostramos el menor autovalor del problema longitudinal usando $\psi_{2D}(\rho)$ (línea verde), los primeros niveles de Landau con momento angular nulo (línea negra cortada) y la parte real de la energía del estado resonante calculado usando el método variacional y *exterior complex scaling* (puntos negros) [65, 72]. La diferencia de energía entre los dos conjuntos de datos se debe principalmente a que en la aproximación longitudinal se asume una función de onda separable en la coordenadas ρ y z para un Hamiltoniano tridimensional que no lo es.

Como mencionamos anteriormente, el problema longitudinal definido por la función radial $\psi_{2D}(\rho)$ nos permite estimar la parte real de la energía del estado resonante en la región del continuo del espectro, pero el menor autovalor de este problema no muestra ningún cambio en su comportamiento mostrando la presencia del fenómeno de ligadura del estado resonante. Sin embargo, el problema longitudinal con $\psi_{LLL}(\rho)$ como función radial si muestra un cambio en su comportamiento, curva roja en la Fig. 4.4, por lo tanto es posible obtener la parte imaginaria de la energía, o ancho del estado resonante, aplicando el método *exterior complex scaling* [69, 73]. Este método consiste en aplicar una rotación de la coordenada al plano complejo después de una cierta longitud,

$$z = \begin{cases} z' & \text{si } |z'| < z_0 \\ z' e^{i\theta} & \text{si } |z'| \geq z_0 \end{cases}, \quad (4.19)$$

donde θ es el ángulo de rotación y elegimos z_0 como la coordenada donde el potencial de confinamiento se vuelve cero, en nuestro caso el valor es $z_0 = 5 \text{ nm}$. Con esta elección, solo el término cinético del Hamiltoniano es rotado al plano complejo. El ancho de la resonancia obtenido, como función de la intensidad de campo se muestra en la figura 4.5, donde puede observarse que el ancho de la resonancia disminuye

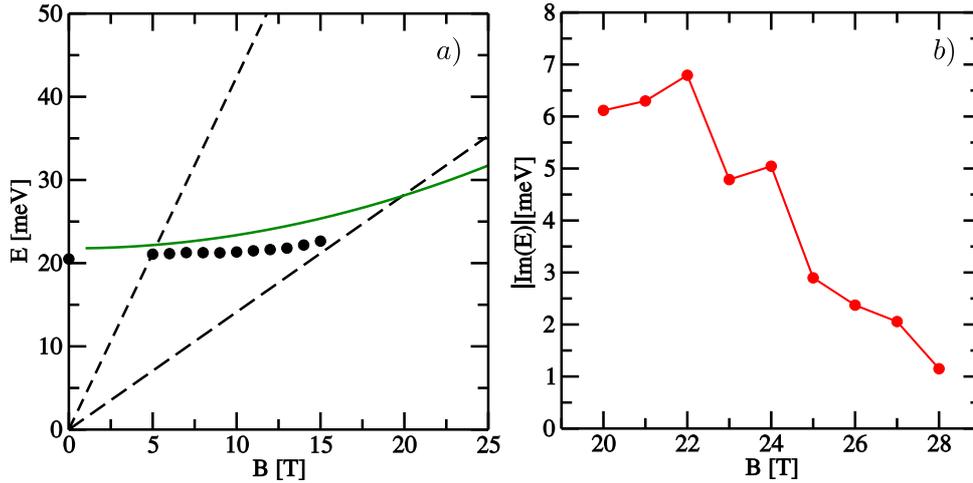


FIGURA 4.5: a) Comparación entre la parte real de la energía calculada con escaleo exterior complejo (puntos negros) y la energía del estado fundamental en la aproximación de confinamiento lateral usando $\psi_{2D}(\rho)$ como función de onda radial (línea verde). Las dos líneas negras cortadas corresponden a la energía de los dos primeros niveles de Landau con momento angular cero. b) Parte imaginaria de la energía del estado resonante obtenida usando *exterior complex scaling* en la aproximación de confinamiento lateral fuerte con $\psi_{LLL}(\rho)$ como función radial.

cuando la intensidad del campo aumenta. Los valores mostrados en la figura son consistentes con los obtenidos usando otros métodos [65].

4.4. Problema de un electrón: confinamiento lateral modificado

Como mostramos en la figura 4.4 el menor autovalor del problema tridimensional y el menor autovalor del problema longitudinal definido a partir de la función de onda radial $\psi_{LLL}(\rho)$, tienen un comportamiento similar para intensidades de campos chicas o grandes. Por lo tanto, es coherente intentar modificar el procedimiento para obtener una mejor aproximación cuando la función de onda radial es $\psi_{LLL}(\rho)$. La principal razón para mantener $\psi_{LLL}(\rho)$ como función radial es que, como mostró Bednarek y colaboradores [66], provee una forma sistemática para trabajar con la interacción de Coulomb entre los electrones para el problema de dos partículas. Basados en los resultados de [65], respecto al valor de expectación de la coordenada z y la probabilidad de localización, podemos asegurar que el estado ligado se localiza dentro del pozo de potencial. Además, teniendo en cuenta lo mostrado con las densidades radiales en la figura 4.3 b), para $B > B^*$, vemos que la densidad de probabilidad es despreciable para radios mayores al radio del pozo, por lo tanto podemos asumir que dentro de la barrera, el electrón también está confinado radialmente. Con todo esto, en la aproximación longitudinal, proponemos el potencial unidimensional dado por

$$V_{long}(z) = \begin{cases} -V_0 V_R & \text{si } |z| \leq a_z/2 \\ V_1 V_R & \text{si } a_z/2 \leq |z| \leq (a_z + b_z)/2 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} . \quad (4.20)$$

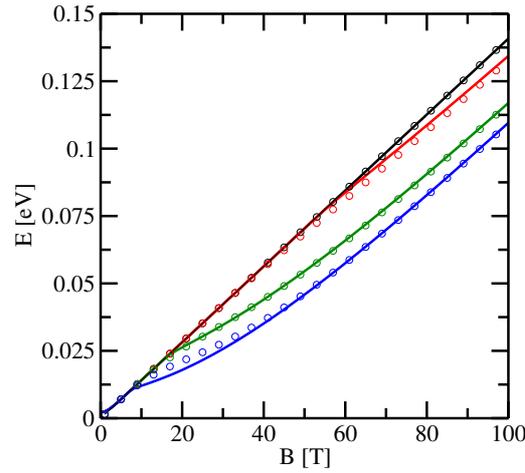


FIGURA 4.6: Autovalores más bajos para el problema tridimensional de un electrón (líneas continuas) y los autovalores correspondientes para el problema unidimensional efectivo dentro de la aproximación de confinamiento lateral modificada (círculos vacíos). El alto de la barrera y profundidad del pozo son los mismos a los usados en la figura 4.4, el ancho de la barrera es $b_z = 2.5 \text{ nm}$. Los datos en color negro son para $a_\rho = a_z = 5 \text{ nm}$, en color rojo corresponden a $a_\rho = a_z = 6 \text{ nm}$, en color verde con $a_\rho = a_z = 7 \text{ nm}$ y los datos en azul son con $a_\rho = a_z = 7.5 \text{ nm}$.

Los autovalores más bajos, como función de la intensidad de campo magnético para diferentes configuraciones del potencial unidimensional están mostrados en la figura 4.6. Los autovalores fueron calculados para el problema tridimensional (líneas continuas) y para el problema unidimensional efectivo de la Ec. (4.13) (círculos vacíos).

La coincidencia entre los dos conjuntos de datos, es decir, entre los resultados del problema tridimensional y el problema unidimensional efectivo, es notable, y la aproximación de confinamiento lateral efectiva funciona bien para un conjunto de parámetros, principalmente para pozos de potencial tales que $a_\rho \lesssim a_z$. Queremos resaltar que hay una desventaja en este enfoque: la modificación en el potencial de confinamiento, en particular en la barrera de potencial, resulta en una aproximación no variacional para los autovalores, entonces las energías obtenidas con el Hamiltoniano en la ecuación (4.13) pueden ser, cerca del umbral, mayores o menores que la energía correspondiente al problema tridimensional. Aun así, teniendo en cuenta que es la mejor aproximación unidimensional disponible, vamos a usarla para estudiar la ligadura de dos electrones interactuantes en el mismo pozo de potencial.

4.5. Problema de dos electrones

Una de las ventajas de asumir una función de onda separable como en la Ec. (4.5) se manifiesta cuando se calcula la interacción efectiva entre las partículas. Específicamente, usando como función de onda radial

$$R(\rho_1, \rho_2) = \phi_0(\rho_1) \phi_0(\rho_2), \quad (4.21)$$

donde $\phi_0(\rho)$ es cualquier función radial que puede ser elegida a conveniencia. Como la interacción efectiva unidimensional está definida como

$$W_{ef}(z_1, z_2) = \int d\rho_1 \int d\rho_2 |R(\rho_1, \rho_2)|^2 W(1, 2) \rho_1 \rho_2, \quad (4.22)$$

donde $W(1, 2)$ es la interacción tridimensional entre los electrones, es claro que solo un pequeño conjunto de funciones $\phi_0(\rho)$ permiten derivar una expresión analítica para la interacción efectiva. Afortunadamente, este es el caso cuando $\phi_0(\rho) = \psi_{LLL}(\rho)$ y la interacción está dada por el potencia de Yukawa o potencial de Coulomb apantallado

$$W^\alpha(1, 2) = \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (4.23)$$

En este potencial α es una constante, y la interacción de Coulomb se obtiene al tomar el límite $\alpha \rightarrow 0$.

Usando la transformada de Fourier en las ecuaciones (4.21) y (4.23) y después de un poco de álgebra, puede mostrarse que

$$W_{ef}(z_1, z_2) = V_{ef}(|z_1 - z_2|) = e^{x^2 + y^2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{l} (1 - \text{erf}(x + y)), \quad (4.24)$$

donde $\text{erf}(x)$ es la función error [74],

$$x = \frac{|z_1 - z_2|}{\sqrt{2}l}, \quad y = \frac{\alpha l}{\sqrt{2}} \quad y \quad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega}}. \quad (4.25)$$

En la referencia [66] se muestran los detalles para obtener las expresiones de la interacción efectiva dada por la Ec. (4.24).

En el caso de que la interacción entre los electrones sea la interacción electrostática dada por el potencial de Coulomb ($\alpha = 0$), los comportamientos asintóticos son

$$V_{ef}(|z_1 - z_2|) \approx \frac{1}{|z_1 - z_2|} - \frac{l^2}{|z_1 - z_2|^3} + \dots, \quad \text{para } x \rightarrow \infty, \quad (4.26)$$

y,

$$V_{ef}(|z_1 - z_2|) \approx \frac{1}{l} \sqrt{\frac{\pi}{2}} - \frac{|z_1 - z_2|}{l^2} + \dots, \quad \text{para } x \rightarrow 0 \quad (4.27)$$

Claramente, el comportamiento de Coulomb se obtiene cuando $x \rightarrow \infty$. Por el otro lado, para $x \rightarrow 0$ ($z_1 = z_2$), el potencial de interacción efectivo no diverge, sino que toma un valor finito dado por el inverso del ancho de la función de onda del primer nivel de Landau, l .

Es habitual, en sistemas en los cuales se produce un comportamiento casi unidimensional [75, 76] o confinamiento lateral fuerte [77] usar el potencial de interacción

$$V_{rec}(|z_1 - z_2|) = \frac{1}{\sqrt{|z_1 - z_2|^2 + d^2}}, \quad (4.28)$$

el cual tiene comportamientos asintóticos similares a los mostrados en las Ecs. (4.26) y (4.27). En la ecuación (4.28), d es un parámetro que determina el valor de la interacción en el límite $x \rightarrow 0$. Nosotros elegimos dicho parámetro de tal forma que sea

mucho menor que la longitud característica de confinamiento del sistema [76], en particular tomamos $d = 0.1 \text{ nm}$ ya que en nuestro problema $a_\rho \approx a_z \approx 10 \text{ nm}$.

Resumiendo, después de todas las consideraciones hechas, el Hamiltoniano efectivo unidimensional para los dos electrones es

$$H_z = 2\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) + V_{long}(z_1) + V_{long}(z_2) + W_{long}(z_1, z_2), \quad (4.29)$$

donde $V_{long}(z)$ es el potencial de una partícula definida en la Ec. (4.20), $W_{long}(z_1, z_2)$ es la interacción efectiva unidimensional entre los electrones, para la cual tenemos dos posibles elecciones de interacción, una es

$$W_{long}(z_1, z_2) = \eta V_{ef}(|z_1 - z_2|), \quad (4.30)$$

y la otra es

$$W_{long}(z_1, z_2) = \eta V_{rec}(|z_1 - z_2|), \quad (4.31)$$

En semiconductores, la magnitud de la repulsión de Coulomb entre dos electrones confinados en una región con longitud característica de 10 nm es del orden de 5 meV . De acuerdo a esto, elegimos los valores de η del orden de 0.01 nm eV . En la figura 4.7 a) mostramos la diferencia de energía entre el autovalor más bajo, obtenido diagonalizando el Hamiltoniano unidimensional efectivo de dos electrones, Ec. (4.29), cuando la interacción está dada por la interacción de Coulomb efectiva, Ec. (4.30), y la energía correspondiente al primer nivel de Landau de dos electrones no interactuantes, $2\hbar\omega$, mientras que en la figura 4.7 b) mostramos la misma diferencia, pero para el caso en que la interacción entre los electrones es la interacción de Coulomb rectificada, Ec. (4.31). En ambos casos, mostramos la diferencia de energía como función de la intensidad del campo magnético aplicado.

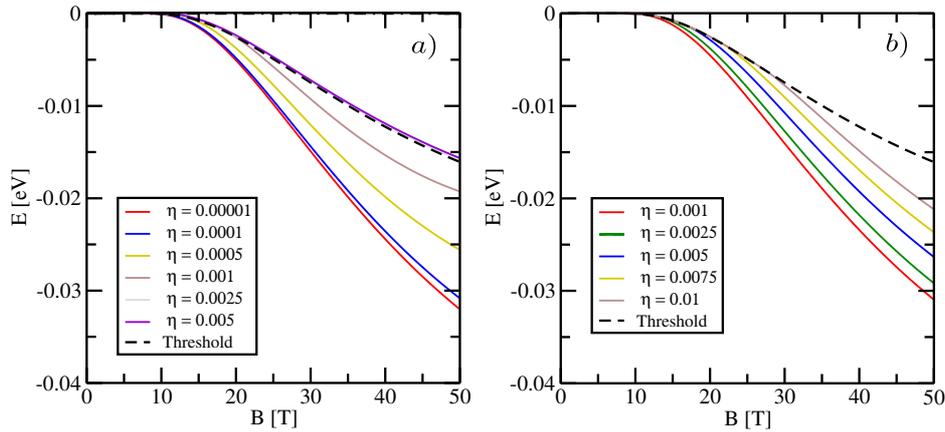


FIGURA 4.7: Diferencia de energía entre el autovalor más bajo del Hamiltoniano Ec. (4.29) y la energía del primer nivel de Landau para dos electrones no interactuantes $2\hbar\omega$. La línea negra cortada es el umbral de un electrón. a) Diferencia calculada usando el autovalor del problema de dos electrones con la interacción de Coulomb efectiva, Ec. (4.30), y b) diferencia calculada usando el autovalor más bajo del problema de dos electrones con la interacción de Coulomb rectificada, Ec. (4.31).

En ambos gráficos de la figura 4.7 la línea negra cortada representa el umbral de ligadura. Para $B < B^*$, el umbral está definido como dos veces la energía del primer nivel de Landau, $2\hbar\omega$, mientras que para $B > B^*$, el sistema liga un electrón en el punto cuántico y por lo tanto el umbral está dado por $\hbar\omega + E_{bind}^1(B)$, donde $E_{bind}^1(B)$ es la energía de un electrón una vez que está ligado.

En los dos gráficos de la figura 4.7 se puede observar que para valores suficientemente chicos de la carga efectiva η , el sistema muestra la ligadura del estado fundamental de dos electrones. Además la ligadura ocurre para valores de intensidad de campo similares a los necesarios para ligar el estado resonante de un electrón. Sin embargo, hay valores de η para los cuales la ligadura del estado de dos electrones ocurre para $B_{2e}^* > B^*$, y para estos valores, la energía del estado de dos electrones está separada del umbral de un electrón.

El proceso de localización del estado fundamental del sistema de dos electrones, involucra que el respectivo autovalor cruce dos umbrales cuando se incrementa la intensidad de campo, el primer umbral es la energía del primer nivel de Landau de dos electrones y el segundo umbral está dado por la energía de un electrón confinado en el punto cuántico más la energía del primer nivel de Landau de un electrón. Estos cruces se pueden observar en el comportamiento de la pureza y la entropía de von Neumann del estado correspondiente. En la figura 4.8 se muestra el comportamiento de ambas cantidades como función de la intensidad de campo magnético, para el problema de dos electrones con la interacción dada por la Ec. (4.31). Para obtener dichas cantidades calculamos la matriz densidad del sistema y trazamos sobre las variables de uno de los electrones. La figura 4.8a) muestra que para un dado valor de η , la pureza toma el valor 0.5 para intensidades de campo bajas, dicho valor corresponde a un estado simétrico respecto al intercambio de las partículas. Cerca del valor $B \approx 10T$, se muestra un pico, el cual corresponde al cruce del autovalor con la energía del primer nivel de Landau, luego, dependiendo del valor de η se observa un cambio abrupto en el comportamiento y la pureza toma el valor de la unidad, este cambio corresponde al cruce del segundo umbral. Para valores chicos de la carga efectiva, η , el cambio abrupto en el comportamiento se superpone con el pico para $B \approx 10T$. Ésto se debe a la baja intensidad de la interacción entre los electrones, lo cual hace que el autovalor del estado fundamental del Hamiltoniano cruce los dos umbrales para intensidades de campo muy cercanas entre sí.

La entropía de von Neumann se muestra en la figura 4.8, la información que muestra y el análisis es el mismo, cuando el estado está localizado la entropía de von Neumann toma valores chicos, mientras que cuando el estado no está localizado toma el valor de la unidad. Nuevamente, para $B \approx 10T$, hay un cambio en el comportamiento, el cual corresponde al cruce del autovalor más bajo del Hamiltoniano con la energía del primer nivel de Landau.

4.6. Resumen y conclusiones

Modificar la energía de un estado resonante en nanoestructuras puede llevar a un mejor rendimiento de la tarea para la cual fue fabricada la nanoestructura, o mejor aún, ampliar la funcionalidad del dispositivo en cuestión.

En este capítulo mostramos que el confinamiento debido a la presencia de un campo magnético permite ligar y localizar estados resonantes de uno y dos electrones en puntos cuánticos semiconductores los cuales se encuentran dentro de nanohilos, un cambio en la naturaleza del estado (de estado metaestable a estado ligado) que afecta fuertemente, por ejemplo, las propiedades ópticas de la nanoestructura.

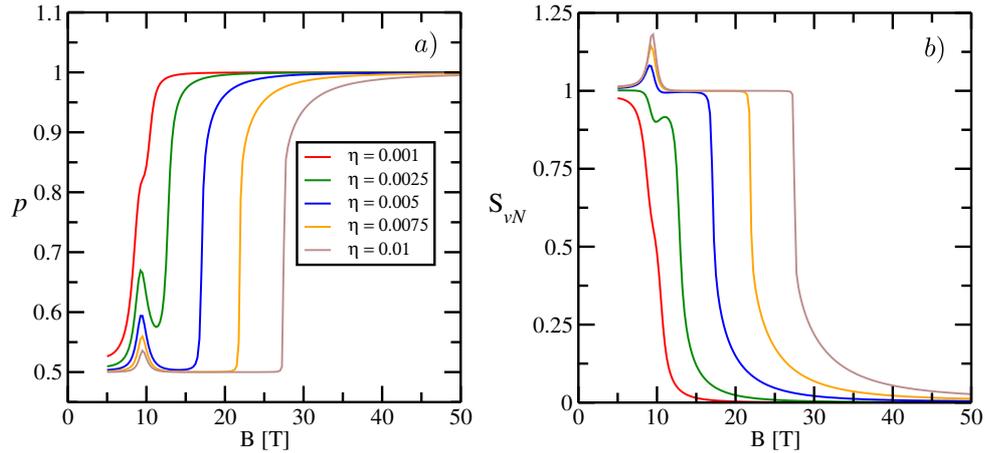


FIGURA 4.8: *a)* Pureza del estado fundamental del problema de dos electrones como función de la intensidad de campo magnético. *b)* Entropía de von Neumann como función de la intensidad de campo magnético.

Estudios previos en átomos [57] y en puntos cuánticos [62, 65], señalan que, en el caso de estados ligados, hay un fenómeno de localización a lo largo del eje de simetría del campo magnético y que la energía de ligadura de los estados aumenta como función de la intensidad de campo magnético. En el caso de resonancias de *forma* en sistemas de un electrón, se mostró que los estados se vuelven más estables cuando se aumenta la intensidad del campo [62, 65] y eventualmente se convierten en estados ligados al alcanzar un valor crítico de campo. Nosotros mostramos que un estado resonante de dos electrones también manifiesta el fenómeno de localización y de ligadura en puntos cuánticos, y que a medida que se aumenta el campo magnético el estado se vuelve más localizado y más ligado.

El sistema de dos electrones, a diferencia del sistema de un electrón, puede tener distintos umbrales de energía, ya que en el sistema de un electrón también puede ocurrir la ligadura de un estado resonante. Los estados resonantes que se vuelven estados ligados pueden cruzar el umbral de cero electrones (este umbral corresponde a la situación en la cual no hay electrones ligados al punto cuántico, en la figura 4.7 se vería como una línea horizontal con valor cero) y el umbral de un electrón (situación en la cual hay un electrón ligado en el punto cuántico, línea negra entrecortada en la figura 4.7), de acuerdo con la magnitud de la interacción entre los electrones. No obstante, basados en los resultados mostrados en la sección anterior, el cruce del umbral de cero electrones solo ocurre al mismo campo crítico, B^* , en el cual ocurre la ligadura del electrón en el problema de una partícula, esto se debe a que la interacción entre los electrones es repulsiva.

Logramos implementar, en forma simple, la aproximación de confinamiento lateral fuerte para el sistema de un electrón, obteniendo así diferentes problemas unidimensionales. Los Hamiltonianos unidimensionales se dedujeron a partir de la función radial considerada para la aproximación de confinamiento lateral. Esto nos permitió analizar distintas regiones del espectro y comparar las diferentes aproximaciones con las soluciones del problema completo en tres dimensiones. Obtuvimos que si tomamos la función radial como la función de onda del primer nivel de Landau, el autovalor más bajo del problema unidimensional muestra un quiebre en su comportamiento, similar a lo que ocurre con el mismo autovalor del problema tridimensional, marcando así el fenómeno de ligadura, pero el valor del campo magnético

para el cual ocurre dicho quiebre está sobreestimado, para valores de campo menores al campo crítico y valores suficientemente grandes, esta aproximación reproduce el comportamiento del problema en tres dimensiones. Por el otro lado, cuando consideramos como función radial la función de onda del pozo radial bidimensional, no encontramos un cambio en el comportamiento del menor autovalor, pero este enfoque permite obtener una buena aproximación de la parte real de la energía del estado resonante en la región del continuo del espectro, es decir, antes de que ocurra la ligadura. Esto último lo podemos concluir ya que comparamos los resultados obtenidos en la aproximación con los resultados obtenidos usando técnicas rigurosas que permiten la obtención de la parte real de la energía de estados resonantes [65].

Con la intención de obtener una aproximación que pueda reproducir el espectro para todos los valores de campo utilizados, propusimos una forma distinta de realizar la aproximación de confinamiento lateral fuerte, basada principalmente en resultados previos [65] y consideraciones geométricas. Esta aproximación consiste en asumir que una vez que el electrón se localiza dentro del punto cuántico, cualquier contribución del potencial para radios mayores al radio del punto cuántico es despreciable. Con esto, pudimos reproducir el comportamiento del problema en tres dimensiones y encontrar el valor del campo crítico, B^* . Esta simplificación nos permitió construir un modelo efectivo simple para el caso del problema de dos electrones, el cual muestra el comportamiento cualitativo correcto del fenómeno de ligadura. Para este problema, encontramos que pueden suceder dos ligaduras, una que corresponde a la ligadura de un electrón en el punto cuántico y la otra corresponde a la ligadura de los dos electrones en el punto cuántico.

Barettin y colaboradores [67], recientemente implementaron un nano-dispositivo semejante al considerado en este capítulo. El tamaño del dispositivo y las energías encontradas por estos autores son similares a las consideradas por nosotros para obtener la ligadura del estado resonante, excepto por el alto de la barrera de potencial. Después de resolver el problema tridimensional con las dimensiones y materiales usadas por Barettin y colaboradores, encontramos que en su configuración hay un número considerable de estados ligados los cuales se localizan dentro del punto cuántico en ausencia de campo magnético, lo cual hace que sea muy difícil detectar y analizar un estado resonante usando la aproximación de confinamiento lateral fuerte. Para aplicar lo desarrollado en este capítulo es necesario que no hayan estados ligados a campo nulo. Para ello hay que disminuir el radio del punto cuántico a $\approx 1 \text{ nm}$. Como consecuencia, la intensidad de campo magnético necesaria para lograr la ligadura del estado resonante aumenta. Esto puede evitarse usando otros materiales o usando potenciales electrostáticos que disminuyan el alto de las barreras de potencial.

Capítulo 5

Crossover dimensional en cuantificadores de entrelazamiento para el modelo de Calogero

Este capítulo está dedicado al estudio de los números de ocupación y a varias entropías de entrelazamiento, como la entropía de von Neumann y de Rényi, en el modelo de Calogero de dos partículas en una y dos dimensiones. Los resultados obtenidos muestran que las entropías del modelo en dimensión uno son funciones no monótonas del parámetro de interacción y en el límite de interacción fuerte toman valores finitos. Respecto al modelo en dimensión dos, obtuvimos que la entropía de von Neumann, en el caso de confinamiento isotrópico, es una función monótonamente creciente del parámetro de interacción y eventualmente diverge logarítmicamente en el límite de interacción fuerte. En relación al modelo bidimensional consideramos un confinamiento anisotrópico, el cual nos permitió demostrar que el comportamiento unidimensional se recupera cuando aumenta la anisotropía del confinamiento. En este sentido, usando la aproximación armónica, probamos que existe un crossover de dimensión dos a dimensión uno y mostramos que solo en el caso de confinamiento isotrópico la entropía de von Neumann diverge. Por otro lado, a partir de cálculos analíticos demostramos que las entropías de Rényi permiten estudiar en detalle la estructura del espectro de la matriz densidad reducida y así poder determinar aquellos valores del parámetro de interacción para los cuales el espacio de Hilbert es finito y por lo tanto, también lo es el espectro de la matriz densidad reducida.

5.1. Introducción

El modelo de Calogero es un sistema cuántico de varias partículas interactuantes que atrae mucha atención desde un punto de vista académico. El principal motivo de esta atracción es que, a pesar de su simplicidad, provee resultados no triviales para ayudar en el entendimiento y estudio de la estadística fraccionaria. Su característica más sobresaliente es que la función de onda del estado fundamental está dada por el factor de Jastrow, el cual es el análogo unidimensional de la función de onda de Laughlin.

Desde su inicio, el modelo de Calogero, su espectro y sus respectivos autoestados, fueron vinculados o relacionados con distintos problemas en física. Respecto a esto, Sutherland [78], mostró que la distribución de probabilidad de la función de onda del estado fundamental para el modelo de N partículas es igual a la densidad de probabilidad conjunta de los autovalores de ensambles aleatorios. En particular, cambiando el parámetro de interacción es posible recuperar la función densidad del

ensamble. Este resultado fue explicado como una consecuencia del factor de Jastrow presente en la función de onda del estado fundamental, pero fue demostrado que esta relación puede ser extendida a funciones respuesta o correlaciones en la densidad de estados de un sistema cuántico caótico [79, 80].

Otro problema de la física que fue relacionado con el modelo de Calogero es el efecto Hall fraccionario. Esta relación fue establecida por los autores Azuma e Izo [81] sobre la base de las cuasi-partículas denominadas *anyones*. Estas partículas no son ni bosones ni fermiones y obedecen a las llamadas estadísticas fraccionarias y a una generalización del principio de exclusión de Pauli [82], es decir, ante el intercambio de partículas, la función de onda para anyones no es ni totalmente simétrica ni totalmente antisimétrica, sino que se genera una fase global. Por este motivo, cuando hablamos de bosones y fermiones en el marco del modelo de Calogero estamos haciendo referencia a la simetría de la función de onda respecto al intercambio de partículas.

Los sistemas de redes de tipo Haldane-Shastry también fueron relacionados con el modelo de Calogero [83, 84]. Esta relación fue establecida a partir del límite de interacción de fuerte, dicho límite funciona cuando las partículas tienen posiciones de equilibrio aisladas bien definidas, como es el caso del modelo de Calogero en dimensión uno.

En los últimos años el interés en los sistemas de partículas interactuantes con variables continuas ha ido en aumento [85, 86]. Este interés se debe principalmente a dos razones: primero, estos modelos presentan características físicas inesperadas, segundo, pueden ser tratados en forma analítica y así obtener resultados exactos con los cuales comparar soluciones aproximadas o pueden ayudar en el entendimiento de conceptos físicos utilizados en el área de información cuántica [87].

Una de las propiedades físicas inesperadas que pueden mencionarse sobre estos modelos, es la similitud entre los números de ocupación de sistemas formados por bosones o por fermiones en el régimen apropiado [88]. En este contexto, los números de ocupación de un orbital natural se refieren a los autovalores y correspondientes autovectores de una dada matriz densidad reducida asociada al estado cuántico del sistema normalizada al número de partículas que posee el sistema. Nosotros vamos a identificar los números de ocupación con los autovalores de la matriz densidad reducida ya que solo difiere en un factor multiplicativo: el número de partículas que constituye el sistema.

Aún para los modelos de variables continuas donde el espectro, el estado fundamental y, en algunos casos, los estados excitados de sistemas de N partículas son conocidos exactamente, la matriz densidad reducida que describe el estado cuántico de un subconjunto de p partículas es difícil de calcular exactamente. Si en la matriz densidad, correspondiente a un estado cuántico de un sistema de N partículas, se realiza la traza parcial sobre las variables que corresponden a $N - p$ partículas, se obtiene una nueva matriz densidad, usualmente conocida como matriz densidad reducida de p partículas. Dicha matriz densidad reducida, permite el estudio de cantidades físicas como los orbitales naturales con sus números de ocupación, así como diferentes entropías de entrelazamiento. Desafortunadamente, las situaciones en las cuales la matriz densidad reducida de p partículas puede ser obtenida en forma exacta [88, 89, 90, 91, 92] son menos frecuentes que aquellas en las cuales el espectro o los autoestados del sistemas son conocidos. Además, la matriz densidad reducida de p partículas no siempre puede ser obtenida en forma analítica, aún cuando las funciones de onda de los autoestados son conocidos exactamente. El modelo de Moshinsky [93], el de Calogero [94, 95] y el de Calogero-Sutherland [78], son claros ejemplos de esta situación.

Recientemente, la habilidad de obtener exactamente la matriz densidad reducida de p partículas [88] o muy buenas aproximaciones de ésta [92, 96], se han convertido en una herramienta muy útil para el estudio del comportamiento de los números de ocupación en sistemas de fermiones y su relación con la generalización del principio de exclusión de Pauli [97, 98]. Por otro lado, al obtener dicha matriz densidad reducida en forma exacta surgen algunas características inesperadas. Por lo general, los sistemas de fermiones tienen un número infinito de números de ocupación no nulos, pero recientemente se encontró que el modelo de Calogero en dimensión uno tiene un conjunto finito de números de ocupación para determinados valores del parámetro de interacción [88], es decir, la matriz densidad reducida de p partículas tiene un número finito de autovalores no nulos. Para obtener estos resultados es necesario escribir en forma analítica la matriz densidad reducida de p partículas, como una matriz finita cuyos elementos pueden ser calculados exactamente. La dimensión de la matriz depende de p , N , el parámetro de interacción y si las partículas son fermiones o bosones.

Otra propiedad encontrada en [88] está relacionada al comportamiento de la entropía de von Neumann, obtenida a partir de los autovalores de la matriz densidad reducida. En todos los casos estudiados, que corresponden a sistemas con distintos número de partículas, se encontró un comportamiento no monótono como función del parámetro de interacción, mostrando un máximo para un valor finito de dicho parámetro.

Existen numerosos ejemplos que muestran que diferentes entropías de entrelazamiento, obtenidas a partir de la matriz densidad reducida asociada al estado fundamental de sistemas en dos y tres dimensiones, son funciones monótonas del parámetro de interacción entre las partículas [99, 100]. Puede mencionarse por ejemplo, las entropías de los estados líquidos de Laughlin del efecto Hall cuántico fraccionario estudiadas en los trabajos de Zeng *et al.* [101], Iblisdir *et al.* [102] y Haque *et al.* [103]. Notar que la función de onda de Laughlin para n partículas y factor o fracción de llenado (*filling factor*) $1/m$ tiene exactamente la misma forma que la función de onda del estado fundamental para el modelo de Calogero unidimensional de n partículas con magnitud de interacción $m(m-1)$. Sin embargo, las particiones que determinan entre qué subsistemas se calculan las entropías no son equivalentes.

El objetivo de este capítulo es estudiar diferentes entropías de entrelazamiento como función del parámetro de interacción para el modelo de Calogero de dos partículas en una y dos dimensiones. Consideramos que el parámetro de interacción es continuo, de esta forma la función de onda del estado fundamental es exacto pero la matriz densidad reducida (como estudiamos el modelo de Calogero de dos partículas solo es posible obtener la matriz densidad reducida de una partícula, la cual llamaremos simplemente matriz densidad reducida) y su espectro no necesariamente pueden ser calculados exactamente. Usamos el límite de interacción fuerte para mostrar que, en dimensión uno, la entropía de von Neumann siempre tiene un valor finito, mientras que en dimensión dos el modelo tiene una entropía divergente. En particular, mostramos que el cambio de dimensión dos a dimensión uno puede ser caracterizado como un *crossover* o, más precisamente, la entropía de von Neumann del modelo de Calogero anisotrópico en dimensión dos se comporta como un sistema unidimensional o bidimensional dependiendo del parámetro de anisotropía. También mostramos que las entropías de entrelazamiento de Rényi permiten detectar si el sistema tiene un número finito de ocupaciones no nulas para valores particulares del parámetro de interacción.

El capítulo está organizado de la siguiente manera. Empezamos con la sección 5.2 donde damos algunas definiciones relacionadas a las entropías de entrelazamiento.

En la sección 5.3 presentamos algunos resultados básicos para el modelo de Calogero, mientras que en la sección 5.4 describiremos el método numérico utilizado para la obtención de resultados y calculamos el espectro y la entropía de von Neumann para la matriz densidad reducida de una partícula en una dimensión. La sección 5.5 está dedicada a las entropías de Rényi del modelo de Calogero en dimensión uno. En la sección 5.6 estudiamos el caso bidimensional con confinamiento isotrópico mientras que en la sección 5.7 tratamos el caso anisotrópico en el límite de interacción fuerte y utilizando la aproximación armónica calculamos los autovalores de la matriz densidad reducida y las entropías de entrelazamiento en dicho límite. En la sección 5.8 analizamos el *crossover* dimensional, y, para finalizar, en la sección 5.9 discutimos los resultados y presentamos algunas conclusiones.

5.2. Entropías de información cuántica

La descripción de un sistema cuántico puede realizarse usando el formalismo de la función de onda y resolver la ecuación de Schrödinger o bien usando el formalismo de la matriz densidad [104]. El formalismo de la matriz densidad es equivalente al formalismo de la función pero permite trabajar con sistemas de muchas partículas de una forma más simple, además provee un lenguaje más conveniente para tratar conceptos como el entrelazamiento o la decoherencia.

Para un dado sistema cuántico el cual tiene probabilidad p_i de estar en el estado cuántico $|\Psi_i\rangle$, la matriz densidad se define como

$$\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|. \quad (5.1)$$

Generalmente el conjunto $\{p_i, |\Psi_i\rangle\}$ es conocido como un *ensamble de estados puros*. Hay que notar que si un sistema cuántico cuyo estado $|\Psi\rangle$ es conocido y tiene probabilidad $p = 1$ de estar ocupado, es decir, es el único estado ocupado, se dice que el sistema está en un estado puro. En este caso la matriz densidad es simplemente

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|. \quad (5.2)$$

Como mencionamos antes, el formalismo de la matriz densidad es equivalente al formalismo de la función de onda. ésto significa que cualquier cantidad física que puede ser obtenida utilizando la función de onda también puede ser obtenida a partir de la matriz densidad. Por ejemplo el valor de expectación de un operador, A , puede calcularse de la siguiente manera

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(A\rho). \quad (5.3)$$

Por otro lado, es posible deducir una ecuación de evolución para la matriz densidad, la solución a dicha ecuación es la evolución temporal del estado cuántico del sistema.

La matriz densidad cumple dos propiedades importante: ρ es un operador hermitiano y a partir de la condición de normalización de la función de onda se deduce que $\text{Tr}(\rho) = 1$. Para distinguir si un sistema se encuentra en un estado puro o en un estado mixto se utiliza el valor de $\text{Tr}(\rho^2)$. Si dicho valor es igual a uno, el sistema está en un estado puro pero si es distinto a uno (en particular es menor a uno) el estado es mixto.

El contenido de información del sistema cuántico puede ser estudiado analizando diferentes entropías que se definen a partir de la matriz densidad. En particular, si estamos interesados en estudiar el contenido de información de un subsistema

o de una partición del sistema cuántico, las entropías cuánticas se definen a partir de la matriz densidad reducida de dicho subsistema o partición. Esta matriz densidad reducida se obtiene calculando la traza parcial sobre todas las variables que no corresponden a la partición que se quiere analizar.

Las ecuaciones que mostramos en el resto de esta sección corresponden a un sistema cuántico formado por dos partículas por lo tanto la partición tiene que realizarse en las partículas. Aún así las ecuaciones pueden ser generalizadas a cualquier sistema cuántico donde pueden considerarse distintas particiones.

La matriz densidad reducida de una partícula para un sistema de dos partículas sin espín con función de onda total $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, donde $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ son los vectores posición de las partículas, puede construirse trazando sobre una de las partículas

$$\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2. \quad (5.4)$$

A lo largo de este capítulo y el siguiente vamos a trabajar en el caso en el cual la función de onda del sistema es conocida y como estamos interesados en los números de ocupación y orbitales naturales de una de las componentes del sistema vamos a trabajar siempre con la matriz densidad reducida, por lo tanto, vamos a utilizar la letra griega ρ para denotar a la matriz densidad reducida en lugar de la matriz densidad.

Los orbitales naturales y los respectivos números de ocupación asociados a la matriz densidad reducida se obtienen a partir de la ecuación integral

$$\int \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \phi_i(\mathbf{r}'_1) d\mathbf{r}'_1 = \lambda_i \phi_i(\mathbf{r}_1), \quad (5.5)$$

donde las autofunciones $\phi_i(\mathbf{r}_1)$ son los orbitales naturales y los autovalores λ_i los números de ocupación correspondientes [105, 87].

Los números de ocupación y orbitales naturales se definen exigiendo que la normalización de la matriz densidad reducida sea igual al número de partículas total del sistema. Sin embargo, es posible normalizar todo a la unidad e identificar los autovalores y autovectores de la matriz densidad reducida definidos de esta manera con los orbitales naturales y sus ocupaciones ya que la única diferencia es una constante de multiplicación.

El entrelazamiento entre las particiones del sistema, en este caso entre las dos partículas, puede ser cuantificado mediante distintas medidas de entrelazamiento. Estas medidas son funciones de las entropías cuánticas definidas de tal forma que se anulan para estados separables (ausencia de entrelazamiento). En particular, la definición de las medidas de entrelazamiento debe tener en cuenta el entrelazamiento debido a la simetría de la función de onda [99, 106].

A continuación vamos a mostrar la definición de algunas de las entropías más usadas en la literatura, y en particular, son las entropías que vamos a analizar en el resto de este capítulo y a lo largo del siguiente.

La entropía de von Neumann es posiblemente la más conocida y una de las más estudiadas, esta se define de la siguiente forma [104],

$$S_{vN} = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i. \quad (5.6)$$

Junto a la entropía de von Neumann, suele analizarse también la entropía lineal,

$$S_L = 1 - \text{Tr} \rho^2 = 1 - \sum_i \lambda_i^2. \quad (5.7)$$

Estas entropías han sido ampliamente utilizadas para el estudio del entrelazamiento en sistemas de variables continua y modelos de espín [100, 107, 108, 99]. Otro grupo, son las entropías de Rényi, las cuales son una familia definida por

$$S^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log_2 (\text{Tr}(\rho^\alpha)) = \frac{1}{1-\alpha} \log_2 \left(\sum_i \lambda_i^\alpha \right). \quad (5.8)$$

Esta familia ha sido usada ampliamente para estudiar sistemas de pocos cuerpos o sistemas extendidos [109, 108]. Cambiando el valor del parámetro α es posible recuperar otras entropías, como por ejemplo la *min-entropy* para $\alpha \rightarrow \infty$ y la *max-entropy* para $\alpha \rightarrow 0$. La min-entropy sirve como una cota inferior para las medidas de entrelazamiento obtenidas a partir de las entropías cuánticas. La max-entropy o entropía de Hartley, es especialmente particular ya que depende directamente del rango de Schmidt de la matriz densidad. Si R es el número de autovalores no nulos de la matriz densidad, la entropía de Hartley es $S^0 = \log_2 R$, además en sistemas bipartitos sirve como criterio para una representación clásica del estado cuántico [110]. El espectro de la matriz densidad puede ser analizado en detalle usando las entropías de Rényi para distintos valores del parámetro α [111].

Por último, la entropía de von Neumann puede ser obtenida a partir de la entropía de Rényi tomando $\alpha = 1$.

5.3. El modelo de Calogero para dos partículas

El Hamiltoniano de Calogero para dos partículas en dimensión D [94] puede escribirse como

$$H = h(1) + h(2) + \nu(\nu - 1) \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^2}, \quad (5.9)$$

donde \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 son las posiciones de cada partícula y $\nu(\nu - 1)$ es la magnitud de interacción como fue presentada por Sutherland [78]. El Hamiltoniano de una partícula en Ec. (5.9) corresponde al Hamiltoniano con confinamiento armónico, es decir,

$$h(i) = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} r_i^2; \quad i = 1, 2, \quad (5.10)$$

donde estamos usando unidades atómicas ($\hbar = 1$, $m = 1$ y $\omega = 1$) para describir el sistema.

Si bien la solución del estado fundamental del modelo de Calogero es conocida para cualquier dimensión, para escribir la función de onda hay que separar el caso $D = 1$ del caso $D \geq 2$. A su vez cada caso tiene que ser dividido dependiendo si las partículas son bosones o fermiones.

5.3.1. Caso unidimensional

Para dos bosones, la función de onda totalmente simétrica del estado fundamental y la correspondiente energía están dadas por

$$\psi_0^b(x_1, x_2) = C_{1,\nu}^b \Delta_\nu e^{-\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)}; \quad E = (\nu + 1), \quad (5.11)$$

donde Δ_ν es el factor de Jastrow

$$\Delta_\nu = |x_1 - x_2|^\nu, \quad (5.12)$$

mientras que para dos fermiones sin espín se tiene la función de onda totalmente antisimétrica es

$$\psi_0^f(x_1, x_2) = C_{1,\nu}^f \text{sign}(x_1 - x_2) \Delta_\nu e^{-\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)}, \quad (5.13)$$

donde $C_{1,\nu}^b$ y $C_{1,\nu}^f$ son constantes de normalización [112].

Recientemente se demostró que en la función de onda de bosones (fermiones) con $\nu = 2n$ ($\nu = 2n - 1$), $n \in \mathbb{N}$, el valor absoluto en la Ec. (5.12) (Ec. (5.13)) puede ser ignorado y las integrales necesarias para calcular la matriz densidad reducida son integrales de funciones Gaussianas con potencias impares (pares) del factor de Jastrow. Más aún, la matriz densidad reducida es una función Gaussiana multiplicada por una función polinómica de las coordenadas. En dichos casos, la expresión general para $\rho_N^{(p)}$, puede ser escrita como suma de polinomios de Hermite [88].

5.3.2. Dos o más dimensiones

Para dimensiones mayores o iguales que dos las funciones de onda exactas para el estado fundamental de dos bosones,

$$\Psi_0^b = C_{D,\nu}^b |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^{\mu_b} e^{-\frac{1}{2}(r_1^2 + r_2^2)}, \quad (5.14)$$

y de dos fermiones,

$$\Psi_0^f = C_{D,\nu}^f |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^{\mu_f} \psi_S e^{-\frac{1}{2}(r_1^2 + r_2^2)}, \quad (5.15)$$

son bastante similares a las del modelo en una dimensión [113]. En las Ecs. (5.14) y (5.15) los exponentes μ_b y μ_f son funciones de la magnitud de interacción y de la dimensión D , mientras que ψ_S es una función de las coordenadas que garantiza el carácter antisimétrico de la función de onda de fermiones.

De la misma que forma que en el caso en dimensión uno, la función de onda exacta del estado fundamental de bosones y fermiones no puede ser obtenida para el mismo conjunto de parámetros, ya que

$$\mu_b = \frac{1}{2} \left(\sqrt{(D-2)^2 + 4\nu(\nu-1)} - (D-2) \right), \quad (5.16)$$

y

$$\mu_f = \frac{1}{2} \left(\sqrt{D^2 + 4\nu(\nu-1)} - D \right), \quad (5.17)$$

son números enteros para valores distintos de ν . Como mencionamos antes, el factor ψ_S asegura que la función de onda de la Ec. (5.15) sea totalmente antisimétrica respecto al intercambio de partículas y se determina a partir del determinante de Slater en el cual se usan las funciones del oscilador armónico. Para $D = 2$ hay dos determinantes que cumplen esta condición. Ambos son linealmente independientes y pueden ser elegidos de forma tal que sean autofunciones del operador de momento angular

$$\psi_S^\pm = \begin{cases} (x_1 - x_2) + i(y_1 - y_2) \\ (x_1 - x_2) - i(y_1 - y_2) \end{cases} \quad L_z \psi_S^\pm = \pm \psi_S^\pm. \quad (5.18)$$

A partir de esta ecuación vemos que es posible armar infinitas funciones de onda para el estado fundamental de dos fermiones, simplemente tomando distintas

combinaciones lineales de ψ^\pm . Aún así, es posible que la matriz densidad reducida obtenida para cada función de onda de fermiones tenga entropía distinta.

5.4. Números de ocupación y entropía de von Neumann: caso unidimensional

Recientemente el modelo de Calogero unidimensional y el espectro de la matriz densidad reducida fueron analizados [88]. En particular, se analizó el comportamiento de los números de ocupación y la entropía de von Neumann en los valores del parámetro de interacción en los cuales la matriz densidad reducida tiene un número finito de autovalores, es decir para $\nu = 2n$ en el caso de bosones y $\nu = 2n + 1$ en el caso de fermiones, donde n es un número natural. Estos valores del parámetro ν no son valores arbitrarios ya que para estos valores los cálculos involucrados para determinar la matriz densidad y sus respectivos autovalores pueden realizarse en forma analítica.

A partir de los resultados obtenidos en [88] surge la pregunta cuál es el comportamiento de los números de ocupación para valores intermedios del parámetro ν , es decir para valores de ν en el conjunto de los números reales. Por este motivo, en este capítulo consideramos al parámetro ν como una variable continua y resolvemos la Ec. (5.5) utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz. Cómo implementar el método variacional para calcular el espectro de la matriz densidad reducida ha sido descrito en la literatura [100, 114, 115]. Luego, a partir de los autovalores obtenidos numéricamente calculamos las diferentes entropías de entrelazamiento mencionadas previamente.

Para calcular los autovalores de la matriz densidad reducida usando el método variacional es necesario elegir un conjunto de funciones que sirva como base del espacio de Hilbert correspondiente. En este caso la elección más adecuada es el conjunto de autoestados del oscilador armónico que ya fueron usados para obtener los autovalores exactos de la matriz densidad reducida de una partícula para valores enteros de ν

$$\phi_n(x) = \frac{e^{-\frac{1}{2}x^2} H_n(x)}{\sqrt{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}}}, \quad (5.19)$$

donde $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite.

De esta forma, los elementos de matriz de la matriz densidad reducida son

$$\rho_{n,m} = \int \phi_n(x_1) \left[\int \rho(x_1, x_2) \phi_m(x_2) dx_2 \right] dx_1, \quad (5.20)$$

donde $\phi_n(x_1)$ denota un elemento de la base.

Los autovalores de la matriz densidad reducida de una partícula, calculados utilizando el método variacional, para el modelo unidimensional de bosones y fermiones se muestran en un gráfico log-log en la figura 5.1. La característica más llamativa que puede observarse de los datos mostrados es el decaimiento abrupto de la mayoría de los autovalores en los valores enteros del parámetro ν .

Hay que tener en cuenta que en el caso de fermiones todos los autovalores están doblemente degenerados [116], por lo tanto hay cuatro autovalores que nunca se anulan, los cuatro con mayor valor. Para $\nu = 2n + 1$, solo hay $2n + 2$ autovalores distintos de cero [88]. El error numérico de los autovalores variacionales para valores enteros de ν es $O(\epsilon_m)$, donde $\epsilon_m \approx 2 \times 10^{-15}$ es la precisión de la máquina.

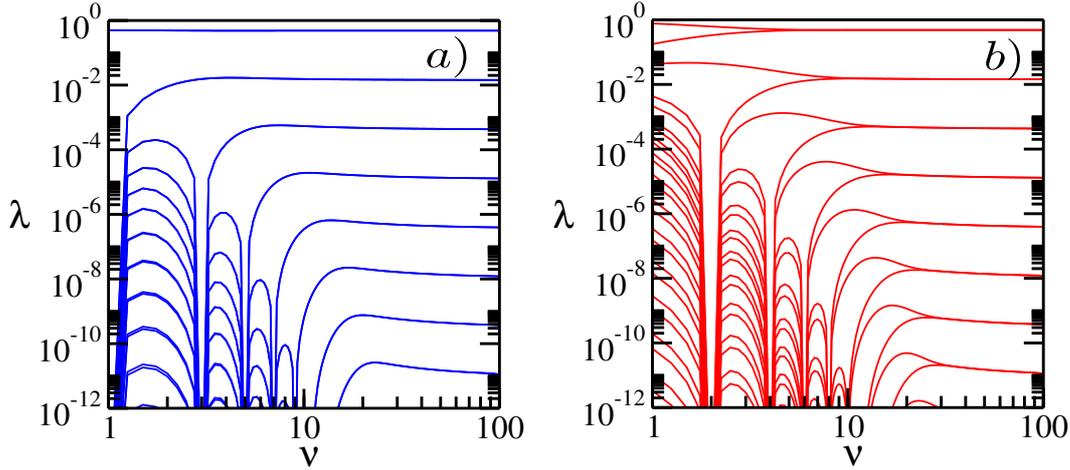


FIGURA 5.1: Números de ocupación obtenidos variacionalmente usando una base de 50 funciones de una partícula (ver Ec. (5.19)) para el estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional de *a)* fermiones y *b)* bosones. Las caídas abruptas a cero de los autovalores para valores enteros del parámetro de interacción (impares en el caso de fermiones y pares en el caso de bosones) indican que el número de ocupaciones no nulas para dichos valores es finito. En *a)* cada autovalor es doblemente degenerado.

Para los dos casos mostrados en la figura 5.1 se puede observar que todos los autovalores de la matriz densidad reducida tiene un comportamiento similar. Un dado autovalor, a excepción de los de mayor valor, se anula para ciertos valores del parámetro de interacción, pero para valores de ν lo suficientemente grande, el mismo autovalor se vuelve independiente de ν . Esta última situación corresponde a aquellos valores del parámetro de interacción a partir de los cuales vale la aproximación de confinamiento fuerte. Como puede observarse en la figura 5.2*a)*, para valores grandes del parámetro de interacción ν las ocupaciones de fermiones y bosones tienen el mismo valor asintótico. Esto se debe a que en el régimen de interacción fuerte las interacciones de intercambio se anulan y como consecuencia, la entropía de von Neumann para ambos casos (bosones y fermiones) toman el mismo valor, figura 5.2*b)*. En este límite la entropía de von Neumann converge a un valor finito que puede ser calculado analíticamente [88, 117].

Como puede observarse en la figura 5.2, la entropía de von Neumann toma un valor máximo alrededor de $\nu = 5$ para ambos casos [111]. La presencia de un máximo en la entropía de von Neumann es una propiedad inesperada ya que en sistemas de variables continuas el comportamiento de la entropía de von Neumann está estrictamente relacionado con la derivada de la energía respecto al parámetro de interacción [107, 115]. Para estado ligados, se observó que la entropía de von Neumann aumenta cuando la derivada de la energía con respecto al parámetro de interacción disminuye. En nuestro caso la derivada de la energía aumenta monótonamente pero la entropía de von Neumann es una función no monótona, en contradicción con lo observado en sistemas tridimensionales.

Usualmente, un comportamiento no monótono en un cuantificador de información cuántica, como entropías de entrelazamiento, está relacionado con cambios en la analiticidad en la energía del estado fundamental, como sucede en la transición de fase cuántica [118]. Otra razón puede ser el cambio en los pesos relativos entre estados con diferente entrelazamiento como sucede cuando la temperatura varía

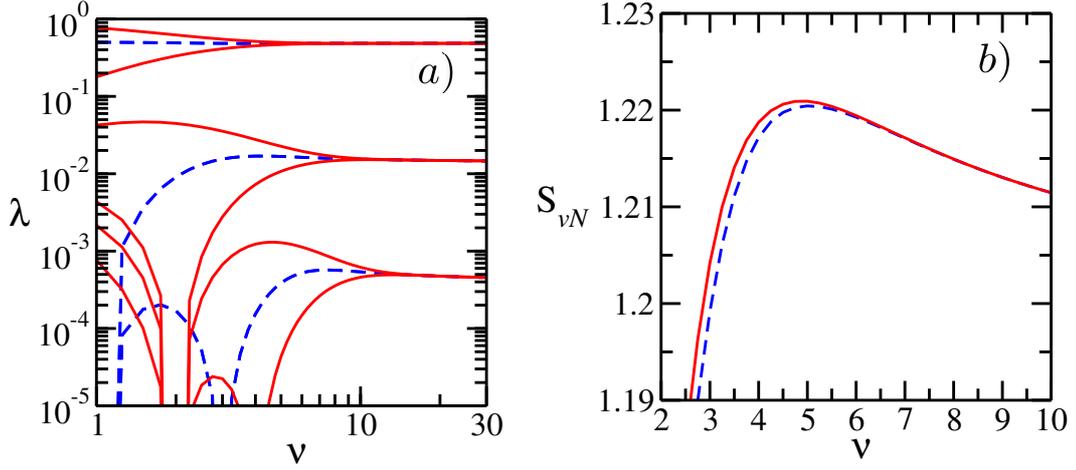


FIGURA 5.2: *a)* Números de ocupación más grandes para bosones (línea roja) y fermiones (línea azul cortada) y *b)* entropía de von Neumann para el estado fundamental del modelo de Calogero unidimensional para bosones (línea roja) y fermiones (línea azul cortada). Todos los valores se obtuvieron mediante el método variacional usando una base de 50 funciones de una partícula (ver Ec. (5.19)). Notar que las ocupaciones para bosones y fermiones toman el mismo valor asintótico en el límite de interacción fuerte.

en algunas mezclas térmicas [119]. La energía del estado fundamental y las funciones de onda totalmente simétricas o antisimétricas de las Eqs. (5.11) y (5.13) son analíticas con respecto al parámetro ν . Este máximo también podría aparecer si las ocupaciones fueran no analíticas para este valor del parámetro de interacción, sin embargo, las ocupaciones son analíticas respecto al parámetro ν . Esto lo podemos asegurar a partir de un análisis realizado usando la técnica de escaleo finito (*finite size scaling*) [120].

Para el caso de bosones, la primera ocupación que se anula en $\nu = 2$ es se muestra en la figura 5.3a) calculada para distintos tamaños de la base, denotados por M . Podemos observar que los resultados dependen del tamaño de la base, pero como puede verse en la figura 5.3b), los datos se superponen en una única curva al realizar la transformación de escaleo finito. Este colapso es consistente con la analiticidad del autovalor respecto del parámetro ν . Este mismo fenómeno se repite para el caso de otros autovalores en los valores del parámetro ν correspondientes y para el caso de fermiones.

5.5. Entropía de Rényi y soporte finito de la matriz densidad reducida

El comportamiento de la entropía de von Neumann, mostrado en la figura 5.2, no permite observar la estructura del espectro de la matriz densidad reducida de una partícula como función del parámetro de interacción ν . No se observan características relevantes en los valores del parámetro ν para los cuales la matriz densidad reducida tiene solo un número finito de autovalores no nulos, es decir, el espacio de Hilbert donde el sistema es descrito se vuelve finito. Como veremos ahora, el comportamiento suave es consecuencia de la analiticidad de las ocupaciones respecto a ν .

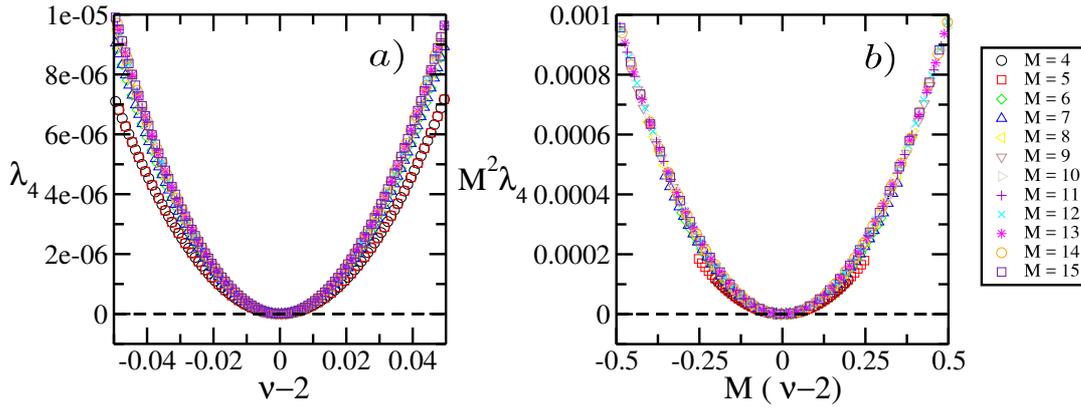


FIGURA 5.3: a) Cuarto número de ocupación para el caso de dos bosones calculado variacionalmente para diferentes tamaños de base M . b) Colapso de los datos luego de un análisis de escaleo finito. El intervalo del parámetro de interacción tenido en cuenta está centrado alrededor de $\nu = 2$ que es el primer valor para el cual este número de ocupación se anula.

Sin embargo, la estructura del espectro puede ser puesta en evidencia por la entropía de Rényi, definida en la Ec. (5.8). La familia de entropías de Rényi permite explorar distintas regiones del espectro, ya que al cambiar el parámetro α es posible modificar los pesos de los distintos autovalores de la matriz densidad reducida.

Como mostramos en la sección anterior, los autovalores de la matriz densidad reducida de una partícula son funciones analíticas de ν . En esta sección demostraremos que para el caso de bosones (el caso de fermiones es análogo), la entropía de Rényi es una función no analítica de ν , mientras que las ocupaciones si lo son, incluso para los valores $\nu_n = 2n$ donde la matriz densidad reducida tiene solo $2n + 1$ ocupaciones no nulas.

La única condición en la que se basan los cálculos y resultados que mostramos a continuación es la analiticidad de los autovalores de la matriz densidad reducida en un entorno de los puntos discretos donde el espectro es finito. Esta condición la podemos asegurar debido al análisis hecho con la técnica de escaleo finito. Asumimos entonces que

$$\lambda_i(\nu) \sim \begin{cases} \lambda_i(\nu_n) + \lambda_i^{(1)}(\nu - \nu_n) & \text{si } i \leq 2n + 1 \\ \lambda_i^{(2)}(\nu - \nu_n)^{2k_{i,n}} & \text{si } i > 2n + 1, \end{cases} \quad \text{para } \nu \rightarrow \nu_n \quad (5.21)$$

donde $\lambda_i^{(1)}$, $\lambda_i^{(2)}$ son constantes y $k_{i,n} \geq 1$ es un entero. Con esto la definición de la entropía de Rényi dada por la Ec. (5.8) puede ser escrita como

$$\begin{aligned}
 S^\alpha(\nu) &= \frac{1}{1-\alpha} \log_2 \left(\sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu) + \sum_{i=2n+2}^{\infty} \lambda_i^\alpha(\nu) \right) \\
 &= \frac{1}{1-\alpha} \left[\log_2 \left(\sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu) \right) + \log_2 \left(1 + \frac{\sum_{i=2n+2}^{\infty} \lambda_i^\alpha(\nu)}{\sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu)} \right) \right] \\
 &\underset{\nu \rightarrow \nu_n}{\sim} \frac{1}{1-\alpha} \left[\log_2 \left(\sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu) \right) + \frac{\sum_{i=2n+2}^{\infty} \lambda_i^\alpha(\nu)}{\ln 2 \sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu)} \right] \\
 &= S_n^\alpha(\nu) + s_n^\alpha(\nu). \tag{5.22}
 \end{aligned}$$

Notar que $S_n^\alpha(\nu_n) = S^\alpha(\nu_n)$ y $s_n^\alpha(\nu_n) = 0$. Con todo esto es posible evaluar la derivada de la entropía de Rényi en $\nu = \nu_n$

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial S^\alpha(\nu)}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_n} &= \left. \frac{\partial S_n^\alpha(\nu)}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_n} + \frac{\alpha}{\ln 2 (1-\alpha)} \left(\frac{\sum_{i=2n+2}^{\infty} \lambda_i^{\alpha-1}(\nu) \partial_\nu \lambda_i(\nu)}{\sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu)} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\sum_{i=2n+2}^{\infty} \lambda_i^\alpha(\nu) \sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^{\alpha-1}(\nu) \partial_\nu \lambda_i(\nu)}{\left(\sum_{i=1}^{2n+1} \lambda_i^\alpha(\nu) \right)^2} \right)_{\nu=\nu_n}. \tag{5.23}
 \end{aligned}$$

El primer término de la Ec. (5.23) es una constante bien definida y el tercero es cero. Como consecuencia de esto la derivada está dominada por el segundo término. Usando la expansión analítica de los autovalores dada por la Ec. (5.21) y asumiendo que k_m es el valor mínimo de $k_{i,n}$ el comportamiento asintótico dominante de s_n^α es

$$s_n^\alpha(\nu) \underset{\nu \rightarrow \nu_n}{\sim} C_n ((\nu - \nu_n)^{2k_m})^\alpha = C_n |\nu - \nu_n|^{\delta k_m}, \tag{5.24}$$

donde $\delta = 2\alpha$, lo cual implica que

$$\left. \frac{\partial s_n^\alpha(\nu)}{\partial \nu} \right|_{\nu \rightarrow \nu_n} \underset{\nu \rightarrow \nu_n}{\sim} \delta k_m C_n |\nu - \nu_n|^{\delta k_m - 1} \text{sign}(\nu - \nu_n). \tag{5.25}$$

Esta ecuación da como resultado que

$$\left. \frac{\partial S^\alpha(\nu)}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_n} = \begin{cases} \left. \begin{array}{l} -\text{sign}(C_n) \times \infty & \text{si } \nu \rightarrow \nu_n^- \\ \text{sign}(C_n) \times \infty & \text{si } \nu \rightarrow \nu_n^+ \end{array} \right\} & \text{si } k_m \delta < 1 \\ \left. \begin{array}{l} \partial_\nu S_n^\alpha(\nu_n) - C & \text{si } \nu \rightarrow \nu_n^- \\ \partial_\nu S_n^\alpha(\nu_n) + C & \text{si } \nu \rightarrow \nu_n^+ \end{array} \right\} & \text{si } k_m \delta = 1 \\ \partial_\nu S_n^\alpha(\nu_n) & \text{si } k_m \delta \geq 1. \end{cases} \tag{5.26}$$

Aún cuando la derivada de S^α es continua para $k_m \delta \geq 1$, se puede ver fácilmente, a partir de la forma asintóticas de los autovalores, Eq. (5.21), que la segunda derivada de la entropía diverge para $1 < k_m \delta < 2$, pero es analítica para $k_m \delta = 2$. Esto quiere

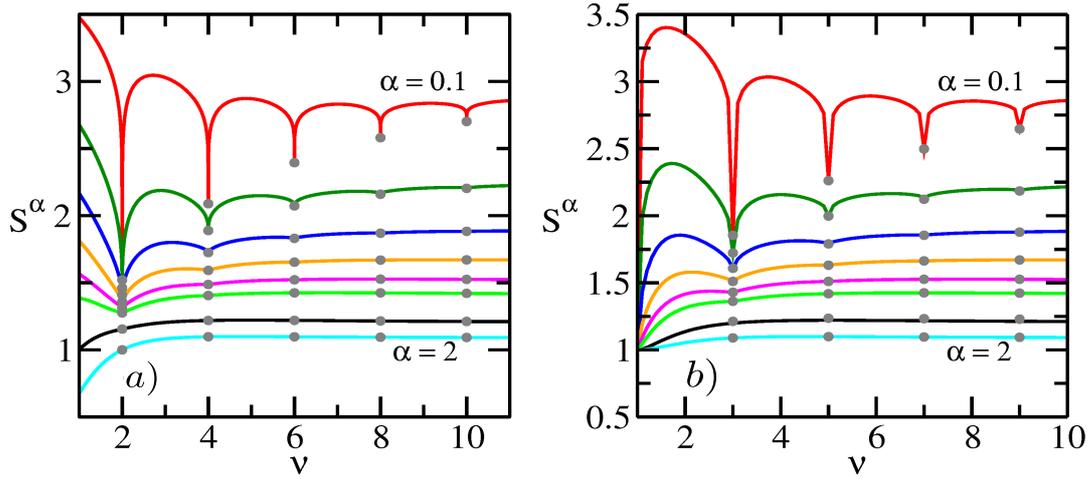


FIGURA 5.4: Entropía de von Neumann unidimensional (línea negra) y entropías de Rényi con $\alpha = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 2$ en función del parámetro de interacción ν (líneas roja, verde oscuro, azul, anaranjada, verde claro y cian respectivamente). a) Para el caso de bosones. b) Para fermiones. Los valores exactos de las entropías para $\nu = 2n$ o $\nu = 2n + 1$ se muestran como puntos grises para el caso de bosones y fermiones respectivamente.

decir que el *kink* presente en $k_m\delta = 1$ se vuelve cada vez más suave hasta desaparecer en $k_m\delta = 2$.

Basados en los resultados numéricos obtenidos, tenemos que en el modelo de Calogero unidimensional $k_m = 1$ para todos los valores de i y n . La entropía de Rényi presenta entonces puntos críticos con derivadas infinitas para $\alpha < 1/2$ y un *kink* para $\alpha = 1/2$ que desaparece en forma continua a medida que α aumenta hasta que α toma el valor de la unidad [111]. Por esto, la entropía de von Neumann, que puede ser obtenida con $\alpha \rightarrow 1$ es una función analítica de ν .

Como consecuencia de la hipótesis de analiticidad de los autovalores de la matriz densidad reducida, obtuvimos el comportamiento no analítico de las entropías de Rényi, Ec. (5.26). Este comportamiento puede observarse en la figura 5.4a) para $\nu = 2$, donde se muestran las entropías de Rényi en función del parámetro de interacción para distintos valores de α para el modelo de Calogero en dimensión uno de dos bosones. En la figura, también pueden apreciarse los valores de las entropías de Rényi exactas para aquellos valores del parámetro ν en los cuales la matriz densidad reducida tiene un número finito de autovalores no nulos, es decir para $\nu = 2n$. Una característica importante que vale la pena mencionar, es que las entropías de Rényi son decrecientes como función del parámetro α , por lo tanto la curva superior mostrada corresponde al menor valor de α , y están acotados inferiormente por S_x^∞ , Ec. (5.57).

Para el caso de fermiones los cálculos son similares y no los repetiremos. Como se puede ver en la figura 5.4b) el gráfico obtenido es muy similar al de bosones siendo la única diferencia que los comportamientos no analíticos en lugar de presentarse en los valores $\nu = 2n$ se presentan en los valores en $\nu = 2n + 1$.

La entropía de Rényi y su derivada primera como función del parámetro de interacción en un entorno de $\nu = 4$ se muestran en la figura 5.5 para los valores de $\alpha = 0.4, 0.5, 0.6$, donde podemos apreciar que la entropía de Rényi presenta un punto crítico con derivada infinita para $\alpha = 0.4$, un *kink* con derivada discontinua

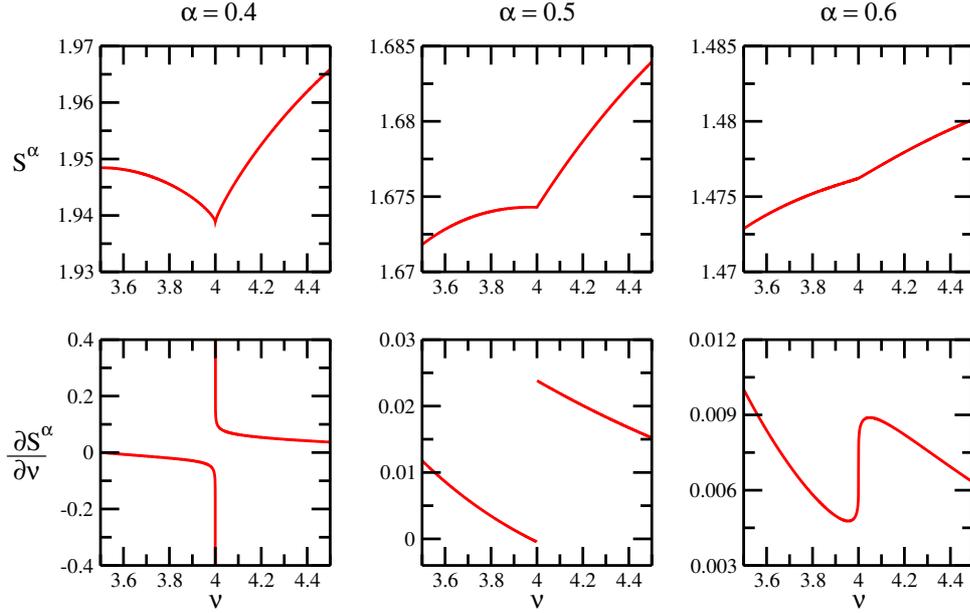


FIGURA 5.5: Entropía de Rényi unidimensional para el caso de bosones (fila superior) y sus derivadas (fila inferior) en función del parámetro de interacción en un entorno de $\nu = 4$ para $\alpha = 0.4, 0.5, 0.6$ de izquierda a derecha.

para $\alpha = 0.5$ y para $\alpha = 0.6$ la derivada primera es finita.

En resumen, las entropías de Rényi son capaces de mostrar o determinar aquellos valores de ν para los cuales la matriz densidad reducida de una partícula tiene soporte finito. Un comportamiento similar fue observado por Amico y colaboradores para cadenas de espín $1/2$ [121, 122, 123, 110].

5.6. Números de ocupación y entropía de von Neumann: caso bidimensional

Para el modelo de Calogero de dos partículas en dimensión dos, la función de onda del estado fundamental es conocida para todos los valores de ν Ecs. (5.14) y (5.15). Pero por otro lado, la matriz densidad reducida junto con sus autovalores y cantidades que pueden derivarse a partir de éstos fueron obtenidas numéricamente utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz. En la figura 5.6a) mostramos el comportamiento de la entropía de von Neumann para el caso de bosones y de fermiones. En esta figura, la línea verde corresponde al caso de fermiones con $\psi_S = \psi_S^+ = (x_1 - x_2) + i(y_1 - y_2)$, mientras que la curva azul es para $\psi_S = \psi_S^x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S^+ + \psi_S^-)$ y la curva roja en el subgráfico corresponde a la entropía de von Neumann para el caso de bosones. De los resultados obtenidos podemos observar que las tres curvas tienen un comportamiento que sigue una divergencia logarítmica de la entropía de von Neumann cuando aumenta el parámetro ν , notar que la figura está en escala logarítmica.

Con la definición de ψ_S^x y definiendo $\psi_S^y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S^+ - \psi_S^-)$, se pueden construir distintas funciones de onda para el estado fundamental de fermiones, esto se logra reemplazando las distintas funciones ψ_S en la Ec. (5.15), de esta forma se obtienen

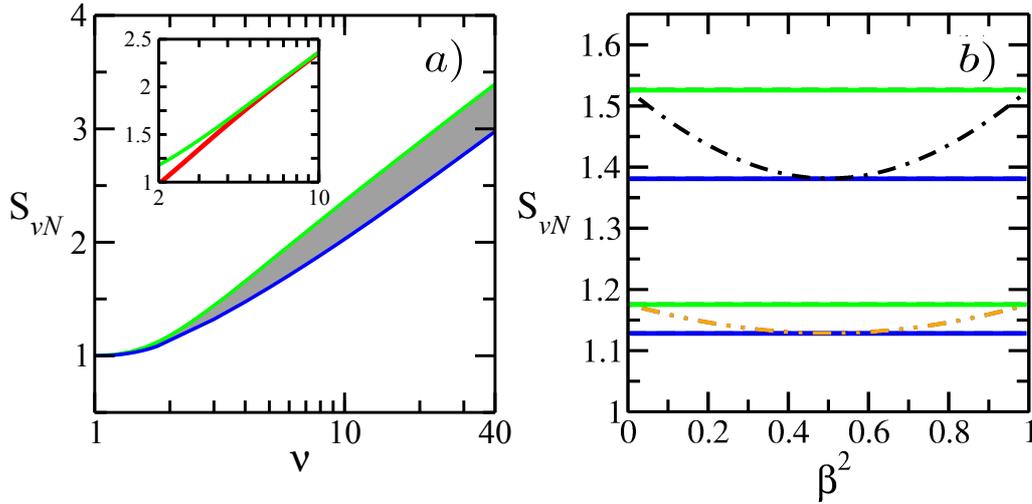


FIGURA 5.6: *a)* Entropía de von Neumann como función de la magnitud de interacción ν para las funciones de onda fermiónicas invariantes ante rotaciones ψ_S^+ (línea verde) y para la función de onda fermiónica construida con $\psi_S^x = (x_1 - x_2)$ (línea azul). Notar la divergencia logarítmica en el límite de interacción fuerte. Un punto en el área gris es un par (ν, S_{vN}) que puede ser obtenido con una elección particular de la combinación lineal de la Ec. (5.28) y que queda definido por el parámetro β . Las curvas graficadas en el gráfico interior muestran que las entropías de von Neumann para la función de onda de fermiones invariante (línea verde) y la función de onda de bosones (línea roja) tienen el mismo límite asintótico. *b)* Entropía de von Neumann para el estado fundamental fermiónico construido con $\psi_{ic}(\beta)$ en función del parámetro β^2 para dos valores del parámetro de interacción $\nu = 2$ (línea anaranjada cortada) y $\nu = (1 + \sqrt{33})/2$ (línea negra cortada). Las líneas horizontales corresponden a las entropías de von Neumann de ψ_S^+ , ψ_S^x . Notar que al cambiar el parámetro β se van recorriendo puntos (ν, S_{vN}) en la región sombreada del gráfico *a)*.

las funciones de onda de fermiones Ψ_0^{f+} , Ψ_0^{f-} , Ψ_0^{fx} y Ψ_0^{fy} . A partir de esto se puede mostrar que

$$\begin{aligned} \left| \Psi_0^b [\nu(\nu - 1) + 1] \right|^2 &= \left| \Psi_0^{f\pm} [\nu(\nu - 1)] \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left| \Psi_0^{fx} [\nu(\nu - 1)] \right|^2 + \frac{1}{2} \left| \Psi_0^{fy} [\nu(\nu - 1)] \right|^2, \end{aligned} \quad (5.27)$$

donde el argumento entre corchetes es la magnitud de interacción de la Ec. (5.9), para la cuál la función de onda del estado fundamental debe ser calculada [111].

En esta igualdad, los dos primeros términos aseguran que para valores de ν suficientemente grandes, las entropías de von Neumann de fermiones y de bosones son asintóticamente iguales si los estados correspondientes son autofunciones del operador L_z . Hasta ahora, no encontramos una forma de trasladar esta relación entre el módulo cuadrado de la función de onda en Ec. (5.27) a una relación entre los números de ocupación de sus respectivas matrices densidad reducida.

Esta característica de que el estado fundamental de fermiones tenga funciones de onda degeneradas, permite analizar la entropía de von Neumann para distintas

combinaciones lineales de estados ortogonales. En particular, estudiamos la entropía de von Neumann para distintas funciones de onda del estado fundamental obtenidas de reemplazar ψ_S en la Ec. (5.15), por la expresión

$$\psi_{lc}(\beta) = \beta \psi_S^+ + \sqrt{1 - \beta^2} \psi_S^-, \quad \beta \in [0, 1]. \quad (5.28)$$

Las entropías de von Neumann definidas para los estados $\psi_{lc}(\beta)$, ψ_S^x y Ψ_0^b , se muestran en la figura 5.6. A partir de la figura 5.6a) hay algunas características interesantes que vale la pena mencionar. La entropía de von Neumann para cada uno de las funciones de onda diverge logarítmicamente en el límite de interacción fuerte. Para un dado valor de ν , las entropías de $\psi_S^\pm(\beta = 0)$ y $\psi_S^\pm(\beta = 1)$ son máximas mientras que $\psi_S^{x,y}(\beta = \pm \frac{1}{\sqrt{2}})$ son mínimas. El área sombreada en la figura 5.6a) corresponde a los valores de la entropía de von Neumann obtenidos para todos los posibles valores de β . También, en el límite de interacción fuerte, la entropía de von Neumann asociada a la función de onda del estado fundamental de fermiones con $\psi_S = \psi_S^\pm$ y de bosones son asintóticamente iguales. En la figura 5.6b) mostramos el comportamiento de la entropía de von Neumann calculada para la función de onda del estado fundamental definida a partir de la Ec. (5.28) como función de β^2 , para $\nu = 2$ y para $\mu_f = 2 \Rightarrow \nu = (1 + \sqrt{33})/2$, en el primer caso los resultados son numéricos mientras que en el segundo caso son exactos.

Para el caso de la entropía lineal la situación es diferente, esta cantidad tiene un comportamiento monótono y converge a la unidad en el límite de interacción fuerte. Este comportamiento ha sido obtenido previamente para distintos sistemas y generalmente es asociado a la naturaleza competitiva de los potenciales que forma el Hamiltoniano [99, 124]. Para el caso estudiado en este capítulo, en las Ecs. (5.9) y (5.10) el término armónico tiende a acercar las partículas, mientras que la interacción repulsiva entre las partículas tiende a separarlas y mantenerlas lo más lejos posible, especialmente cuando $\nu \rightarrow \infty$.

En general, cuando los resultados son obtenidos mediante método numéricos, es difícil de detectar las divergencias logarítmicas. La razón principal de esto es la dificultad involucrada para estudiar el sistema cuando ν toma valores muy grandes, ya que en esta situación es necesario un gran número de funciones, que expandan el espacio de Hilbert en cuestión (el número de funciones crece como ν^2), para poder manifestar la divergencia logarítmica. Aún así, pudimos obtener resultados hasta valores de $\nu = 80$. A continuación realizamos un tratamiento analítico del modelo de Calogero en dimensión dos basados en un confinamiento anisotrópico, de esta forma pudimos corroborar los resultados numéricos mostrados en esta sección.

5.7. Tratamiento analítico del modelo de Calogero bidimensional anisotrópico en el límite de interacción fuerte

Basados en el argumento mencionado en la sección anterior, respecto al carácter competitivo de los potenciales involucrados en el Hamiltoniano, pudimos desarrollar un método que nos permitió obtener, en forma analítica, resultados aproximados para los autovalores y autofunciones del Hamiltoniano. El método está basado en el cálculo de los mínimos del potencial y la aproximación armónica alrededor de dichos mínimos [117, 124]. Hay que tener en cuenta que para el caso de dimensión dos o tres, los mínimos del potencial no necesariamente son puntos aislados si no que pueden ser una región donde se produce el mínimo del potencial, pero en esta

situación es posible recuperar los mínimos aislados del potencial a partir de una deformación del potencial. Esta deformación rompe la simetría entre las coordenadas, por ejemplo, en el Hamiltoniano de dos dimensiones del modelo de Calogero, podemos tomar $y_i \rightarrow \varepsilon y_i$. En este contexto es posible estudiar el confinamiento isotrópico como un caso límite del Hamiltoniano anisotrópico, es decir, tomando $\varepsilon \rightarrow 1$. Entonces, consideramos el Hamiltoniano de Calogero bidimensional con confinamiento anisotrópico

$$H = -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2} [(x_1^2 + x_2^2) + \varepsilon^2 (y_1^2 + y_2^2)] + \frac{\nu(\nu-1)}{r_{12}^2}. \quad (5.29)$$

Introduciendo las coordenadas del centro de masa $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) = (X, Y)$ y las coordenadas relativas $\mathbf{r} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 = (x, y)$, el Hamiltoniano (5.29) puede ser escrito como $H = H^R + H^r$, donde

$$H^R = -\frac{1}{4} \nabla_R^2 + (X^2 + \varepsilon^2 Y^2), \quad (5.30)$$

$$H^r = -\nabla_r^2 + \frac{1}{4} (x^2 + \varepsilon^2 y^2) + \frac{\nu(\nu-1)}{(x^2 + y^2)}. \quad (5.31)$$

La función de onda del sistema es entonces un producto de dos funciones, una función de onda correspondiente al centro de masa y otra correspondiente a las coordenadas relativas, $\Psi(X, Y, x, y) = \psi^R(X, Y) \psi^r(x, y)$, y la ecuación de Schrödinger se separa en dos ecuaciones:

$$H^R \psi^R(\mathbf{R}) = E^R \psi^R(\mathbf{R}), \quad (5.32)$$

$$H^r \psi^r(\mathbf{r}) = E^r \psi^r(\mathbf{r}). \quad (5.33)$$

La solución a la ecuación del centro de masa tiene la siguiente forma:

$$\psi_{n,m}^R(\mathbf{R}) = e^{-X^2} H_n(\sqrt{2}X) e^{-\varepsilon Y^2} H_m(\sqrt{2\varepsilon}Y), \quad (5.34)$$

con energías

$$E_{n,m}^R = \left(n + \frac{1}{2}\right) + \varepsilon \left(m + \frac{1}{2}\right) \quad (5.35)$$

Con la idea de resolver la ecuación de Schrödinger para la coordenadas relativas en el límite de interacción fuerte, usamos la aproximación armónica [125, 126]. Los mínimos clásicos del potencial están dados por $\mathbf{r}_{min} = (\pm\sqrt{2}[\nu(\nu-1)]^{1/4}, 0)$. En esta aproximación el Hamiltoniano es

$$H_{HA}^r = -\nabla_r^2 + \frac{1}{2} \left[2(x - x_0)^2 + \frac{1}{2} (\varepsilon^2 - 1) y^2 \right], \quad (5.36)$$

donde $x_0 = \sqrt{2}[\nu(\nu-1)]^{1/4}$.

Las soluciones de la Ec. (5.36) son

$$\psi_{n,m}^r(\mathbf{r}) = e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2}} H_n(x-x_0) e^{-\frac{\sqrt{\varepsilon^2-1}}{4} y^2} H_m\left(\left(\frac{\varepsilon^2-1}{4}\right)^{1/4} y\right), \quad (5.37)$$

con autovalores

$$E_{n,m}^r = 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \left(m + \frac{1}{2} \right). \quad (5.38)$$

De las ecuaciones (5.34) y (5.37), la función de onda normalizada totalmente simétrica es,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C e^{-\varepsilon \frac{(y_1+y_2)^2}{4}} e^{-\sqrt{\varepsilon^2-1} \frac{(y_2-y_1)^2}{4}} e^{-\frac{(\tilde{x}_1+\tilde{x}_2)^2}{4}} \left[e^{-\frac{(\tilde{x}_2-\tilde{x}_1)^2}{2}} + e^{-\frac{(\tilde{x}_1-\tilde{x}_2)^2}{2}} \right], \quad (5.39)$$

donde $\tilde{x}_1 = x_1 + \frac{x_0}{2}$ y $\tilde{x}_2 = x_2 - \frac{x_0}{2}$, y la constantes de normalización es

$$C = \left(\frac{\sqrt{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - 1}}}{\sqrt{2} \pi^2 (1 + e^{-2\sqrt{\nu(\nu-1)}})} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.40)$$

La función de onda (5.39) es separable en las coordenadas x e y , y puede se escrita como $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C \psi_x(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) \psi_y(y_1, y_2)$.

Ya que estamos interesados en los números de ocupación, debemos resolver la ecuación integral Ec. (5.5). Para resolver dicha ecuación, hacemos uso del teorema que dice que el kernel iterado de un kernel simétrico tiene las mismas autofunciones que el kernel inicial, y los autovalores del kernel iterado son los autovalores del kernel inicial elevados al cuadrado [127]. ésto significa que en lugar de resolver la ecuación usando la matriz densidad reducida, podemos resolver la ecuación

$$\int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_k(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 = \lambda_k \phi_k(\mathbf{r}_1). \quad (5.41)$$

La solución a este problema de autovalores es equivalente a encontrar la descomposición de Schmidt de las funciones $\psi_x(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ y $\psi_y(y_1, y_2)$ dados por

$$\psi_x(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = q(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) + q(\tilde{x}_2, \tilde{x}_1), \quad (5.42)$$

donde

$$q(x_1, x_2) = e^{-\frac{3}{4}(x_1^2+x_2^2)+\frac{1}{2}x_1x_2}, \quad (5.43)$$

y

$$\psi_y(y_1, y_2) = e^{-\frac{\varepsilon+\sqrt{\varepsilon^2-1}}{4}(y_1^2+y_2^2)-\frac{\varepsilon-\sqrt{\varepsilon^2-1}}{2}y_1y_2}. \quad (5.44)$$

Usando la fórmula de Mehler

$$e^{-(u^2+v^2)\frac{y^2}{1-y^2}+uv\frac{2y}{1-y^2}} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{1-y^2} \left(\frac{y}{2} \right) \frac{H_k(u)H_k(v)}{k!}, \quad (5.45)$$

es posible encontrar la descomposición de las ecuaciones (5.43) y (5.44),

$$\psi(u, v) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k \phi_k(y) \phi_k(v). \quad (5.46)$$

Después de realizar los cálculos correspondientes, se obtiene que los autovalores de la matriz densidad reducida en el límite de interacción fuerte son

$$\lambda_{l,\bar{l}} = 2 \left(3\sqrt{2} - 4 \right) (1 - \xi(\varepsilon)) \xi(\varepsilon)^l \left(17 - 12\sqrt{2} \right)^{\bar{l}}, \quad (5.47)$$

donde $\xi(\varepsilon)$ está dada por

$$\xi(\varepsilon) = \left(\frac{(\varepsilon^2 - 1)^{\frac{1}{4}} - \sqrt{\varepsilon}}{(\varepsilon^2 - 1)^{\frac{1}{4}} + \sqrt{\varepsilon}} \right)^2. \quad (5.48)$$

Una vez obtenidos los autovalores, la entropía lineal es fácil de calcular

$$S_L = 1 - \left(\frac{3\sqrt{2} - 4}{9 - 6\sqrt{2}} \right) \frac{1 - \xi(\varepsilon)}{1 + \xi(\varepsilon)} = 1 - \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\frac{1 - \xi(\varepsilon)}{1 + \xi(\varepsilon)} \right). \quad (5.49)$$

Ya que la función de onda es separable en las coordenadas, la entropía de von Neumann puede ser escrita de la siguiente forma

$$S_{vN} = S^x + S^y(\varepsilon), \quad (5.50)$$

donde cada uno de los términos tiene la forma de la entropía de von Neumann unidimensional [117], es decir,

$$S^x = 1.197371889, \quad (5.51)$$

$$S^y(\varepsilon) = - \frac{\log_2([1 - \xi(\varepsilon)]^{2[1 - \xi(\varepsilon)]} \xi(\varepsilon)^{2\xi(\varepsilon)})}{[1 - \xi(\varepsilon)]}, \quad (5.52)$$

de esta forma la entropía de von Neumann del sistema bidimensional es

$$S_{vN} = 1.197371889 - \frac{\log_2 \left([1 - \xi(\varepsilon)]^{(1 - \xi(\varepsilon))} \xi(\varepsilon)^{\xi(\varepsilon)} \right)}{[1 - \xi(\varepsilon)]}. \quad (5.53)$$

Las entropías de Rényi en el límite de interacción fuerte pueden ser escritas como

$$S^\alpha = S_x^\alpha + S_y^\alpha, \quad (5.54)$$

donde

$$S_x^\alpha = \frac{1}{1 - \alpha} \log_2 \left(\frac{(6\sqrt{2} - 8)^\alpha}{[1 - (17 - 12\sqrt{2})^\alpha]} \right) + 1, \quad (5.55)$$

y

$$S_y^\alpha = \frac{1}{1 - \alpha} \log_2 \left(\frac{[1 - \xi(\varepsilon)]^\alpha}{[1 - \xi(\varepsilon)^\alpha]} \right). \quad (5.56)$$

El modelo isotrópico se recupera tomando el límite $\varepsilon \rightarrow 1^+$. En este límite se tiene que $\xi(\varepsilon) \rightarrow 1$, todos los autovalores tienden a cero y la entropía de von Neumann diverge logarítmicamente mientras que la entropía lineal tiende a la unidad. Para cualquier otro valor del parámetro de anisotropía, ε , la entropía de von Neumann es finita y la entropía lineal es menor a uno. El problema unidimensional se recupera para el caso en el cual el parámetro de anisotropía es mucho mayor a uno, $\varepsilon \gg 1$, en este límite $\xi(\varepsilon) \rightarrow 0$, como consecuencia $S_L \rightarrow 1 - \frac{\sqrt{2}}{3}$ y $S_{vN} \rightarrow S^x$.

La entropía de Rényi, como función del parámetro de anisotropía, muestra el mismo comportamiento que la entropía de von Neumann, ésta diverge logarítmicamente para $\varepsilon \rightarrow 1^+$ y para $\varepsilon \gg 1$ alcanza el valor unidimensional S_x^α . A partir de la Ec. (5.55), se puede demostrar que la min-entropy unidimensional, S_x^∞ tiene la siguiente forma

$$S_x^\infty = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} S_x^\alpha = \log_2 \left(1 + \frac{3}{2\sqrt{2}} \right). \quad (5.57)$$

5.8. Crossover de dimensión dos a uno

Según los resultados obtenidos en la sección anterior, la entropía de von Neumann y entropía lineal unidimensional se obtienen o recuperan de las correspondiente entropías bidimensionales en el límite de interacción fuerte cuando el parámetro de anisotropía es mucho mayor a uno. Esto genera la pregunta de cómo el *crossover* dimensional (crossover de dimensión dos a dimensión uno) se manifiesta en las entropías y si esto también se puede observar para valores finitos del parámetro de interacción ν .

La entropía de von Neumann exacta para el modelo bidimensional anisotrópico en la aproximación armónica, Ec. (5.50), se muestra como la curva magenta en la figura 5.7. Aunque no hay un criterio claro para detectar el cambio del comportamiento en dimensión dos al comportamiento en dimensión uno, se puede observar que el límite unidimensional se alcanza para $\varepsilon \gtrsim 1.5$. Más aún, la entropía de von Neumann es finita para cualquier valor de $\varepsilon > 1$ como sucede en el caso unidimensional.

A partir del cálculo de la primera derivada de la Ec. (5.53), se puede demostrar que

$$S_{vN} \sim -\frac{\log(\varepsilon - 1)}{\log 16} \quad \text{si } \varepsilon \sim 1^+, \quad (5.58)$$

este comportamiento está mostrado en la figura 5.7 como la línea entrecortada amarilla, la cual marca la divergencia logarítmica de la entropía de von Neumann para $\varepsilon \rightarrow 1^+$.

Las entropías obtenidas a partir de sumar un número finito de autovalores exactos también están mostrados en la figura 5.7. En el gráfico se ve que no importa cuantos autovalores se usan para calcular la entropía de von Neumann, siempre existe un valor de ε para el cual el valor de la entropía alcanza un máximo y decae para valores menores de ε . En otras palabras, cuanto más isotrópico es el sistema, mayor es la cantidad de autovalores de la matriz densidad reducida necesarios para describir la entropía de von Neumann del sistema correctamente. Esto es precisamente la razón por la cual es difícil de identificar, ya que, en general, los métodos numéricos solo permiten determinar un número finito de autovalores.

A continuación comparamos los resultados obtenidos utilizando la aproximación armónica junto con el límite de interacción fuerte con los obtenidos para interacciones finitas. En la sección 5.6 obtuvimos que la entropía de von Neumann crece logarítmicamente, la divergencia para $\varepsilon \rightarrow 1^+$ en el límite de interacción fuerte prueba que la entropía de von Neumann del modelo de Calogero bidimensional isotrópico es infinita.

Estudiando la energía del estado fundamental del Hamiltoniano anisotrópico es posible corroborar la convergencia, para valores finitos de ν , de la entropía de von

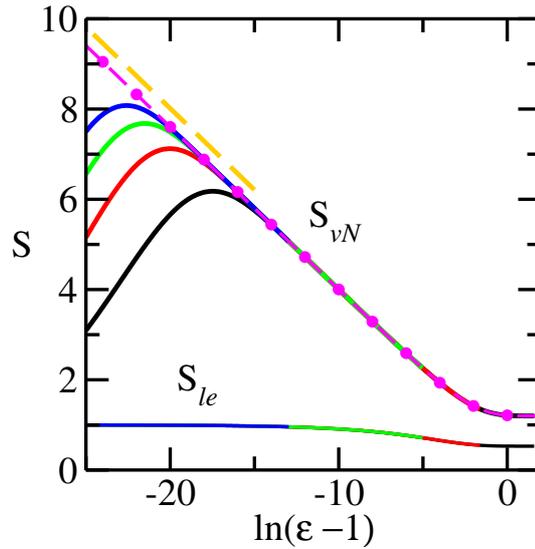


FIGURA 5.7: Entropía de von Neumann y entropía lineal como funciones del parámetro de anisotropía ε en el límite de interacción fuerte calculadas con la expresión exacta (línea magenta de puntos y rayas) y truncando la suma de la definición dada por la Ec. (5.6) de la sección 5.2 del capítulo anterior (líneas continuas). El número de ocupaciones incluidas en la suma es de 50, 100, 150 y 200 (líneas continuas negra, roja, verde y azul respectivamente). El término asintótico de la entropía de von Neumann exacta se muestra como una línea cortada amarilla.

Neumann en el caso de confinamiento isotrópico dentro de la aproximación armónica. Los autovalores del Hamiltoniano relativo, Ec. (5.36), tiene una dependencia no analítica del parámetro de anisotropía en el límite de interacción fuerte. Por lo tanto, comparamos la energía del estado fundamental en la aproximación armónica ($E_{00}^r(\varepsilon)$) con la energía del estado fundamental obtenida utilizando el método variacional en el Hamiltoniano para un valor finito de ν ($E_{00}^{var}(\nu, \varepsilon)$), ésto lo realizamos para distintos valores del parámetro ε . De esta forma definimos

$$E_{00}^{\infty}(\nu, \varepsilon) = \frac{E_{00}^{var}(\nu, \varepsilon)}{E_{00}^r(\varepsilon) - 1}. \quad (5.59)$$

E_{00}^{∞} nos da una idea de cuan diferentes son las energías variacionales a las correspondiente en el límite de interacción fuerte. Cuando las energías variacionales se comporten de la misma manera que las obtenidas en el marco de la aproximación armónica esta cantidad será igual a la unidad.

En la figura 5.8 mostramos la cantidad definida en la Ec. (5.59) como función de $\sqrt{\varepsilon^2 - 1}$ para distintos valores de ν . Se puede observar que para valores de ε lo suficientemente grande, el sistema alcanza el límite unidimensional no importa que tan chico sea el valor del parámetro de interacción ν . Este resultado implica que el sistema anisotrópico tiene carácter bidimensional o unidimensional dependiendo de la relación entre los parámetros ν y ε .

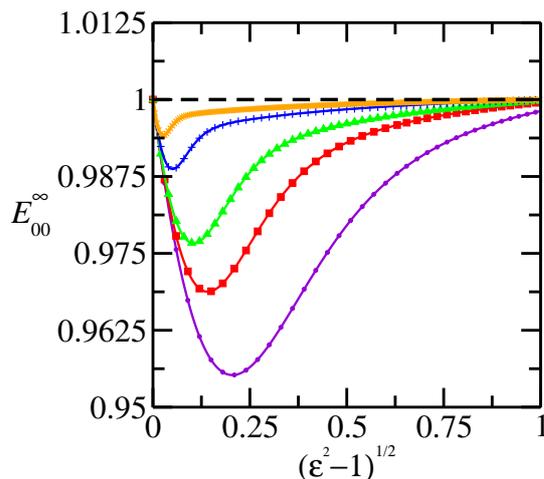


FIGURA 5.8: Relación entre la energía del estado fundamental del Hamiltoniano relativo obtenida variacionalmente y en el límite de interacción fuerte definida en la Ec. (5.59). Por como se eligió el eje de las abscisas el límite de interacción fuerte corresponde a la unidad indicada como una línea negra cortada. Las energías variacionales fueron calculadas con $\nu(\nu - 1) = 20, 50, 100, 500, 2000$ y se ven en las curvas de colores desde abajo hacia arriba.

5.9. Resumen y conclusiones

En este capítulo estudiamos las entropías de von Neumann y de Rényi para el modelo de Calogero de dos partículas en dimensión uno y dimensión dos. Encontramos que la entropía de von Neumann del modelo bidimensional con confinamiento isotrópico es una función monótonamente creciente del parámetro de interacción ν , y tiene una divergencia logarítmica para $\nu \rightarrow \infty$, mientras que en el caso de confinamiento anisotrópico, al igual que en el modelo unidimensional, la entropía de von Neumann permanece finita. Además mostramos que el comportamiento unidimensional se recupera cuando se aumenta la anisotropía del confinamiento en el modelo bidimensional. Usando la aproximación armónica, demostramos el *crossover* de dimensión dos a dimensión uno, y mostramos que la divergencia de la entropía de von Neumann solo sucede para el caso de confinamiento isotrópico.

Respecto a las entropías de Rényi, mostramos que éstas son una herramienta muy útil para encontrar los valores del parámetro de interacción para los cuales la matriz densidad reducida tiene soporte finito, es decir, tiene un número finito de autovalores no nulos. Amico y colaboradores, encontraron un comportamiento no analítico, similar al mostrado en este capítulo, en cadenas de espín 1/2 en valores críticos del parámetro de interacción del Hamiltoniano. Mostramos que en sistemas de variables continuas, las entropías de Rényi para valores pequeños de α tienen un comportamiento no analítico en un entorno de los valores del parámetro de interacción donde la matriz densidad reducida tiene soporte finito. La deducción presentada en este capítulo es un resultado general en el cual la única condición necesaria es la analiticidad de los autovalores de la matriz densidad reducida. La única característica particular al modelo de Calogero es que, para dicho modelo, conocemos *a priori* los valores de ν para los cuales existe un número finito de autovalores no nulos.

Las propiedades mencionadas previamente, respecto a la entropías de entrelazamiento, se aplican a los tipos de partículas estudiadas, es decir, se aplica tanto al caso

de bosones como de fermiones. Sin embargo, cuando un tipo de simetría es elegido, hay varios aspectos a tener en cuenta. Nosotros usamos bosones y fermiones en el sentido de que las funciones de onda correspondientes son simétricas o antisimétricas respecto al intercambio de coordenadas, pero en un sistema bidimensional el grupo de permutaciones permite la existencia de otro tipo de partículas como es el caso de los anyones.

Los autovalores de la matriz densidad reducida del problema unidimensional, tanto para bosones como para fermiones, muestran dos regímenes bien definidos. En uno, un dado autovalor se anula para algunos valores de ν , mientras que en el otro se vuelve prácticamente independiente de dicho parámetro. Además, en el segundo régimen, los número de ocupación de bosones y de fermiones tienen el mismo valor asintótico para valores de ν lo suficientemente grande. Ambos regímenes ya han sido observados por Schilling en su análisis del harmonium unidimensional [92].

En el modelo bidimensional, los números de ocupación de bosones y de fermiones muestran el mismo comportamiento descrito en los párrafos anteriores. Sin embargo, en este caso se presenta una diferencia fundamental en comparación al modelo unidimensional, ya que para fermiones, la función de onda del estado fundamental está degenerada. Por lo tanto, cualquier función de onda del estado fundamental de dos fermiones, tiene un valor particular de la entropía de von Neumann. Nuestros resultados muestran que la entropía de von Neumann de dos fermiones que tiene el mismo valor que para dos bosones corresponde a una función de onda del estado fundamental que es autoestado del operador L_z (componente z del momento angular). Más aún, estas funciones de onda son las que poseen un máximo valor de la entropía de von Neumann.

El análisis de la figura 5.6, nos permite pensar en un resultado general respecto a la entropía de von Neumann de estados degenerados. Suponemos que estados que presentan más simetrías, como aquellos estados fermiónicos construidos a partir de ψ_S^\pm con respecto a aquellos construidos a partir de $\psi_S^{x,y}$, siempre tendrán una entropía de von Neumann mayor respecto a los estados con menos simetrías, sin importar el número de partículas y características particulares del Hamiltoniano. Formulando de una manera más precisa, si \mathcal{O} es un observable que conmuta con el Hamiltoniano $[H, \mathcal{O}] = 0$ y $\psi_{k,l}$ con $l = 1, \dots, L$ son autofunciones degeneradas del Hamiltoniano

$$H\psi_{k,l} = E_k\psi_{k,l}, \quad (5.60)$$

y autofunciones de

$$\mathcal{O}\psi_{k,l} = \theta_l\psi_{k,l}, \quad (5.61)$$

entonces $S_{vN}[\psi_{k,1}] = \dots = S_{vN}[\psi_{k,L}]$ y además es un máximo sobre $S_{vN}[\psi]$ con $\psi \in \mathcal{B} = \text{span}\{\psi_{k,l}\}$. Más aún, los estados para los cuales se obtienen mínimos de la entropía corresponden al conjunto con combinaciones de igual peso

$$\psi_{min} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=1}^L e^{i\varphi_l} \psi_{k,l}. \quad (5.62)$$

Las proposiciones planteadas son válidas para todos los sistemas que analizamos en este capítulo utilizando métodos numéricos y nos impulsa a continuar trabajando en una prueba formal de las mismas.

Capítulo 6

Entropías de entrelazamiento en moléculas de Wigner bidimensionales de dos partículas

Este capítulo está dedicado al estudio de los números de ocupación y entropías de entrelazamiento para el estado fundamental de sistemas de dos partículas interactuantes confinadas en una trampa armónica bidimensional. Implementamos un método para estudiar el límite de interacción fuerte para potencial de interacción de largo y corto alcance, de esta forma podemos calcular los autovalores de la matriz densidad reducida y las entropías cuánticas. Mostramos que para potenciales de corto alcance, la entropía de von Neumann, min-entropy y las entropías de Rényi son finitas en el modelo con confinamiento isotrópico y divergen para confinamiento anisotrópico. En el caso de potenciales de corto alcance, las entropías de entrelazamiento divergen para todo valor del parámetro de anisotropía debido a la pérdida de información en la localización o en el momento de las partículas. Por último, mostramos que cuando la matriz densidad reducida tiene un número finito de autovalores no nulos, las entropías de Rényi muestran un comportamiento no analítico.

6.1. Introducción

Los sistemas de partículas confinadas es un área de la física que atrae el interés de investigadores tanto de la física teórica como la física experimental [128, 129]. Una característica de tales sistemas cuánticos que recientemente se volvió objeto de estudio, es el estudio de medidas de entrelazamiento como lo son las entropías cuánticas [88, 111, 117]. Entre todos los sistemas que pueden agruparse dentro del conjunto de sistemas de partículas confinadas, en este capítulo nos centramos en las moléculas de Wigner, la cuales son el análogo finito de los conocidos como cristales de Wigner [128]. Desde finales de la década del ochenta, cuando Wineland mostró resultados en cadenas de iones confinados [129], hubo un incremento en la capacidad para confinar, manipular y controlar tales sistemas, lo que generó que sistemas tales como las moléculas de Wigner, sean excelente sistemas de investigación en los cuales buscar por nueva física o testear fenómenos ya conocidos [130].

Iones atrapados no son los únicos sistemas que permiten la creación de entidades como las moléculas de Wigner (también llamados cristales de Coulomb). Los resultados experimentales en estados fuertemente correlacionados en puntos cuánticos atrajo particular interés [131]. Las moléculas de Wigner también han sido observadas en heteroestructuras semiconductoras bidimensionales [132, 133], puntos cuánticos semiconductores [134], hilos cuánticos [135, 136, 137, 138], nanotubos de carbono [139] y en estados cristalinos de plasma complejos [140]. Varios estudios

teóricos [141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148] han demostrado que la física de estos sistemas con dimensionalidad reducida usualmente no depende de la forma del confinamiento, pero si depende de la simetría e intensidad de confinamiento. En el este capítulo, nos concentramos en un modelo con confinamiento armónico y representamos distintos sistemas usando distintos potenciales de interacción. Las moléculas de Wigner se manifiestan cuando la magnitud de la interacción entre las partículas es mucho más grande que que la energía cinética. Esto es posible ya que la localización de Wigner se produce para sistemas con baja densidad o para sistemas cuya intensidad de interacción es grande.

Los modelos de Calogero y de Moshinsky son dos ejemplos de sistemas de partículas confinadas exactamente solubles, incluyendo, bajo ciertas condiciones, el cálculo de entropías de entrelazamiento [88, 111, 99, 149, 89, 124, 90, 117], en este sentido también se puede mencionar el *spherium model* [150] y el modelo de Hook [151]. En particular, el modelo de Calogero ha sido ampliamente estudiado por su relación con distintos problemas en física. Como mostramos en el capítulo 5, estudiamos el comportamiento de la entropía de von Neumann y las entropías de Rényi para el modelo de dos partículas en una y dos dimensiones. Utilizando un confinamiento anisotrópico, en el modelo bidimensional, mostramos que el comportamiento unidimensional se obtiene cuando aumenta la anisotropía de la trampa. Además mostramos, en forma analítica, que las entropías de Rényi presentan un comportamiento no analítico en un entorno de los valores del parámetro de interacción en los cuales la matriz densidad reducida tiene soporte finito, es decir, tiene un número finito de autovalores no nulos.

Motivados por estos resultados, en este capítulo, consideramos un sistema de dos partículas con confinamiento bidimensional anisotrópico y calculamos los números de ocupación de la matriz densidad reducida del estado fundamental en el límite de interacción fuerte de manera analítica. Este proceso lo realizamos para distintos tipos de potencial de interacción entre las partículas. Los orbitales naturales son obtenidos a partir de la descomposición de Schmidt de la matriz densidad reducida del estado fundamental en el mismo límite y los correspondientes números de ocupación son usados para evaluar distintas medidas de entrelazamiento tales como la entropía de von Neumann y las entropías de Rényi. Los métodos presentados en este capítulo son una generalización del método desarrollado en las referencias [117, 124, 152, 153], en partículas, nos concentramos en determinar en forma analítica expresiones para los orbitales naturales, los números de ocupación, las entropías de von Neumann y de Rényi en el límite de interacción fuerte para cualquier potencial de interacción que dependa de la distancia de entre las partículas.

Nuestro objetivo principal es determinar la influencia de la anisotropía y del tipo de interacción entre las partículas analizando las entropías lineal, von Neumann, min-entropy, max-entropy y Rényi. Nos concentramos en determinar cuáles son las diferencias entre los potenciales de interacción de corto y de largo alcance que dan lugar a la molécula de Wigner. Con esta idea, estudiamos dos casos de potencial de interacción para cada clase, incluyendo uno que puede ser resuelto exactamente. Dentro de la clase de potencial de largo alcance, consideramos los potenciales de potencia inversa e inversa del logaritmo, mientras que en la clase de potenciales de corto alcance, analizamos el potencial de tipo potencia inversa apantallado y el potencial tipo Gaussiano repulsivo. Es importante resaltar que el potencial de potencia inversa es usado para modelar puntos cuánticos [134] o trampas de iones [129], donde el régimen de interacción fuerte puede ser alcanzado experimentalmente debido a la fuerte interacción entre las partículas o a la débil intensidad del potencial de confinamiento. La metodología empleada es similar a la utilizada en el capítulo 5 para

estudiar el modelo de Calogero bidimensional, en este capítulo vamos a generalizar algunos de los resultados para el caso de un potencial de interacción arbitrario para luego particularizar en los potenciales de corto y largo alcance.

Este capítulo está organizado de la siguiente manera, en la sección 6.2 hacemos una descripción del modelo de dos partículas confinadas en un potencial bidimensional, a continuación en la sección 6.3 realizamos los cálculos correspondientes para obtener los números de ocupación de la matriz densidad reducida utilizando la aproximación armónica. La sección 6.4 está dedicada al cálculo y análisis de las entropías de entrelazamiento, en las secciones 6.5 y 6.6 aplicamos los resultados para potenciales de largo y corto alcance respectivamente. Por último presentamos una discusión y conclusión de los resultados en la sección 6.7.

6.2. Sistemas bidimensionales de dos partículas confinadas

Hoy en día, la física de partículas confinadas es un área importante para entender varios experimentos recientes realizados en átomos fríos atrapados o en puntos cuánticos, al menos desde un punto de vista cualitativo [132, 133, 134, 135, 136, 137, 138]. Los potenciales utilizados en estos modelos están constituidos por dos términos: el potencial de la trampa o potencial de confinamiento y el potencial que describe la interacción entre las partículas. Para puntos cuánticos pequeños que contiene varios electrones, el potencial de confinamiento puede ser aproximado por un potencial armónico [131], por lo tanto nos focalizamos en sistemas de dos partículas interactuantes en una trampa armónica bidimensional e implementamos un método para calcular el espectro de la matriz densidad reducida en el límite de interacción fuerte para un potencial de interacción arbitrario. El Hamiltoniano para dos partículas en una trampa anisotrópica bidimensional, en unidades atómica, es

$$H = -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2} [(x_1^2 + x_2^2) + \varepsilon^2(y_1^2 + y_2^2)] + gV(r_{12}; \{\gamma_i\}) , \quad (6.1)$$

donde tomamos que la frecuencia de la trampa sea igual a uno, $\varepsilon > 1$ es el parámetro de anisotropía, $V(r_{12}; \{\gamma_i\})$ denota el potencial de interacción como función de la distancia entre partículas r_{12} y algún conjunto de parámetros $\{\gamma_i\}$ y g es el cociente entre la interacción y la energía de confinamiento (energía del modo fundamental de la trampa). Notar que las unidades de g varían según la forma funcional de $V(r_{12}; \{\gamma_i\})$ de manera tal que el término $gV(r_{12}; \{\gamma_i\})$ tenga unidades de energía.

De la misma forma al procedimiento realizado en el tratamiento analítico del modelo de Calogero bidimensional del capítulo 5, introducimos las coordenadas del centro de masa $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = (X, Y)$ y las coordenadas relativas $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = (x, y)$, de esta forma el Hamiltoniano de la Ec. (6.1) puede reescribirse como $H = H^R + H^r$, donde

$$H^R = -\frac{1}{4}\nabla_R^2 + (X^2 + \varepsilon^2 Y^2) , \quad (6.2)$$

$$H^r = -\nabla_r^2 + V^{ef}(x, y; \varepsilon, \{\gamma_i\}) , \quad (6.3)$$

y V^{ef} es el potencial efectivo del Hamiltoniano relativo dado por

$$V^{ef}(x, y; \varepsilon, \{\gamma_i\}) = \frac{1}{4} (x^2 + \varepsilon^2 y^2) + gV(\sqrt{x^2 + y^2}; \{\gamma_i\}) . \quad (6.4)$$

A partir de estas ecuaciones, la función de onda del sistema es el producto de una función de onda del centro de masa y una función de onda que depende de las coordenadas relativas

$$\Psi(x, y, X, Y) = \psi^R(X, Y)\psi^r(x, y), \quad (6.5)$$

por lo tanto, la ecuación de Schrödinger se separa en dos ecuaciones

$$H^R\psi^R(\mathbf{R}) = E^R\psi^R(\mathbf{R}), \quad (6.6)$$

$$H^r\psi^r(\mathbf{r}) = E^r\psi^r(\mathbf{r}). \quad (6.7)$$

La ecuación del centro de masa, Ec. (6.6), es la ecuación del oscilador armónico cuántico y las autofunciones están dadas por la Ec. (5.34) del capítulo 5. Notar que la ecuación del centro de masa solo involucra al potencial de confinamiento y el potencial de interacción no afecta a esta ecuación, por lo tanto toda la información correspondiente a la forma en la cual interactúan las partículas está contenida en el Hamiltoniano relativo Ec. (6.3). Por este motivo el Hamiltoniano relativo tiene que ser analizado para cada caso particular. Sin embargo, en la sección que sigue mostramos cómo tomar el límite de interacción fuerte para un potencial de interacción genérico.

6.3. Derivación de las ocupaciones exactas

La función de onda del estado fundamental del Hamiltoniano relativo puede ser obtenida resolviendo la ecuación de Schrödinger en el límite de interacción fuerte, $g \gg 1$, usando la aproximación armónica [125, 126], de manera análoga a lo mostrado en el capítulo 5 para el modelo de Calogero bidimensional. El procedimiento es el siguiente: primero hay que determinar los mínimos del potencial efectivo, que corresponden los puntos de equilibrio donde se localizan las partículas. A continuación dicho potencial efectivo, Ec. (6.4), se reemplaza por su desarrollo en serie de potencia hasta segundo orden en el Hamiltoniano relativo, esta expansión satisface $\nabla V^{ef}(x_{min}, y_{min}; \varepsilon, \{\gamma_i\}) = 0$. Si el potencial de interacción es repulsivo, decrece monótonamente y tiende a cero para $r \rightarrow \infty$. Una vez escrito el Hamiltoniano relativo en la aproximación armónica, es posible obtener la función de onda del estado fundamental en el límite de interacción fuerte.

Para el caso en que $\varepsilon > 1$, los mínimos del potencial efectivo se encuentran el eje x y pueden ser escrito como

$$\mathbf{r}_{min} = (\pm x_0, 0) \quad \text{con } x_0 > 0 \text{ dado por } \frac{1}{2g} = - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \Big|_{x_0}. \quad (6.8)$$

Para el caso de confinamiento isotrópico, $\varepsilon = 1$, los mínimos del potencial degeneran en un círculo de radio x_0 .

Con los mínimos del potencial de la Ec. (6.8), el Hamiltoniano relativo en la aproximación armónica se puede escribir como el Hamiltoniano de dos osciladores desacoplados

$$H_{HA}^r = -\nabla_r^2 + \frac{1}{2} \left[\omega_x^2 (x - x_0)^2 + \frac{1}{2} (\varepsilon^2 - 1) y^2 \right], \quad (6.9)$$

donde la frecuencia de oscilación correspondiente a la coordenada x es

$$\omega_x^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \Big|_{x_0}}{-\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \Big|_{x_0}} \right). \quad (6.10)$$

donde la dependencia en el parámetro de interacción g y los parámetros $\{\gamma_i\}$ está en forma implícita en $x_0 = x_0(g, \{\gamma_i\})$.

Las autofunciones del Hamiltoniano relativo en la aproximación armónica se escriben como el producto de funciones Gaussianas multiplicadas por los polinomios de Hermite, es decir,

$$\psi_{n,m}^r(\mathbf{r}) = e^{-\frac{\omega_x}{\sqrt{2}} \frac{(x-x_0)^2}{2}} H_n \left(\sqrt{\frac{\omega_x}{\sqrt{2}}} (x-x_0) \right) e^{-\frac{\sqrt{\varepsilon^2-1}}{4} y^2} H_m \left(\left(\frac{\varepsilon^2-1}{4} \right)^{1/4} y \right), \quad (6.11)$$

y las correspondiente energías son

$$E_{n,m}^r = \sqrt{2}\omega_x \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\varepsilon^2-1} \left(m + \frac{1}{2} \right). \quad (6.12)$$

Usando las Ecs. (5.34) y (6.11), podemos obtener la función de onda, del Hamiltoniano $H = H^R + H^r$, totalmente simétrica del estado fundamental

$$\Psi^{GS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C e^{-\varepsilon \frac{(y_1+y_2)^2}{4}} e^{-\frac{\sqrt{\varepsilon^2-1}(y_2-y_1)^2}{4}} e^{-\frac{(x_1+x_2)^2}{4}} \left[e^{-\frac{\omega_x}{\sqrt{2}} \frac{(x_2-x_1-x_0)^2}{2}} + e^{-\frac{\omega_x}{\sqrt{2}} \frac{(x_2-x_1+x_0)^2}{2}} \right], \quad (6.13)$$

donde C es la constante de normalización

$$C = \left(\frac{\sqrt{\omega_x}}{2^{\frac{3}{4}} \pi \left(1 + e^{-\frac{x_0^2 \omega_x}{\sqrt{2}}} \right)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2-1}}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.14)$$

Repitiendo el mismo procedimiento al mostrado en la sección 5.7, se pueden calcular los autovalores de la matriz densidad reducida de una partícula. En este caso, dichos autovalores están dados por

$$\lambda_{l,\bar{l}} = \lambda_l^x \lambda_{\bar{l}}^y, \quad (6.15)$$

donde

$$\lambda_l^x = \frac{(1 - \zeta(\omega_x))}{2 \left(1 + e^{-\frac{x_0^2 \omega_x}{\sqrt{2}}} \right)} \zeta(\omega_x)^l, \quad \zeta(\omega_x) = \left(\frac{(2\omega_x^2)^{\frac{1}{4}} - 1}{(2\omega_x^2)^{\frac{1}{4}} + 1} \right)^2, \quad (6.16)$$

y

$$\lambda_l^y = (1 - \xi(\varepsilon)) \xi(\varepsilon)^{\tilde{l}} \quad , \quad \xi(\varepsilon) = \left(\frac{(\varepsilon^2 - 1)^{\frac{1}{4}} - \sqrt{\varepsilon}}{(\varepsilon^2 - 1)^{\frac{1}{4}} + \sqrt{\varepsilon}} \right)^2 \quad , \quad (6.17)$$

donde los $l, \tilde{l} = 0, 1, 2, \dots$. Cada autovalor de la matriz densidad reducida, o número de ocupación, está doblemente degenerada debido a la simetría de intercambio entre las partículas.

Para evaluar las entropías cuánticas, las mismas a las estudiadas en el capítulo 5, es necesario conocer el comportamiento de las funciones $\zeta(\omega_x)$ y $\xi(\varepsilon)$. Se puede observar que $\zeta(\omega_x)$ está acotada por el valor de la unidad para $\omega_x > 0$ y que $\zeta(\omega_x) \rightarrow 1$ el límite $\omega_x \rightarrow \infty$, por otro lado para $\varepsilon > 1$, $\xi(\varepsilon)$ permanece siempre menor a uno y alcanza ese valor en el límite $\varepsilon \rightarrow 1^+$. Para valores suficientemente grande del parámetro de anisotropía, $\varepsilon \gg 1$, se obtiene que $\xi(\varepsilon) \rightarrow 0$ y que los números de ocupación toman el valor asintótico del modelo unidimensional, λ_l^x .

6.4. Entropías en el límite de interacción fuerte

El entrelazamiento entre las distintas componentes de un sistema cuántico puede ser medido o cuantificado utilizando diferentes entropías cuánticas. En esta sección vamos a mostrar como calcular las entropías de Rényi, de von Neumann y entropía lineal en el límite de interacción fuerte. Por completitud vamos a volver a mostrar las ecuaciones que definen cada entropía, si bien dichas ecuaciones ya fueron enunciadas en la sección 5.2. Si λ_i es el conjunto completo de autovalores de una matriz densidad, entonces la familia de entropías de Rényi están definidas por

$$S^\alpha = \frac{1}{1 - \alpha} \log_2 (Tr(\rho^\alpha)) = \frac{1}{1 - \alpha} \log_2 \left(\sum_i \lambda_i^\alpha \right) \quad . \quad (6.18)$$

La entropía de von Neumann está definida por

$$S_{vN} = -Tr(\rho \log_2(\rho)) = - \sum_i \lambda_i \log_2(\lambda_i) \quad , \quad (6.19)$$

y por último la entropía lineal es

$$S_L = 1 - Tr(\rho^2) = 1 - \sum_i \lambda_i^2 \quad . \quad (6.20)$$

Una vez que los números de ocupación ya fueron obtenidos, es posible calcular las entropías cuánticas. Ya que en estos cálculos, es necesario evaluar series geométricas de las funciones $\zeta(\omega_x)$ y $\xi(\varepsilon)$, hay que tener cuidado con los casos límites y el orden en que se realiza cada operación.

Comenzando con las entropías de Rényi, es simple mostrar que, debido a la separabilidad de la función de onda, en el límite de interacción fuerte esta familia de entropías son la suma de dos términos,

$$S^\alpha = S_x^\alpha(\omega_x) + S_y^\alpha(\varepsilon) \quad , \quad (6.21)$$

donde

$$S_x^\alpha(\omega_x) = \frac{1}{1 - \alpha} \log_2 \left(\frac{(1 - \zeta(\omega_x))^\alpha}{(1 - \zeta(\omega_x)^\alpha)} \right) + 1 \quad , \quad (6.22)$$

y

$$S_y^\alpha(\varepsilon) = \frac{1}{1-\alpha} \log_2 \left(\frac{(1-\xi(\varepsilon))^\alpha}{(1-\xi(\varepsilon)^\alpha)} \right). \quad (6.23)$$

Recordar que la Ec. (6.21) es válida ya que la función de onda del estado fundamental puede ser escrita como producto de funciones, cada una asociada a una de las coordenadas del sistema, ver sección 5.7.

Debido a esta separación de la función de onda, la entropía de von Neumann también se escribe como la suma de dos términos

$$S_{vN} = S_{vN}^x(\omega_x) + S_{vN}^y(\varepsilon), \quad (6.24)$$

donde cada uno de los términos de la suma tiene la forma de una entropía de von Neumann unidimensional [117], es decir,

$$S_{vN}^x(\omega_x) = - \frac{\log_2 \left((1-\zeta(\omega_x))^{(1-\zeta(\omega_x))} \zeta(\omega_x)^{\zeta(\omega_x)} \right)}{(1-\zeta(\omega_x))} + 1, \quad (6.25)$$

$$S_{vN}^y(\varepsilon) = - \frac{\log_2 \left((1-\xi(\varepsilon))^{(1-\xi(\varepsilon))} \xi(\varepsilon)^{\xi(\varepsilon)} \right)}{(1-\xi(\varepsilon))}. \quad (6.26)$$

Vale la pena mencionar que de las Ecs. (6.22) y (6.23), se puede demostrar que la min-entropy puede ser escrita como

$$S^\infty = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} (S_x^\alpha(\omega_x) + S_y^\alpha(\varepsilon)) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} S_x^\alpha(\omega_x) + \lim_{\alpha \rightarrow \infty} S_y^\alpha(\varepsilon) = S_x^\infty(\omega_x) + S_y^\infty(\varepsilon). \quad (6.27)$$

La entropía lineal es

$$S_L = 1 - \frac{1}{2} \frac{1-\zeta(\omega_x)}{1+\zeta(\omega_x)} \frac{1-\xi(\varepsilon)}{1+\xi(\varepsilon)}. \quad (6.28)$$

Para el caso de confinamiento isotrópico, $\varepsilon \rightarrow 1^+$, tenemos que $\xi(\varepsilon) \rightarrow 1$ y por lo tanto la entropía lineal tiene a uno, mientras que para otros valores del parámetro de anisotropía, la entropía lineal es menor a uno.

Antes de continuar vamos a hacer un comentario sobre la generalización de estos resultados a más dimensiones. Dichos resultados pueden ser extendidos a D dimensiones considerando $D-1$ parámetros de anisotropía en el potencial de confinamiento. La entropía de von Neumann y la familia de entropías de Rényi son entonces la suma de D términos, cada uno asociado a una coordenada cartesiana de sistema, y como demostramos para el caso de dos dimensiones, el término S_x^α depende de los parámetros del potencial de interacción a travez de ω_x , por lo tanto cada uno de los términos restantes depende solo de uno de los $D-1$ parámetros de anisotropía. Para más detalles ver las referencias [154, 155].

Los dos términos de la entropía de von Neumann, min-entropy, y entropías de Rényi para $\alpha = 0.2, 0.4, 0.8, 1.5, 2$, se muestran en la figura 6.1. Primero vamos a discutir el comportamiento de las entropías respecto al parámetro de anisotropía de la trampa y luego continuamos con la influencia de la interacción entre las partículas.

Como puede observarse de la figura 6.1a), para el modelo isotrópico ($\varepsilon \rightarrow 1^+$) el término $S_y^\alpha(\varepsilon)$ diverge logarítmicamente, mientras que para cualquier otro valor de

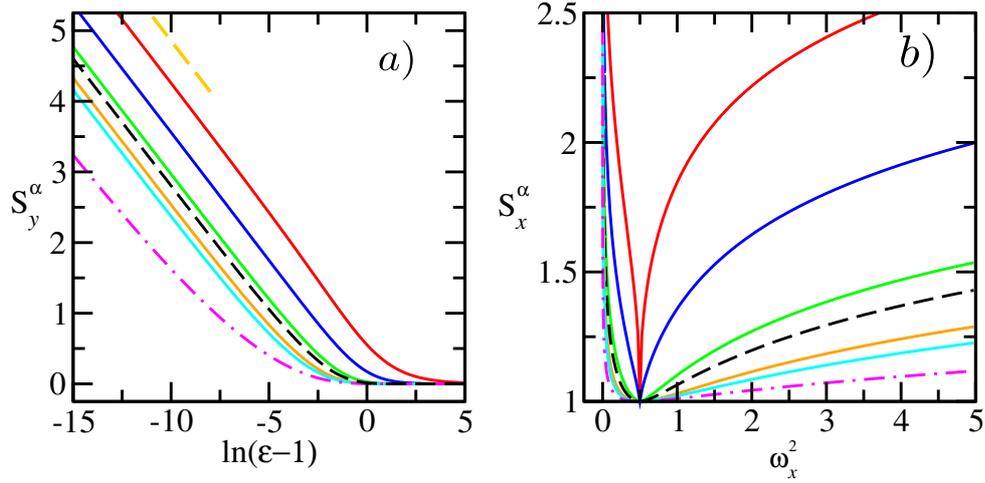


FIGURA 6.1: Ambos términos de la entropía de von Neumann (línea negra cortada), min-entropía (línea magenta cortada con puntos) y entropías de Rényi con $\alpha = 0.2, 0.4, 0.8, 1.5, 2$ (líneas roja, azul, verde, anaranjada y cian respectivamente). *a)* Término S_y^α en función del parámetro de anisotropía ε . *b)* Entropías unidimensionales S_x^α en función del cuadrado de la frecuencia ω_x^2 .

ε , dicho término permanece finito. Calculando la primer derivada en Ec. (6.26), se puede mostrar que

$$S_{vN} \sim -\frac{\log(\varepsilon - 1)}{\log 16} \quad \text{si } \varepsilon \sim 1^+. \quad (6.29)$$

Este comportamiento asintótico se observa en la figura como la línea entrecortada amarilla, la cual prueba al divergencia logarítmica de la entropía de von Neumann. De hecho, para $\varepsilon \rightarrow 1^+$, la entropía de von Neumann, min-entropía y la familia de entropía de Rényi muestran el mismo comportamiento. La figura también muestra que para confinamientos con gran anisotropía, el término $S_y^\alpha(\varepsilon)$ se anula, en otras palabras, para $\varepsilon \gg 1$ se recupera el comportamiento del sistema unidimensional, de la misma forma que sucede con el modelo de Calogero estudiado en el capítulo anterior.

El comportamiento del término $S_x^\alpha(\omega_x)$ se muestra en la figura 6.1b). Podemos observar que este término es una función decreciente de la frecuencia para $0 < \omega_x^2 < 1/2$, y es una función creciente para $1/2 < \omega_x^2$. En particular, para $\omega_x \rightarrow 0$, S_x^α diverge ya que $\zeta(\omega_x) \rightarrow 1$, lo mismo sucede para límite $\omega_x \rightarrow \infty$.

A partir de estos resultados podemos realizar el siguiente análisis, si la frecuencia ω_x es finita para valores grandes del parámetro de interacción, $g \gg 1$, entonces la entropía de von Neumann, min-entropía y las entropías de Rényi son finitas para el modelo anisotrópico y diverge logarítmicamente para el caso de confinamiento isotrópico. Para el caso de confinamiento anisotrópico, las partículas cristalizan o se localizan en los mínimos clásicos del potencial efectivo del Hamiltoniano relativo, dando lugar a una molécula de Wigner, mientras que para el caso de confinamiento isotrópico, estos mínimos degeneran en un círculo y por lo tanto las partículas ya no están localizadas en puntos discretos del espacio. Esta pérdida de información se refleja en la divergencia de las entropías de entrelazamiento.

Por otro lado, si la frecuencia de la aproximación armónica crece monótonamente para grandes valores del parámetro de interacción, la entropía de von Neumann,

min-entropy y entropías de Rényi divergen logarítmicamente para todo valor del parámetro de anisotropía. En este sentido, el término $S_x^\alpha(\omega_x)$ es el término dominante y define el comportamiento del sistema [154].

Todo el análisis realizado previamente lo podemos entender en forma cualitativa usando el principio de incertidumbre de Heisenberg. El ancho del paquete Gaussiano en la coordenada relativa tiende a cero cuando la frecuencia aumenta. Las incertezas de la posición relativa y del momento relativo son $\Delta x_{HA}^r = \sqrt{\langle (x_2 - x_1)^2 \rangle - \langle x_2 - x_1 \rangle^2} = 2^{1/4}/\sqrt{\omega_x}$ y $\Delta p_{HA}^r = \sqrt{\omega_x}/2^{5/4}$, entonces si $\omega_x \rightarrow 0$, se obtiene que $\Delta x_{HA}^r \rightarrow \infty$ y en el caso opuesto cuando $\omega_x \rightarrow \infty$ tenemos que $\Delta p_{HA}^r \rightarrow \infty$. De esta forma, vemos que para $\omega_x \rightarrow \infty$ la entropía de la molécula de Wigner diverge porque la posición está completamente determinada y en consecuencia la incerteza en el momento diverge, este límite es llamado cristalización fuerte. El caso opuesto, $\omega_x \rightarrow 0$, corresponde a un estado con momento bien definido y por lo tanto la posición no lo está. En ambos casos la divergencia en la incerteza de la posición o del momento conducen a la divergencia de las entropías de entrelazamiento. Más aún, la divergencia del término S_y^α también puede ser entendido con un análisis similar: ya que en el modelo isotrópico los mínimos del potencial degeneran en un círculo, se pierde información sobre la localización de las partículas.

Para $\omega_x^2 = 1/2$ las entropías toman el valor mínimo igual a uno. En un entorno de este punto, las entropías de Rényi con $\alpha \geq 1$ (esto incluye la entropía de von Neumann y min-entropy) presentan un comportamiento analítico, mientras que para $\alpha < 1$ tienen un comportamiento no analítico. En la figura 6.2 se pueden observar las entropías de Rényi para $\alpha = 0.4, 0.5, 0.6, 1$ y su correspondiente primer derivada alrededor de $\omega_x^2 = 1/2$. Se observa que las entropías de Rényi presentan derivada infinita para $\alpha = 0.4$, derivada discontinua para $\alpha = 0.5$ y una derivada continua con derivada segunda infinita para $\alpha = 0.6$, mientras que la entropía de von Neumann es una función analítica de la frecuencia.

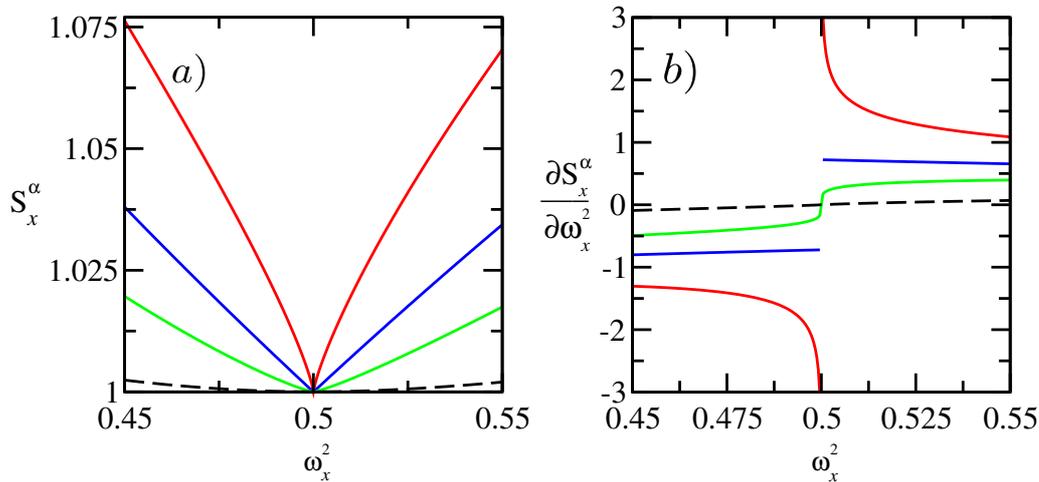


FIGURA 6.2: a) Entropía de Rényi asociada a la coordenada x , $S_x^\alpha(\omega_x)$ y b) derivadas de la entropía de Rényi alrededor del punto $\omega_x^2 = 1/2$. Se muestran la entropía de von Neumann ($\alpha \rightarrow 1$) (línea negra cortada) y entropías de Rényi con $\alpha = 0.4, 0.5, 0.6$ (líneas roja, azul y verde respectivamente).

Esta situación es análoga a la encontrada en el capítulo 5 para el modelo de Calogero unidimensional donde vimos que en aquellos valores del parámetro de interacción para los cuales la matriz densidad reducida tiene un número finito de autovalores no nulas, la entropía de Rényi presenta un comportamiento no analítica. Recientemente Amico y colaboradores realizaron estudios en cadenas de espín $1/2$ y encontraron las consecuencia del comportamiento no monótono de las entropías de Rényi en sistemas de varias partículas con orden topológico [121, 122, 123].

Resumiendo, el comportamiento no analítico de las entropías de Rényi manifiestan el soporte finito de la matriz densidad reducida. Para el caso de estudio de este capítulo, tomando $\omega_x^2 = 1/2$ en Ec. (6.16) es fácil de observar que hay solo dos ocupaciones no nulas.

En las secciones siguientes vamos a aplicar los resultados obtenidos ara estudiar el comportamiento de los números de ocupación y las diferentes entropías, en el límite de interacción fuerte, para dos grupos de potenciales de interacción separados de acuerdo al alcance de la interacción (largo alcance o corto alcance). Dado que ya analizamos en detalle el aporte del término $S_y^\alpha(\varepsilon)$ de ahora en adelante nos concentramos solo en la entropía unidimensional $S_x^\alpha(\omega_x)$.

6.5. Potenciales de interacción de largo alcance

A lo largo de esta sección vamos a considerar dos potenciales de interacción que son considerados potenciales de largo alcance. éstos son el potencial de potencia inversa y el potencial inversa de logaritmo.

6.5.1. Interacción de potencia inversa

El potencial de interacción de potencia inversa está definido por

$$V^{pi}(r; \beta) = \frac{1}{r^{2\beta}}. \quad (6.30)$$

Los mínimos del potencial y la frecuencia de oscilación de la aproximación armónica pueden ser obtenidos exactamente para este potencial,

$$x_0 = (4g\beta)^{\frac{1}{2(\beta+1)}} \quad \text{y} \quad \omega_x^2 = \beta + 1. \quad (6.31)$$

Por lo tanto, x_0 es una función creciente del parámetro de interacción g , mientras que la frecuencia ω_x es constante. Dos valores del parámetro β que valen la pena son mencionar son $\beta = \frac{1}{2}$ y $\beta = 1$, el primer valor corresponde al modelo de Hook y el segundo al modelo de Calogero.

Si bien en capítulo 5 ya analizamos algunas características del modelo de Calogero, ahora vamos a continuar el análisis de este sistema para el caso del modelo bidimensional con confinamiento anisotrópico en límite de interacción fuerte. Los autovalores de la matriz densidad reducida en dicho límite se muestran en la figura 6.3 como función de $\log(\varepsilon - 1)$, la línea gris entrecortada corresponde al número de ocupación más grande del modelo unidimensional en el límite de interacción fuerte. La figura muestra que para el modelo isotrópico, $\varepsilon \rightarrow 1^+$ los números de ocupación tienden a cero pero la suma de éstos permanece constante e igual a $1/2$, el motivo es la degeneración de los números de ocupación [124]. Cuando se aumenta la anisotropía de la trampa, todos lo números de ocupación $\lambda_{l,\tilde{l}}$ con $\tilde{l} \neq 0$ muestran un máximo local. Para un dado valor de l fijo, el valor del parámetro de anisotropía, ε , al cual se

manifiesta el máximo decrece con \tilde{l} . En el caso contrario, para un dado valor fijo de \tilde{l} , el máximo de los autovalores ocurre para el mismo valor de ε para todo l .

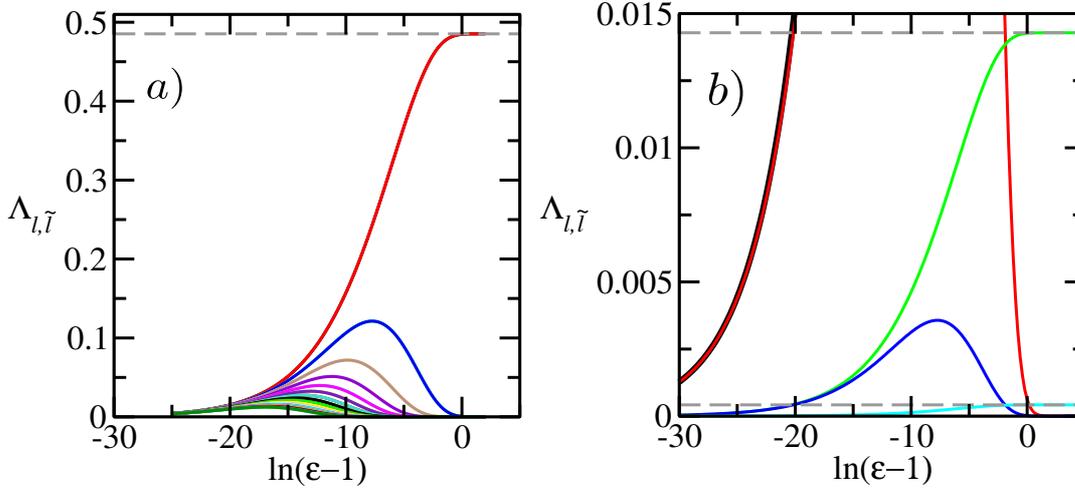


FIGURA 6.3: Ocupaciones en función de $\log(\varepsilon - 1)$ obtenidas en el límite de interacción fuerte $g \gg 1$. a) $\lambda_{l, \tilde{l}}$ con $l = 0$ y $\tilde{l} = 0, 1, 2, \dots, 20$ de arriba a abajo b) $\lambda_{0,0}$, $\lambda_{0,1}$, $\lambda_{1,0}$, $\lambda_{1,1}$ y $\lambda_{2,0}$ en líneas negra, roja, verde, azul y cian. Los valores asintóticos unidimensionales se muestran como líneas grises cortadas [117].

Para $\varepsilon \gg 1$ el Hamiltoniano del sistema se comporta como el Hamiltoniano del sistema unidimensional y los números de ocupación, $\lambda_{l,0}$, toman el valor asintótico del modelo unidimensional. Para $\varepsilon \sim \varepsilon_c = \sqrt{5}$, los autovalores de la matriz densidad reducida con $\tilde{l} = 0$, estabilizan en los valores del modelo unidimensional y aquellos con $\tilde{l} \neq 0$ se vuelven despreciable. Este comportamiento puede ser explicado si se considera que para $\varepsilon = \varepsilon_c$, el Hamiltoniano relativo se reduce al Hamiltoniano de un oscilador armónico en coordenadas polares alrededor de cada mínimo del potencial. En forma más general, para valores arbitrarios de la potencia β , el régimen del modelo unidimensional se alcanza para el valor crítico $\varepsilon = \sqrt{2(\beta + 1) + 1}$. En este caso el potencial efectivo del Hamiltoniano relativo es isotrópico en un entorno de su mínimo. Para $\varepsilon > \varepsilon_c$, el mayor autovalor $\lambda_{0,0}$ toma el valor ~ 0.4853 , y la suma del resto de los autovalores es solo ~ 0.0147 .

Como mencionamos antes, la dependencia con β solo afecta al término $S_x^\alpha(\omega_x)$. El ancho de la función Gaussiana en la coordenada relativa es finito, $\Delta x_{HA}^r = 2^{\frac{1}{4}}/(\beta + 1)^{\frac{1}{4}}$ y en consecuencia la entropía de von Neumann, min-entropy y entropías de Rényi son finitas. Sin embargo, la max-entropy diverge debido a que el espacio de Hilbert de la matriz densidad reducida es infinito. En el límite $\beta \rightarrow \infty$ las entropías divergen ya que la incerteza en el momento también lo hace. En la figura 6.4 se puede observar este comportamiento, donde las entropías mencionadas están mostradas como función del parámetro β . Es importante enfatizar que el resultado de tomar el límite $\beta \rightarrow 0$ en las entropías no permite obtener los resultados correctos, ya que para $\beta = 0$ el sistema corresponde a dos osciladores desacoplados.

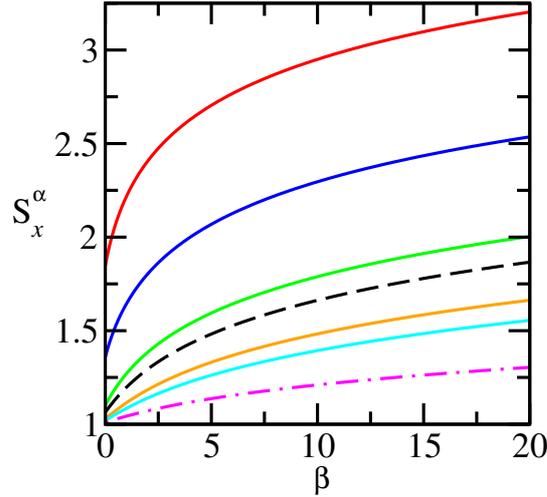


FIGURA 6.4: Entropía asociada a la coordenada x , S_x^α en el límite de interacción fuerte como función del exponente β . Se muestran las entropías de von Neumann (línea negra cortada), min-entropía (línea magenta de puntos y rayas) y entropías de Rényi con $\alpha = 0.2, 0.4, 0.8, 1.5, 2$ (línea roja, azul, verde, anaranjada y cian).

6.5.2. Interacción de tipo inversa del logaritmo

El potencial de interacción de tipo inversa del logaritmo es

$$V^{il}(r) = \frac{1}{\log(r+1)}. \quad (6.32)$$

En este caso, el mínimo del potencial y la frecuencia de oscilación en la aproximación armónica satisfacen las siguientes ecuaciones

$$2g = x_0(x_0 + 1) \log^2(x_0 + 1) \quad \text{y} \quad \omega_x^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \left(\frac{\frac{2}{\log(x_0+1)} + 1}{\frac{1}{x_0} + 1} \right) \right]. \quad (6.33)$$

En el límite de interacción fuerte, x_0 es una función creciente del parámetro de interacción g , lo cual dice que las partículas están cada vez más separadas, como consecuencia la frecuencia converge a uno, ver figura 6.5a). De esta forma, para $g \gg 1$, la entropía de von Neumann unidimensional y entropías de Rényi son finitas, como puede observarse en la figura 6.5b). En esta figura mostramos el término unidimensional de la entropía, S_x^α , como función de α .

6.6. Potenciales de interacción de corto alcance

A lo largo de esta sección vamos a considerar dos potencial de interacción entre las partículas que pueden clasificados como potenciales de interacción de corto alcance: el potencial de potencia inversa apantallado y el potencial Gaussiano repulsivo.

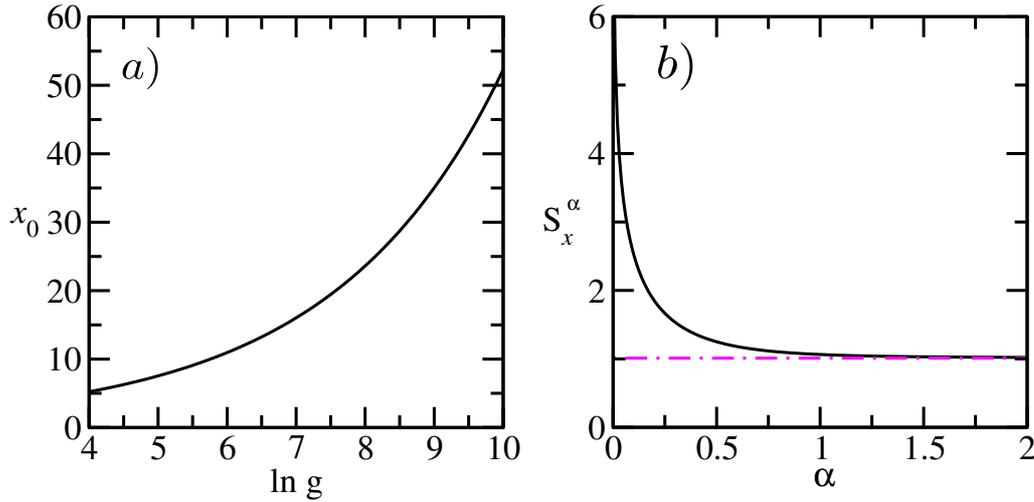


FIGURA 6.5: a) Mínimo del potencial efectivo x_0 como función del parámetro g para dos partículas que interactúan mediante un potencial de tipo inversa del logaritmo. b) Entropías unidimensionales en el límite de interacción fuerte S_x^α como funciones de α .

6.6.1. Interacción de potencia inversa apantallada

El potencial de interacción del tipo potencia inversa apantallado es

$$V^{pia}(r; \{\beta, \gamma\}) = \frac{e^{-\gamma r}}{r^{2\beta}}, \quad (6.34)$$

donde $1/\gamma$ es la distancia de corte. Al aumentar el parámetro γ la distancia de corte disminuye como puede observarse en la figuras 6.6 donde se muestra este potencial en función de r para $\beta = 1$ y $\gamma = 0, 0.2, 0.5, 1, 2, 5$.

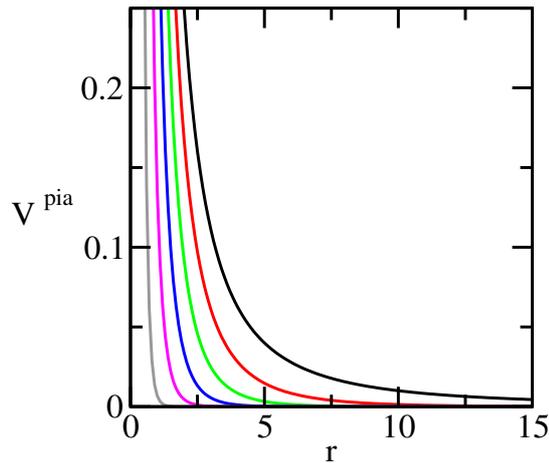


FIGURA 6.6: Potencial de interacción de tipo potencia inversa apantallada, Ec. (6.34), en función de r para $\beta = 1$ y $\gamma = 0, 0.2, 0.5, 1, 2, 5$ en líneas negra, roja, verde, azul, magenta y gris respectivamente.

En este caso, x_0 y ω_x están dados por las ecuaciones

$$2g = \frac{e^{\gamma x_0} x_0^{2(1+\beta)}}{2\beta + \gamma x_0} \quad \text{y} \quad \omega_x^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2\beta}{2\beta + \gamma x_0} + 2\beta + \gamma x_0 \right). \quad (6.35)$$

A partir de estas ecuaciones, podemos observar que tomando $\gamma = 0$ se recuperan los mínimos y la frecuencia del potencial de interacción del tipo potencia inversa, mientras que para $\beta = 0$ la interacción tiene un decaimiento exponencial. En el límite de interacción fuerte, los mínimos y la frecuencia crecen monotonamente, por lo tanto, las entropías unidimensionales de von Neumann y de Rényi divergen logarítmicamente. Como mencionamos previamente la divergencia en las entropías pueden ser entendidas como una consecuencia del principio de incertidumbre de Heisenberg, en este caso tenemos que $\Delta p_{HA}^r = \sqrt{\omega_x}/2^{\frac{5}{4}}$, esta cantidad diverge cuando $\omega_x \rightarrow \infty$. Más aún, cuanto más grande sea γ , más grande es la frecuencia y por lo tanto más grandes son las entropías de entrelazamiento. Este comportamiento se muestra en la figura 6.7, donde el término unidimensional de la entropía de von Neumann se muestra como función del parámetro de interacción para $\beta = 1$ y $\gamma = 0, 1/2, 1, 2$.

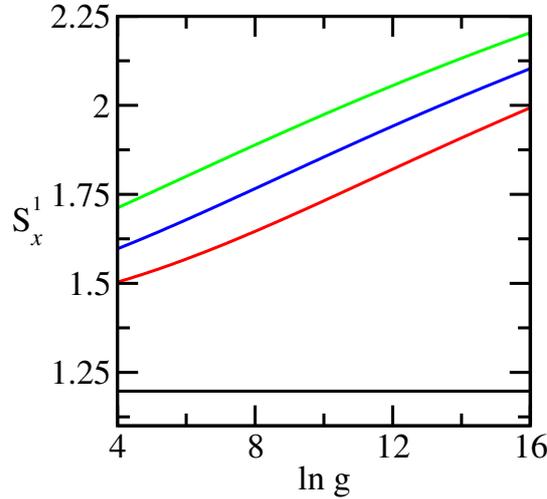


FIGURA 6.7: Entropía de von Neumann unidimensional S_x^1 en función del parámetro de interacción g con $\beta = 1$ y $\gamma = 0, 1/2, 1, 2$ (desde la curva inferior a la superior con líneas negra, roja, azul y verde respectivamente).

6.6.2. Interacción Gaussiana repulsiva

El segundo potencial de interacción de corto alcance que analizamos es el potencial Gaussiano del tipo repulsivo, dado por

$$V^{gr}(r; \sigma) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}, \quad (6.36)$$

donde $\sqrt{2}\sigma$ es la longitud característica del potencial. En este caso x_0 y ω_x pueden calcularse exactamente

$$x_0 = \sigma \sqrt{2 \log \left(\frac{2g}{\sigma^2} \right)} \quad \text{y} \quad \omega_x^2 = \frac{1}{2} \frac{x_0^2}{\sigma^2} = \sqrt{\log \left(\frac{2g}{\sigma^2} \right)} \quad \text{con} \quad g \geq \frac{\sigma^2}{2}. \quad (6.37)$$

Estas cantidades son funciones crecientes del parámetro de interacción, por lo tanto el término unidimensional de las entropías de Rényi y de von Neumann divergen en el límite de interacción fuerte. Esta divergencia puede ser explicada de la misma forma que para el caso del potencial de potencia inversa apantallada.

Para este potencial de interacción, hay que resaltar que tomar el límite $\sigma \rightarrow 0$ no reproduce los resultados del potencial del tipo delta de Dirac, para el cual la entropía de von Neumann es finita [156], ya que este límite no conmuta con el límite de interacción fuerte.

A partir de la Ec. (6.37) se puede demostrar que para $g = g_c$ con

$$g_c = \frac{\sigma^2 e^{\frac{1}{2}}}{2}, \quad (6.38)$$

$x_0 = \sigma$ y $\omega_x^2 = \frac{1}{2}$, por lo tanto, como explicamos anteriormente, todos los números de ocupación se anulan excepto los dos más grandes. En este caso, la matriz densidad reducida tiene soporte finito y las entropías de Rényi para $\alpha < 1$ tienen un comportamiento no analítico, mientras que para $\alpha \geq 1$ presentan un mínimo en $g = g_c$. En la figura 6.8 se muestra el comportamiento de los dos autovalores más grande la matriz densidad reducido en el gráfico de la derecha, mientras que en el gráfico de la izquierda se muestran los segundo autovalores más grandes, hay que recordar que todos están doblemente degenerados. La línea gris entrecortada corresponde al valor de g_c . Los dos primeros autovalores λ_0^x , figura 6.8a), alcanzan su valor máximo para $g = g_c$, valor en el cual todos los otros autovalores se anulan, figura 6.8b).

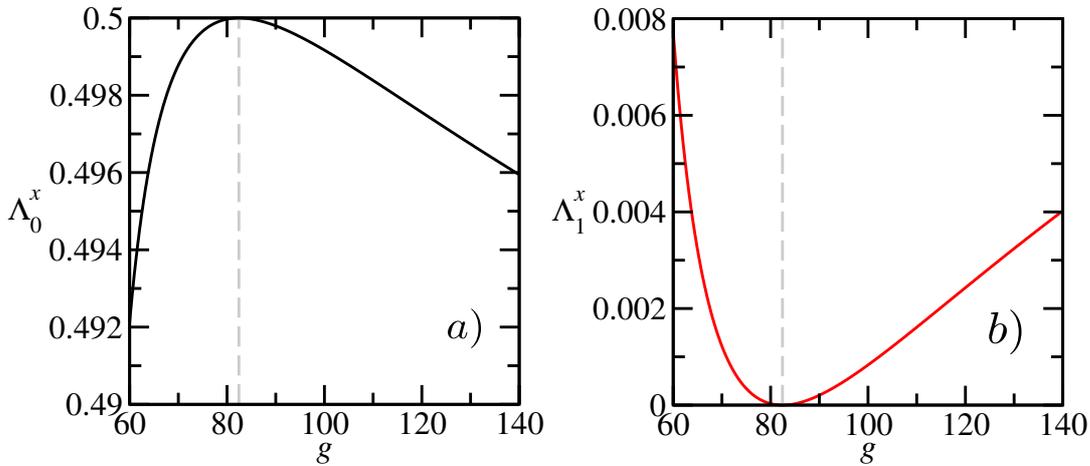


FIGURA 6.8: Ocupaciones unidimensionales λ_l^x , Ec. (6.16), para $\sigma = 10$ con a) $l = 0$ y b) $l = 1$. El valor g_c se muestra como una línea gris cortada.

Los resultados mostrados nos dicen que para dos partículas confinadas que interactúan mediante un potencial del tipo Gaussiano repulsivo, tiene una matriz densidad reducida con soporte finito, es decir tiene un número finito de autovalores no nulos para un determinado valor del parámetro de interacción, mientras que para el resto de los valores de dicho parámetro hay un número infinito de autovalores no nulos.

6.7. Resumen y conclusiones

En este capítulo calculamos en forma analítica, en el límite de interacción fuerte, los autovalores de la matriz densidad reducida y con éstos las entropías cuántica para el estado fundamental de una molécula de Wigner de dos partículas en dimensión dos. El principal resultado es que es posible determinar la influencia de la anisotropía de la trampa y el rango de la interacción entre partículas a partir del comportamiento de las entropías de entrelazamiento.

Dentro de la aproximación armónica calculamos la función de onda del estado fundamental en el límite de interacción fuerte, y con esta función de onda determinamos los números de ocupación realizando la descomposición de Schmidt de la matriz densidad reducida. Obtuvimos que los números de ocupación están doblemente degenerados debido a la simetría de intercambio de la función de onda. Con los números de ocupación calculamos la entropía lineal, de von Neumann, min-entropy, max-entropy y las entropías de Rényi como función del parámetro de anisotropía y los parámetros del potencial de interacción.

Debido a que la función de onda puede ser escrita como producto de funciones asociadas a cada coordenada, las entropías pueden ser escritas como la suma de dos términos, cada uno asociado a una coordenada y que solo uno de estos términos depende del parámetro de anisotropía, mientras que el término restante está asociado al potencial de interacción. Como consecuencia a esta separación, el comportamiento de las entropías respecto a la anisotropía del confinamiento puede ser analizado sin tener en cuenta la interacción entre las partículas, y la dependencia con la interacción está completamente definida a partir de la frecuencia de oscilación determinada en la aproximación armónica.

Demostremos que si la frecuencia de oscilación es finita para sistemas fuertemente interactuantes, la entropía de von Neumann, min-entropy y las entropías de Rényi también son finitas en el modelo anisotrópico y divergen para el caso de confinamiento isotrópico. La divergencia de las entropías en el modelo isotrópico puede explicarse de la siguiente forma: en el modelo con confinamiento anisotrópico, las partículas se localizan en los mínimos clásicos del potencial, los cuales son puntos aislados, dando lugar a la molécula de Wigner, mientras que en el modelo de confinamiento isotrópico, los mínimos degeneran en un círculo y por lo tanto las partículas ya no están localizadas en puntos aislados, dando lugar a una pérdida de información del sistema, lo que lleva a una divergencia de las entropías de entrelazamiento. Si la frecuencia aumenta monótonamente para interacciones fuertes, entonces las entropías divergen logarítmicamente para cualquier parámetro de anisotropía.

Este análisis realizado nos permite aplicar los resultados a distintos potenciales de interacción en forma casi inmediata. Agrupamos las interacciones estudiadas en dos clases dependiendo el alcance de la interacción: interacción de corto o largo alcance. Mostramos las diferencias obtenidas en los resultados para los grupos. Para interacciones de largo alcance, la frecuencia de oscilación permanece finita en el límite de interacción fuerte, la entropía de von Neumann y las entropías de Rényi también son finitas. Por el otro lado, para interacciones de corto alcance, la frecuencia de oscilación aumenta como función del parámetro de interacción, en consecuencia las entropías divergen en el límite de interacción fuerte. La divergencia en las entropías de entrelazamiento puede ser explicado a partir del principio de incertidumbre de Heisenberg.

También demostramos que cuando la frecuencia de oscilación asociada al potencial de interacción cumple $\omega_x^2 = 1/2$, las entropías toman su valor mínimo igual

a uno. De hecho, las entropías de Rényi con $\alpha \geq 1$ presentan un comportamiento analítico como función de ω_x^2 , mientras que para $\alpha < 1$ tienen un comportamiento no analítico, similar a los resultados encontramos para el modelo de Calogero unidimensional en el capítulo 5. Respecto a esto, encontramos que el sistema de dos partículas confinadas que interactúan mediante un potencial Gaussiano repulsivo, tienen una matriz densidad reducida con soporte infinito para todos los parámetros del Hamiltoniano excepto para aquellos en los cuales se satisface $\omega_x^2 = 1/2$.

Como observación final, hay un trabajo reciente en el cual se estudia un sistema de dos partículas confinadas en una esfera de dimensión $D - 1$, que interactúan mediante el potencial de Coulomb, donde se analiza la dependencia de las entropías de entrelazamiento con el radio de la esfera y la dimensionalidad espacial del sistema. Como perspectiva a futuro, sería interesante estudiar los efectos de la dimensionalidad del sistema y la intensidad de la interacción sobre las entropías cuánticas, tomando como punto de partida los resultados obtenidos hasta el momento.

Capítulo 7

Conclusiones

A lo largo de esta tesis nos hemos dedicado al estudio de sistemas que pueden ser modelados como sistemas cuánticos de pocos cuerpos confinados, abordando cada sistema con métodos variacionales o exactos. Consideramos Hamiltonianos que modelan iones en trampas y partículas confinadas en nanoestructuras con diferentes simetrías. Para estos sistemas estudiamos el espectro de energía del Hamiltoniano, el fenómeno de ligadura de estados resonantes, localización de la función de onda, control de estados cuánticos mediante campo externo o el contenido de información cuántica de los estados mediante el cálculo de diferentes medidas de entrelazamiento. El estudio de todos estos sistemas cuánticos se realizó utilizando métodos variacionales o exactos para el cálculo de los autovalores y autoestados del Hamiltoniano o las ocupaciones y las entropías de entrelazamiento que se derivan a partir de esas ocupaciones.

A continuación retomamos las conclusiones de cada capítulo.

Iniciamos con el estudio de excitones atrapados en un punto cuántico semiconductor con simetría esférica. Para ello, primero analizamos, dentro del marco de la aproximación de masas efectivas, el confinamiento de una partícula, electrón o hueco, en el punto cuántico considerado. Obtuvimos el espectro de un electrón atrapado utilizando el método variacional, consideramos y comparamos distintos enfoques o aproximaciones que pueden realizarse sobre el sistema. Encontramos que el espectro del sistema depende del tipo de confinamiento que se considere, pozo infinito o pozo finito, y que esto puede producir un error en la estimación de las energías del sistema. Ya que, tanto el electrón como el hueco, son partículas con carga eléctrica y éstas se encuentran localizadas en una estructura cuya constante dieléctrica es función de las coordenadas, se inducen cargas en las interfaces de los materiales que forman la estructura, generando así un potencial de autopolarización. Para el punto cuántico considerado, obtuvimos que dicho potencial modifica el espectro de energía pero puede ser considerado una perturbación. Vale la pena mencionar que la base elegida para obtener el espectro del Hamiltoniano es tal que las funciones de onda asociadas a cada autoestado satisfagan las condiciones de empalme necesarias para que el Hamiltoniano tenga carácter hermitiano.

Una vez analizado el problema de una partícula, nos enfocamos en el problema del par interactuante electrón-hueco, para el cual presentamos una expresión analítica de la interacción electrostática entre las partículas. Dicha interacción se obtiene resolviendo la ecuación de Poisson correspondiente y tiene en cuenta la forma funcional de las constantes dieléctricas de los materiales que forman el punto cuántico. Analizamos la energía de ligadura del excitón para los casos en que la interacción esté dada por el potencial de Coulomb y para el caso en el que el potencial esté dado por la solución de la ecuación de Poisson. Para ambos casos, encontramos que la energía de ligadura es una función decreciente del tamaño del núcleo del punto

cuántico, además los resultados obtenidos muestran que las cargas de polarización incrementan la energía de ligadura.

A partir de los estados excitónicos obtenidos, definimos los estados base para un qubit, estudiamos la pérdida de probabilidad al hacer transiciones entre los estados mediante la presencia de campos externos. Encontramos que es posible generar transiciones entre los estados base de qubit con poca pérdida de probabilidad en escalas de tiempo del orden de los picosegundos.

Una vez analizado el sistema del confinamiento de partículas en un punto cuántico utilizando la aproximación de masas efectivas, aplicamos el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para estudiar el mismo sistema. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, es un método semiempírico que permite obtener la estructura de bandas de materiales *bulk* y de nanoestructuras. Utilizando este método analizamos dos estructuras distintas: un punto cuántico simple y un punto cuántico doble. Para el problema del punto cuántico simple, calculamos el espectro del sistema utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas. Encontramos que los niveles de energía pertenecientes a la banda de conducción tienen un comportamiento similar al encontrado utilizando la aproximación de masas efectivas. Una de las ventajas del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ es que se pueden analizar varias bandas a la vez y se consideran las interacciones entre estas bandas. Calculamos los niveles de energía en la banda de valencia y encontramos que hay cruces evitados entre distintos autovalores, debidos a la interacción entre las bandas. Aplicando el método de Hartree al estado de menor energía de la banda de conducción y al estado de mayor energía en la banda de valencia, calculamos la energía de ligadura del estado fundamental del excitón. Encontramos que se reproduce el comportamiento hallado en la aproximación de masas efectivas en un intervalo de valores del radio del núcleo, pero luego cambia su comportamiento y relacionamos dicho comportamiento con la distancia relativa entre las partículas.

Utilizando los mismos métodos, estudiamos el espectro y la energía de ligadura del estado fundamental del excitón en un punto cuántico doble, el cual fue estudiado hace unos años utilizando la aproximación de masas efectivas. Nuestros resultados correspondientes a la banda de conducción están de acuerdo a los resultados obtenidos con la aproximación de masas efectivas. Cuando observamos la energía de ligadura, encontramos que muestra un salto en su comportamiento, relacionado con la posición del máximo de la densidad de probabilidad de la función de onda electrónica, además dicho comportamiento puede estar relacionado con la localización de los estados excitado electrónicos.

Dentro del marco de trabajo del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se pueden analizar distintos tipos de estructuras semiconductoras, no solo puntos cuánticos sino también pozos cuánticos o hilos cuánticos. A su vez se pueden considerar distintos efectos, como por ejemplo los efectos de deformación o efectos piezoeléctricos. Por lo tanto, aún queda mucho trabajo que puede llevarse a cabo utilizando este método. Como perspectiva a futuro quedaría continuar el estudio de partículas atrapadas en un punto cuántico doble y buscar la relación que puede haber entre los resultados obtenidos con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y los resultados obtenidos por Ferrón y colaboradores [42].

Luego nos concentramos en la ligadura de estados resonantes de uno y dos electrones en un punto cuántico con simetría cilíndrica mediante la aplicación de un campo magnético. En particular buscamos una forma de implementar la aproximación de confinamiento lateral fuerte que nos permita determinar los parámetros para los cuales ocurre la ligadura.

Iniciamos el estudio observando el espectro del problema tridimensional de un electrón atrapado en un nanohilo en el cual se encuentra inmerso un punto cuántico

con simetría cilíndrica. Haciendo uso de cantidades provenientes de la teoría de información cuántica y las densidades radiales, determinamos en forma cualitativa la composición de la función de onda del estado fundamental. En base a esto, aplicamos la aproximación de confinamiento lateral fuerte definida con distintas funciones radiales. Por un lado, la aproximación de confinamiento lateral definida con la función de onda radial igual a la función de onda de un pozo de potencial bidimensional nos permitió obtener una estimación de la parte real de la energía del estado resonante, pero el autovalor más bajo de dicho problema no mostraba un cambio en su comportamiento que manifieste la presencia del fenómeno de ligadura. Por otro lado, cuando usamos la función de onda del primer nivel de Landau para definir la aproximación de confinamiento lateral, encontramos que el autovalor más bajo del Hamiltoniano si manifiesta la ligadura del estado resonante, pero para una intensidad de campo magnética mayor a la encontrada en el problema tridimensional. Aun así, con este enfoque pudimos obtener la parte imaginaria de la energía del estado resonante, utilizando una técnica estándar, y los resultados obtenidos están de acuerdo a los encontrados en un estudio previo [65].

Con el objetivo de obtener una mejor estimación del campo al cual ocurre la ligadura, propusimos una modificación a la aproximación de confinamiento lateral basado en fundamentos geométricos. Con esta modificación logramos obtener una mejor estimación de la intensidad de campo magnética en la que ocurre la ligadura.

El sistema de dos electrones, a diferencia del sistema de un electrón, puede tener distintos umbrales de energía. Los estados resonantes que se vuelven estados ligados pueden cruzar el umbral de cero electrones y el umbral de un electrón. Encontramos que el umbral de cero electrones ocurre en el mismo campo crítico en que ocurre la ligadura del sistema de un electrón, mientras que la ligadura del umbral de un electrón puede ocurrir para el mismo campo o para campos mayores, dependiendo de la intensidad de la interacción entre los electrones. Dentro de la aproximación de confinamiento fuerte con las modificaciones propuestas, logramos obtener una estimación de los campos críticos en los que ocurren los cruces de los distintos umbrales. En particular estudiamos dos potenciales de interacción interpartículas distintos, uno el cual puede derivarse de la aproximación de confinamiento lateral fuerte y un potencial utilizado en la literatura en sistemas cuasi unidimensionales. Los resultados en ambos casos muestran cualitativamente el mismo comportamiento. En este sistema, utilizando la entropía de von Neumann y la *purity*, logramos determinar la estructura de la función de onda, es decir, si la función de onda de los dos electrones es una función producto correspondiente a cada uno de los electrones o si es una combinación simétrica de funciones de cada electrón.

Concluimos que es posible utilizar la aproximación de confinamiento lateral fuerte para estudiar la ligadura de estados resonantes de uno y dos electrones en puntos cuánticos, pero el estudio depende fuertemente del comportamiento tridimensional del sistema, por lo tanto mientras más información se conozca del problema tridimensional mejor es la aproximación que puede obtenerse cuando se aplique el confinamiento lateral. No hay que olvidar que los resultados obtenidos en el problema de dos electrones corresponden a estados cuya función de onda espacial es simétrica respecto al intercambio de partículas, por lo que una perspectiva a futuro sería estudiar los estados que tienen función de onda espacial antisimétrica.

En el segundo bloque de esta tesis, estudiamos sistemas de partículas fuertemente correlacionadas: iniciamos con el modelo de Calogero de dos partículas y continuamos con las moléculas de Wigner bidimensionales de dos partículas.

Para el modelo de Calogero de dos partículas en dimensión uno calculamos los números de ocupación de la matriz densidad reducida de una partícula, esto lo realizamos para la función de onda del estado fundamental de bosones y de fermiones. Luego evaluamos la entropía de von Neumann y las entropías de Rényi para este sistema, donde encontramos que la entropía de von Neumann es una función analítica pero no monótona ya que presenta un máximo para un determinado valor del parámetro de interacción. Respecto a las entropías de Rényi encontramos que, dependiendo el valor del parámetro α , son funciones no analíticas del parámetro de interacción y demostramos que dicho comportamiento es una consecuencia de la analiticidad de los autovalores de la matriz densidad reducida. Respecto a esto, los valores del parámetro de interacción en los cuales las entropías de Rényi son no analíticas corresponden a aquellos valores para los cuales solo un número finito de autovalores de la matriz densidad reducida son no nulos. De esta forma las entropías de Rényi exponen los valores de los parámetros del Hamiltoniano para los cuales la matriz densidad reducida tiene soporte finito.

En cuanto al modelo bidimensional, calculamos la entropía de von Neumann y encontramos que ésta es una función monótonamente creciente del parámetro de interacción cuando el confinamiento es isotrópico, en consecuencia la entropía de von Neumann diverge en el límite de interacción fuerte. Por otra parte, si el confinamiento de las partículas es anisotrópico, la entropía de von Neumann permanece finita sin importar que tan fuerte sea la interacción entre las partículas. Por lo tanto, si el parámetro de anisotropía es lo suficientemente grande, el sistema bidimensional se comporta en forma análoga al sistema unidimensional, demostrando así la presencia de un *crossover* dimensional en el sistema.

Una propiedad interesante surge de los resultados obtenidos para el modelo bidimensional de dos fermiones como consecuencia de la degeneración del estado fundamental. Cualquier función de onda que pueda asignarse al estado fundamental del sistema tiene un valor particular de la entropía de von Neumann, pero las funciones de onda del estado fundamental que también son autoestados de la componente z del momento angular, son las que tienen máximo valor de la entropía de von Neumann y cuyo comportamiento coincide con el comportamiento de la entropía de von Neumann del sistema de dos bosones.

Respecto a las moléculas de Wigner, obtuvimos expresiones analíticas para los números de ocupación y las entropías cuánticas en el límite de interacción fuerte. A partir del análisis realizado sobre distintas formas en las que pueden interactuar las partículas pudimos determinar la influencia de la anisotropía de la trampa y del rango de la interacción entre las partículas en las entropías de entrelazamiento. Haciendo uso de la aproximación armónica calculamos la función de onda del estado fundamental en el límite de interacción fuerte, y de esta forma calculamos los números de ocupación haciendo la descomposición de Schmidt de la matriz densidad reducida. En este mismo límite obtuvimos expresiones analíticas para la entropía lineal, entropía de von Neumann y entropías de Rényi como funciones del parámetro de anisotropía y los parámetros de interacción.

Nuestros resultados muestran que la dependencia de las entropías respecto al parámetro de anisotropía es independiente del potencial de interacción, mientras que la dependencia en el potencial de interacción queda definida en la frecuencia de oscilación dentro de la aproximación armónica. Encontramos que, si la frecuencia de oscilación es finita, las entropías de entrelazamiento son finitas para el caso de confinamiento anisotrópico mientras que, para el caso de confinamiento isotrópico, las entropías divergen. Esta divergencia puede ser entendida a partir de un análisis cualitativo basado en el principio de incertidumbre de Heisenberg. En el caso

de confinamiento isotrópico, las partículas se localizan en los mínimos clásicos del potencial, los cuales son puntos aislados del espacio, por el otro lado, cuando el confinamiento se vuelve isotrópico, los mínimos degeneran en un círculo, perdiendo así información sobre la localización de las partículas y esta pérdida de información se ve reflejada como una divergencia en las entropías.

Los resultados también muestran que las entropías de entrelazamiento divergen para el modelo de confinamiento anisotrópico si la frecuencia de oscilación es una función monótonamente creciente del parámetro de interacción.

Para analizar la influencia del alcance del potencial sobre las entropías de entrelazamiento, separamos las interacciones en potenciales de corto y largo alcance y mostramos las diferencias en los resultados obtenidos para cada grupo. Para los potenciales de interacción de largo alcance la frecuencia se mantienen finitas en el límite de interacción fuerte y por lo tanto las entropías son finitas. Por el otro lado, para los potenciales de corto alcance, las frecuencias son funciones monótonamente crecientes del parámetro de interacción, por ende, las entropías de entrelazamiento divergen en el límite de interacción fuerte.

Apéndice A

Uso de B -splines en Mecánica Cuántica

El uso de un conjunto de funciones, como base del espacio de Hilbert, para resolver la ecuación de Schrödinger tiene una larga historia en física. Este conjunto transforma la ecuación diferencial en un problema algebraico de autovalores y autovectores, el cual puede ser resuelto en forma numérica haciendo uso de computadoras. En este capítulo mostramos como se usan el conjunto de funciones conocido como B -splines para resolver la ecuación de Schrödinger en distintos tipos de problemas.

A.1. Descripción de los B -splines

Los B -splines son funciones diseñadas para generalizar polinomios con el propósito de aproximar cualquier función. En esta sección nos centraremos en entender estas funciones, su comportamiento y cómo evaluarlas. Una descripción completa de los B -splines y sus propiedades puede ser encontrada en [157] y en el libro de Carl de Boor [158].

Primero introducimos algunas definiciones.

- Un polinomio de orden k (es decir grado $k - 1$) es

$$p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{k-1}x^{k-1}.$$

- Una función que es continua (en un dado intervalo) junto con sus derivadas de orden n se dice que es de clase C^n . Entonces C^0 significa que solo la función f es continua y C^{-1} que f es discontinua.
- Llamaremos *knots* a una secuencia de puntos en el intervalo $[a, b]$ en orden creciente no necesariamente distintos

$$\{t_i\}_{i=1, \dots, n_k}, \quad a = t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_{n_k} = b.$$

Esta secuencia de puntos puede ser asociada de la siguiente forma

$$\begin{aligned} t_1 &= t_2 = \dots = t_{\mu_1} = \zeta_1, \\ t_{\mu_1+1} &= t_2 = \dots = t_{\mu_1+\mu_2} = \zeta_2, \\ &\vdots \\ t_{n+1} &= \dots = t_{n+\mu_l} = \zeta_{l+1}, \quad n = \mu_1 + \dots + \mu_l. \end{aligned}$$

Los puntos ζ_j son todos distintos, satisfacen que $\zeta_j < \zeta_{j+1}$ y subdividen el intervalo $[a, b]$ en l subintervalos $I_j = [\zeta_j, \zeta_{j+1}]$, esta nueva secuencia de puntos son llamados breakpoints.

Cada B-spline es una función compuesta a trozos por polinomios del mismo orden en subintervalos adyacentes unidos por una determinada condición de continuidad. Por lo tanto el conjunto de funciones B-splines es definido a partir del orden de los polinomios, k , y la secuencia de *knots* en el intervalo $[a, b]$. La multiplicidad de cada *knot* es lo que define la condición de continuidad en dicho punto, multiplicidad uno significa máxima continuidad, es decir que son de clase C^{k-2} .

La elección más usada de *knots* es con multiplicidad uno en los *knots* interiores del intervalo y multiplicidad k en los extremos del intervalo. Con esta elección el número de funciones B-spline es

$$n_b = l + k - 1.$$

En el caso mas general en cual hayan n_k *knots* y algunos puedan estar repetidos el numero de B-splines es

$$n_b = n_k - k.$$

En la figura A.1 mostramos el conjunto completo de funciones B-splines de orden $k = 3$ para dos secuencias de *knots* distintas. En la figura A.1 a) está graficado el caso con una distribución uniforme de *knots*, multiplicidad uno en los puntos interiores y multiplicidad tres en los extremos, para este caso el número de funciones es de siete. En la figura A.1 b) se muestran las funciones para el caso en que se repita dos veces un *knot*, en este caso el número de funciones es de ocho.

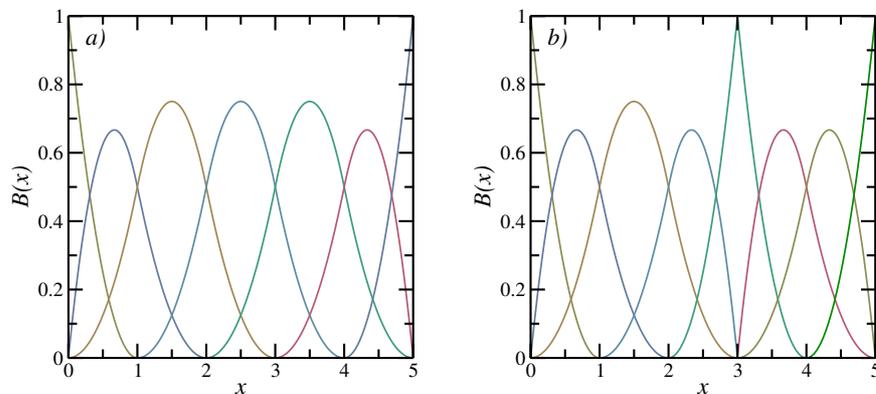


FIGURA A.1: Gráfico de las funciones B-splines de orden $k = 3$ para a) secuencia de *knots* $[0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 5, 5]$ y b) secuencia de *knots* $[0, 0, 0, 1, 2, 3, 3, 4, 5, 5, 5]$.

En la figura A.1 vemos que el comportamiento de las funciones cambia cuando se repite algún *knot*, esto afecta la continuidad de las funciones en dicho punto.

A.2. La base de B-splines

Como dijimos antes, el conjunto de funciones B-splines esta completamente definido a partir del orden de los polinomios k , y la secuencia de *knots* $\{t_i\}_{i=1, \dots, n_k}$ en el intervalo $[a, b]$, algunas propiedades importantes de las funciones son

- Sobre cada intervalo (t_i, t_{i+1}) , exactamente k B -splines son no nulos.

$$B_j(x) \neq 0 \quad \text{para} \quad j = i - k + 1, \dots, i.$$

Por lo tanto

$$B_i(x) B_j(x) = 0 \quad \text{para} \quad |i - j| \geq k.$$

- Satisfacen la condición

$$\sum_i B_i(x) = 1.$$

- Los B -splines satisfacen la relación de recurrencia

$$B_i^k(x) = \frac{x - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_i^{k-1}(x) + \frac{t_{i+k} - x}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i-1}^{k-1}(x), \quad (\text{A.1})$$

esta relación junto con la definición de los B -splines de orden $k = 1$

$$B_i^1(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } t_i \leq x \leq t_{i+1} \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (\text{A.2})$$

dan origen al algoritmo empleado para la evaluación de los B -splines en un dado punto x . En el libro de Carl de Boor [158] se encuentran rutinas escritas en Fortran que implementan el algoritmo descrito en las ecuaciones A.1 y A.2, también existen rutinas escritas en otros lenguajes como Octave y Python.

A.3. Resolviendo la ecuación de Schrödinger

En esta sección describimos el procedimiento básico para resolver la ecuación de Schrödinger usando las funciones B -splines como base del espacio de Hilbert. Inicialmente vamos a describir el proceso para el problema unidimensional de una partícula y luego vamos a ir extendiendo el procedimiento a situaciones con mas dimensiones o con mas partículas.

A.3.1. Problema de una partícula 1D

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula en una dimensión es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \quad (\text{A.3})$$

donde \hbar es la constante de Plank, m es la masa de la partícula $V(x)$ es la energía potencial de la partícula, E_n es la autoenergía asociada a la autofunción $\psi_n(x)$.

La Ec. A.3 se resuelve numericamente en un subespacio asumiendo que cualquier solución puede ser aproximada, en un intervalo, por funciones del tipo B -spline. Por lo tanto se puede expandir la solución como combinación lineal de B -splines

$$\psi_n(x) = \sum_{i=1}^N c_i^n B_i(x), \quad (\text{A.4})$$

donde $B_i(x)$ es el i -ésimo B-spline de orden k definido en la sección A.2.

El procedimiento para resolver la Ec. A.3 es el siguiente. Inicialmente se define el intervalo de integración, $[X_{min}, X_{max}]$, el orden de los B-splines y la secuencia de *knots* junto con su multiplicidad. Hay total libertad en la distribución de los *knots*. Con todo esto ya tenemos definida la base para la expansión en la ecuación A.4. Un punto a tener en cuenta son las condiciones de contorno de la función de onda, por ejemplo, para el caso de estados ligados sabemos que la función de onda cumple con la condición $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$, esta condición se satisface quitando el primer y el último B-spline de la base.

Los estados que satisfacen que la ecuación A.3 se calculan resolviendo el sistema de N ecuaciones lineales obtenidos después de reemplazar la ecuación A.4 en la ecuación A.3 y proyectando sobre $B_j(x)$. Escrito en forma matricial esto es

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{c} = E_n \mathbf{S} \cdot \mathbf{c}, \quad (\text{A.5})$$

con $\mathbf{c} = \{c_i^n\}_i^N$, y las matrices estan dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{ij} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{X_{min}}^{X_{max}} B_i(x) \frac{d^2 B_j(x)}{dx^2} dx + \int_{X_{min}}^{X_{max}} B_i(x) V(x) B_j(x) dx, \\ \mathbf{S}_{ij} &= \int_{X_{min}}^{X_{max}} B_i(x) B_j(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

La matriz de solapamiento \mathbf{S} aparece porque las funciones B-splines son un conjunto no ortonormal. Todos los elementos de matriz se pueden evaluar en forma numérica utilizando el método de cuadratura de Gauss-Legendre, el cual permite calcular las integrales involucradas en forma exacta en una gran cantidad de ocasiones o con una precisión del orden de la precisión de una computadora.

A.4. Bases usadas

En esta sección vamos a listar las bases que fueron usadas para resolver los distintos problemas estudiados, ya que en cada caso particular hay que elegir la el número de funciones para definir el tamaño de la base y también hay que elegir que tipo de distribución de *knots* usar.

A.4.1. Exciton en un punto cuántico heterogéneo

El objetivo del capítulo 2 es el estudio de un exciton confinado en punto cuántico con simetría esferica, pero también se analizó el espectro de un electrón confinado en el punto cuántico, por lo tanto, en cada problema hay que elegir una base adecuada.

Para el problema de un electrón confinado la base usada fue,

$$|\psi_i^{1p}(r)\rangle = C_i \frac{B_i^k(r)}{r}, \quad (\text{A.7})$$

donde C_i es la constante de normalización. En este problema, se hizo especial énfasis en las condiciones de empalme de la función de onda, es por este motivo que la distribución de *knots* es la siguiente, definimos tres regiones para la variable radial, estas regiones son los intervalos $[0, a]$, $[a, b]$ y $[b, R_{max}]$, en cada región hicimos una distribución uniforme de *knots*, y además exigimos que los valores $r = a$ y $r = b$ estén dentro del conjunto de *knots*, pero éstos tienen una multiplicidad dos, es decir,

están dos veces repetidos cada uno, de esta forma es posible obtener soluciones que satisfagan las condiciones de empalme adecuadas, como se menciona en la referencia [159]. Por último el valor de R_{max} elegido fue $R_{max} = 100 \text{ nm}$.

En la ecuación (A.7) no mencionamos la dependencia con las coordenadas angulares, esto es porque al estudiar un problema con simetría esférica dicha dependencia está dada por las funciones $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, es decir por los armónicos esféricos.

Para el problema del exciton confinado en el punto cuántico hay que elegir una base de dos partículas, ya que el electrón y el hueco pueden ser considerados dos partículas distinguibles, la base elegida es,

$$|\Psi_{i,j}(r_e, r_h)\rangle = |\psi_i^{1p}(r_e)\rangle |\psi_j^{1p}(r_h)\rangle, \quad (\text{A.8})$$

donde $|\psi_i^{1p}(r)\rangle$ están definidas en Ec. (A.7), r_e y r_h son las coordenadas radiales del electrón y el hueco respectivamente. En este problema, la distribución de *knobs* y el intervalo elegido en cada coordenada es igual a la descrita para resolver el problema de una partícula en el punto cuántico.

A.4.2. Niveles excitónicos y propiedades espectrales de puntos cuánticos multicapas

A lo largo del capítulo 3, se analizaron los espectros de energía y la energía de ligadura del estado fundamental excitónico de dos puntos cuánticos con simetría esférica utilizando el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y la aproximación de función de onda envolvente. El espectro de energía del sistema se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (\text{A.9})$$

donde H es el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de ocho bandas dado en la Ec. (3.8) y $\Psi(\mathbf{r})$ es la función de onda asociada al autovalor E y es un vector de ocho componentes de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \\ \psi_3(\mathbf{r}) \\ \psi_4(\mathbf{r}) \\ \psi_5(\mathbf{r}) \\ \psi_6(\mathbf{r}) \\ \psi_7(\mathbf{r}) \\ \psi_8(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Para resolver la ecuación (A.9) aplicamos el método variacional con el conjunto de B -splines como base del espacio de Hilbert, por lo tanto los operadores que aparecen en el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, Ecs. (3.9)-(3.10), se transforman en matrices de dimensión $N \times N$, con N igual al número de funciones base elegido.

En ambos problemas estudiados en el capítulo 3, analizamos estados con momento angular $l = 0$ y $l = 1$, y que tengan simetría azimutal, por lo tanto la base elegida es

$$\phi_{n,l}(\mathbf{r}) = B_n(r) P_l(\cos(\theta)), \quad (\text{A.11})$$

donde $P_l(x)$ son los polinomios de Legendre y cada una de las funciones que forman el vector función de onda, Ec. (A.10), es combinación lineal de los elementos de la base, es decir,

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{n,l} c_{n,l}^i \phi_{n,l}(\mathbf{r}), \quad i = 1, \dots, 8. \quad (\text{A.12})$$

Hay que tener en cuenta que cada operador en el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, se transforma en una matriz de dimensión $N \times N$, por lo tanto el Hamiltoniano es una matriz compleja de dimensión $8N \times 8N$, para lo cual calcular los autovalores y autovectores de dicha matriz tiene un costo computacional muy alto. Por este motivo nos restringimos a estados con momento angular $l = 0$ y $l = 1$.

El procedimiento para el cálculo de las matrices consiste en, primero en escribir los operadores diferenciales en coordenadas polares, hay que tener en cuenta que en el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, aparecen operadores que involucran derivadas de primer y segundo orden respecto a las coordenadas cartesianas, cuyas expresiones en coordenadas esféricas son bastantes complejas. Una vez logrado esto, se pasa al cálculo de las integrales correspondientes para determinar cada elemento de matriz, las integrales en la coordenada radial las calculamos utilizando una cuadratura de Gauss-Legendre y las integrales en la coordenada angular θ , las calculamos en forma analítica.

Para el cálculo de los autovalores y autovectores del problema de un punto cuántico simple, sección 3.3, el intervalo de integración $[0, R_{max}]$ lo dividimos en tres subintervalos $[0, R_c]$, $[R_c, R_1]$ y $[R_1, R_{max}]$. En cada uno de los intervalos hicimos una distribución uniforme de *knots*, en los dos primeros tomamos 45 *knots* mientras que en el último intervalo solo tomamos 30 *knots*, además $R_{max} = 50 \text{ nm}$.

En el problema del punto cuántico doble, sección 3.4, nuevamente al intervalo de integración $[0, R_{max}]$ lo dividimos en los subintervalos $[0, R_c]$, $[R_c, R_1]$, $[R_1, R_2]$, $[R_2, R_3]$ y $[R_3, R_{max}]$, y elegimos una distribución uniforme de *knots* en cada uno, ara los cuatro primeros intervalos tomamos 25 *knots* y en el último 20 *knots*, además en este caso $R_{max} = 30 \text{ nm}$.

A.4.3. Ligadura de estados metastables de dos electrones en puntos cuánticos semiconductores con campo magnético

En el capítulo 4 se analizó el problema de uno y dos electrones confinados en un punto cuántico con simetría cilíndrica, tanto en una dimensión como en tres.

Vamos a empezar con el problema de un electrón en tres dimensiones. Analizamos los estados con momento angular nulo, por lo tanto, las funciones elegidas, en coordenadas cilíndricas, están dadas por

$$|\phi_{i,j}^{3D}(\rho, z)\rangle = C_{i,j} B_i^{(k_\rho)}(\rho) B_j^{(k_z)}(z), \quad (\text{A.13})$$

donde $C_{i,j}$ es la constante de normalización, además elegimos distinto orden para los B-splines en cada coordenada y distintas secuencias de *knots*. Para la variable radial, se eligió una secuencia uniforme en el intervalo $[0, R_{max}]$ con $R_{max} = 50 \text{ nm}$ y una secuencia con distribución exponencial para la variable z , el intervalo elegido fue $[Z_{min}, Z_{max}]$ con $Z_{max} = -Z_{min} = 100 \text{ nm}$.

Para el problema de un electrón en el límite de confinamiento lateral fuerte, la base elegida fue

$$|\phi_i^{1D}(z)\rangle = \hat{C}_i B_i(z), \quad (\text{A.14})$$

donde \hat{C}_i es la constante de normalización. En este caso se usó la misma distribución de *knots* junto con el mismo intervalo, para la variable z , al usado en el problema en tres dimensiones.

Finalmente, para el problema de dos electrones en la aproximación de confinamiento lateral fuerte, resolvimos el problema de autovalores y autovectores para los estados simétricos respecto al intercambio de partículas, por lo tanto los elementos de matriz del Hamiltoniano fueron calculados en la base,

$$|\Phi_{i,j}\rangle = \begin{cases} \frac{|\phi_i^{1D}(z_1)\rangle|\phi_j^{1D}(z_2)\rangle + |\phi_i^{1D}(z_2)\rangle|\phi_j^{1D}(z_1)\rangle}{\sqrt{2}} & \text{if } i \neq j \\ |\phi_i^{1D}(z_1)\rangle|\phi_j^{1D}(z_2)\rangle & \text{if } i = j \end{cases}, \quad (\text{A.15})$$

donde z_j es la coordenada del electrón $j = 1, 2$. En este problema, nuevamente se utilizó una distribución exponencial para los *knots*, pero los límites del intervalo son $Z_{max} = -Z_{min} = 1000 \text{ nm}$, de esta forma aseguramos que la función de onda satisfaga las condiciones de contorno.

Bibliografía

- [1] Abe D Yoffe. En: *Advances in Physics* 42.2 (1993), págs. 173-262.
- [2] U Woggon y SV Gaponenko. En: *physica status solidi (b)* 189.2 (1995), págs. 285-343.
- [3] Louis Brus. En: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 22.9 (1986), págs. 1909-1914.
- [4] Garnett W Bryant. En: *Physical Review B* 37.15 (1988), pág. 8763.
- [5] Yosuke Kayanuma. En: *Physical Review B* 38.14 (1988), pág. 9797.
- [6] T Takagahara. En: *Physical Review B* 47.8 (1993), pág. 4569.
- [7] Lin Wang Wang y Alex Zunger. En: *The Journal of Physical Chemistry* 98.8 (1994), págs. 2158-2165.
- [8] M Lannoo, C Delerue y G Allan. En: *Physical review letters* 74.17 (1995), pág. 3415.
- [9] Alberto Franceschetti y Alex Zunger. En: *Physical review letters* 78.5 (1997), pág. 915.
- [10] Serdar Ögüt, James R Chelikowsky y Steven G Louie. En: *Physical Review Letters* 79.9 (1997), pág. 1770.
- [11] AR Kortan y col. En: *Journal of the American Chemical Society* 112.4 (1990), págs. 1327-1332.
- [12] HS Zhou y col. En: *The Journal of Physical Chemistry* 97.4 (1993), págs. 895-901.
- [13] A Mews y col. En: *The Journal of Physical Chemistry* 98.3 (1994), págs. 934-941.
- [14] Joseph W Haus y col. En: *Physical Review B* 47.3 (1993), pág. 1359.
- [15] D Schooss y col. En: *Physical Review B* 49.24 (1994), pág. 17072.
- [16] Garnett W Bryant. En: *Physical Review B* 52.24 (1995), R16997.
- [17] L Banyai y col. En: *Physical Review B* 45.24 (1992), pág. 14136.
- [18] Leo P Kouwenhoven, DG Austing y Seigo Tarucha. En: *Reports on Progress in Physics* 64.6 (2001), pág. 701.
- [19] JM Ferreyra y CR Proetto. En: *Physical Review B* 57.15 (1998), pág. 9061.
- [20] JM Ferreyra y CR Proetto. En: *Physical Review B* 60.15 (1999), pág. 10672.
- [21] Kai Chang y Jian-Bai Xia. En: *Physical Review B* 57.16 (1998), pág. 9780.
- [22] Daniel Loss y David P DiVincenzo. En: *Physical Review A* 57.1 (1998), pág. 120.
- [23] Eliana Biolatti y col. En: *Physical review letters* 85.26 (2000), pág. 5647.
- [24] Xiaoqin Li y col. En: *Science* 301.5634 (2003), págs. 809-811.
- [25] Hubert J Krenner y col. En: *New Journal of Physics* 7.1 (2005), pág. 184.
- [26] Andreas Muller y col. En: *Applied physics letters* 84.6 (2004), págs. 981-983.
- [27] A Zrenner y col. En: *Nature* 418.6898 (2002), pág. 612.

- [28] Baptiste Billaud, Marco Picco y Tuong T Truong. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 21.39 (2009), pág. 395302.
- [29] Frank Stern y Sankar Das Sarma. En: *Physical Review B* 30.2 (1984), pág. 840.
- [30] Lok C Lew Yan Voon y Morten Willatzen. *The p method: electronic properties of semiconductors*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [31] Peter Y Yu y Manuel Cardona. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. Springer, 2010.
- [32] Craig Pryor. En: *Physical Review B* 57.12 (1998), pág. 7190.
- [33] Oliver Stier, Marius Grundmann y Dieter Bimberg. En: *Physical Review B* 59.8 (1999), pág. 5688.
- [34] VV Ravi Kishore y col. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 24.13 (2012), pág. 135302.
- [35] VV Ravi Kishore, B Partoens y FM Peeters. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 26.9 (2014), pág. 095501.
- [36] Gerald Bastard. En: (1990).
- [37] Wenjie Yao y col. En: *Journal of nanoscience and nanotechnology* 10.11 (2010), págs. 7612-7615.
- [38] Momme Winkelkemper, Andrei Schliwa y Dieter Bimberg. En: *Physical Review B* 74.15 (2006), pág. 155322.
- [39] Jingbo Li y Jian-Bai Xia. En: *Physical Review B* 61.23 (2000), pág. 15880.
- [40] W Jaskolski y Garnett W Bryant. En: *Physical Review B* 57.8 (1998), R4237.
- [41] Alejandro Ferrón, Pablo Serra y Omar Osenda. En: *Physical Review B* 85.16 (2012), pág. 165322.
- [42] Alejandro Ferrón, Pablo Serra y Omar Osenda. En: *Journal of Applied Physics* 113.13 (2013), pág. 134304.
- [43] Hongtao Jiang y Jasprit Singh. En: *Physical Review B* 56.8 (1997), pág. 4696.
- [44] Sean Washburn y Richard A Webb. En: *Advances in Physics* 35.4 (1986), págs. 375-422.
- [45] NAJM Kleemans y col. En: *Physical review letters* 99.14 (2007), pág. 146808.
- [46] F Ding y col. En: *Physical Review B* 82.7 (2010), pág. 075309.
- [47] Michihisa Yamamoto y col. En: *Nature Nanotechnology* 7.4 (2012), págs. 247-251.
- [48] Izhar Neder y col. En: *Nature* 448.7151 (2007), pág. 333.
- [49] Radu Ionicioiu, Paolo Zanardi y Fausto Rossi. En: *Physical Review A* 63.5 (2001), pág. 050101.
- [50] W. G. van der Wiel y col. En: *Rev. Mod. Phys.* 75 (1 2002), págs. 1-22.
- [51] P Pieri, D Neilson y GC Strinati. En: *Physical Review B* 75.11 (2007), pág. 113301.
- [52] Vikram V. Deshpande y Marc Bockrath. En: *Nat. Phys.* 4 (4), págs. 314-318.
- [53] Wen Lei y col. En: *Physical review letters* 105.17 (2010), pág. 176804.
- [54] RG Nazmitdinov y col. En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 45.20 (2012), pág. 205503.

- [55] S Nadj-Perge y col. En: *Physical review letters* 108.16 (2012), pág. 166801.
- [56] J Avron, I Herbst y B Simon. En: *Physical Review Letters* 39.17 (1977), pág. 1068.
- [57] JA Salas y K Varga. En: *Physical Review A* 89.5 (2014), pág. 052501.
- [58] YK Ho. En: *Physics Letters A* 230.3-4 (1997), págs. 190-196.
- [59] Ch Sikorski y U Merkt. En: *Physical review letters* 62.18 (1989), pág. 2164.
- [60] MA Reed y col. En: *Physical Review Letters* 60.6 (1988), pág. 535.
- [61] R Buczko y F Bassani. En: *Physical Review B* 54.4 (1996), pág. 2667.
- [62] M Bylicki y W Jaskólski. En: *Physical Review B* 60.23 (1999), pág. 15924.
- [63] M Bylicki y col. En: *Physical Review B* 72.7 (2005), pág. 075434.
- [64] Y Sajeev y N Moiseyev. En: *Physical Review B* 78.7 (2008), pág. 075316.
- [65] Alba Y Ramos y Omar Osenda. En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 47.1 (2013), pág. 015502.
- [66] S Bednarek y col. En: *Physical Review B* 68.4 (2003), pág. 045328.
- [67] Daniele Baretin y col. En: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 19.5 (2013), págs. 1-9.
- [68] Michael S Shur. *Handbook series on semiconductor parameters*. Vol. 1. World Scientific, 1996.
- [69] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2011.
- [70] Paolo Zanardi y Nikola Paunković. En: *Physical Review E* 74.3 (2006), pág. 031123.
- [71] Karol Życzkowski y col. En: *Physical Review A* 58.2 (1998), pág. 883.
- [72] Ramos Alba Y. «Control de estados cuánticos en puntos cuánticos mediante campos magnéticos». Tesis doct. Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, 2015.
- [73] Nimrod Moiseyev. En: *Physics reports* 302.5 (1998), págs. 212-293.
- [74] Milton Abramowitz, Irene A Stegun y col. En: *Applied mathematics series* 55.62 (1966), pág. 39.
- [75] Reinhold Egger y Hermann Grabert. En: *Physical Review B* 55.15 (1997), pág. 9929.
- [76] F Cavaliere y col. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 26.50 (2014), pág. 505301.
- [77] Federico M Pont, Annika Bande y Lorenz S Cederbaum. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 28.7 (2016), pág. 075301.
- [78] B. Sutherland. En: *J. Math. Phys.* 12 (1971), pág. 246.
- [79] B. D. Simons, P. A. Lee y B. L. Altshuler. En: *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993), pág. 4122.
- [80] B. D. Simons y B. L. Altshuler. En: *Phys. Rev. B* 48 (1993), pág. 5422.
- [81] H. Azuma e I. Satoshi. En: *Phys. Lett. B* 331 (1994), pág. 107.
- [82] M. V. N. Murthy y R. Shankar. En: *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994), pág. 3331.
- [83] A. P. Polychronakos. En: *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993), pág. 2329.
- [84] A. P. Polychronakos. En: *J. Phys. A* 39 (2006), pág. 12793.

- [85] N. Killoran, M. Cramer y M. B. Plenio. En: *Phys. Rev. Lett.* 112 (2014), pág. 150501.
- [86] Iemini y R. O. Vianna. En: *Phys. Rev. A* 87 (2013), pág. 022327.
- [87] N. Helbig, I. V. Tokatly y A. Rubio. En: *Phys. Rev. A* 81 (2010), pág. 022504.
- [88] O. Osenda y col. En: *J. Phys. A: Math. Theor.* 48 (2015), pág. 485301.
- [89] C. L. Benavides-Riveros, I. V. Toranzo y J. S. Dehesa. En: *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47 (2014), pág. 195503.
- [90] P. Kościak y A. Okopińska. En: *Few-Body Syst.* 54 (2013), pág. 1637.
- [91] H. Katsura e Y. Hatsuda. En: *J. Phys. A: Math. Theor.* 40 (2007), pág. 13931.
- [92] C. Schilling. En: *Phys. Rev. A* 88 (2013), pág. 042105.
- [93] M. Moshinsky. En: *Am. J. Phys.* 36 (1968), pág. 52.
- [94] F. Calogero. En: *J. Math. Phys.* 10 (1969), pág. 2191.
- [95] F. Calogero. En: *J. Math. Phys.* 12 (1971), pág. 419.
- [96] C. L. Benavides-Riveros, J. M. Gracia-Bondía y M. Springborg. En: *Phys. Rev. A* 88 (2013), pág. 022508.
- [97] R. Chakraborty y D. A. Mazziotti. En: *Phys. Rev. A* 89 (2014), pág. 042505.
- [98] C. Schilling. En: *Phys. Rev. A* 91 (2015), pág. 022105.
- [99] D. Manzano y col. En: *J. Phys. A: Math. Theor.* 43 (2010), pág. 275301.
- [100] O. Osenda y P. Serra. En: *Phys. Rev. A* 75 (2007), pág. 042331.
- [101] B. Zeng, H. Zhai y Z. Xu. En: *Phys. Rev. A* 66 (2002), pág. 042324.
- [102] S. Iblisdir, J. I. Latorre y R. Orús. En: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), pág. 060402.
- [103] M. Haque, O. Zozulya y K. Schoutens. En: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), pág. 060401.
- [104] Michael A Nielsen e Isaac Chuang. *Quantum computation and quantum information*. 2002.
- [105] E. R. Davidson. *Reduced Density Matrices in Quantum Chemistry*. Academic Press, New York, 1976.
- [106] A. R. Plastino, D. Manzano y J. S. Dehesa. En: *Europhys. Lett.* 86 (2009), pág. 20005.
- [107] F. M. Pont y col. En: *Phys. Rev. A* 81 (2010), pág. 042518.
- [108] V. Alba, L. Tagliacozzo y P. Calabrese. En: *Phys. Rev. B* 81 (2010), pág. 060411.
- [109] P. Calabrese, M. Mintchev y E. Vicari. En: *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011), pág. 020601.
- [110] S. Santra y col. En: *Phys. Rev. B* 90 (2014), pág. 245128.
- [111] M. Garagiola y col. En: *Phys. Rev. A* 94 (2016), pág. 042115.
- [112] P. J. Forrester y S. O. Warnaar. En: *Bull. Am. Math. Soc.* 45 (2008), pág. 489.
- [113] A. Khare. En: *Phys. Lett. A* 245 (1998), pág. 14.
- [114] K. J. H. Giesbertz y R. van Leeuwen. En: *J. Chem. Phys.* 139 (2013), pág. 104109.
- [115] O. Osenda, P. Serra y S. Kais. En: *Int. J. Quantum Inf* 6 (2008), pág. 303.
- [116] M. Altunbulak y A. Klyachko. En: *Commun. Math. Phys.* 282 (2008), pág. 287.
- [117] P. Kościak. En: *Phys. Lett. A* 379 (2015), pág. 293.

- [118] L. Amico y col. En: *Rev. Mod. Phys.* 80 (2008), pág. 517.
- [119] O. Osenda y G.A. Raggio. En: *Phys. Rev. A* 72 (2005), pág. 064102.
- [120] P. Serra y S. Kais. En: *Chem. Phys. Lett.* 319 (2000), pág. 273.
- [121] A. Hamma y col. En: *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), pág. 210602.
- [122] J. Cui y col. En: *Phys. Rev. B* 88 (2013), pág. 125117.
- [123] F. Franchini y col. En: *Phys. Rev. X* 4 (2014), pág. 041028.
- [124] P. Kościk y A. Okopińska. En: *Phys. Lett. A* 374 (2010), pág. 3841.
- [125] K. Balzer y col. En: *J. Phys. Conf. Ser.* 35 (2006), pág. 209.
- [126] D. F. V. James. En: *Appl. Phys. B* 66 (1998), pág. 181.
- [127] F. G. Tricomi. *Integral Equations*. Interscience Publishers, London, 1957.
- [128] E. Wigner. En: *Phys. Rev.* 46 (1934), pág. 1002.
- [129] D. J. Wineland y col. En: *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987), pág. 2935.
- [130] M. Drewsen. En: *Physica B* 460 (2015), pág. 105.
- [131] F. Cavaliere y col. En: *New J. Phys.* 11 (2009), pág. 123004.
- [132] E. Y. Andrei y col. En: *Phys. Rev. Lett.* 60 (1998), pág. 2765.
- [133] B. A. Piot y col. En: *Nat. Phys.* 4 (2008), pág. 936.
- [134] S. Kalliakos y col. En: *Nat. Phys.* 4 (2008), pág. 467.
- [135] C. Ellenberger y col. En: *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006), pág. 126806.
- [136] A. Singha y col. En: *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010), pág. 246802.
- [137] L. H. Kristinsdóttir y col. En: *Phys. Rev. B* 83 (2011), pág. 041101.
- [138] J. S. Meyer y K. A. Matveev. En: *J. Phys. Condens. Mat.* 21 (2009), pág. 023203.
- [139] V. V. Deshpande y M. Bockrath. En: *Nat. Phys.* 4 (2008), pág. 314.
- [140] A. Melzer. En: *Phys. Rev. E* 67 (2003), pág. 016411.
- [141] K. Jauregui, W. Häusler y B. Kramer. En: *Europhys. Lett.* 24 (1993), pág. 581.
- [142] A. D. Güçlü y col. En: *Phys. Rev. B* 77 (2008), 041301(R).
- [143] C. B. Mendl, F. Malet y P. Gori-Giorgi. En: *Phys. Rev. B* 89 (2014), pág. 125106.
- [144] F. M. Gambeta y col. En: *Europhys. Lett.* 107 (2014), pág. 47010.
- [145] F. Cavaliere y col. En: *J. Phys. Condens. Mat.* 26 (2014), pág. 505301.
- [146] F. Cavaliere y col. En: *J. Phys. Condens. Mat.* 27 (2015), pág. 425301.
- [147] F. Cavaliere y col. En: *Phys. Rev. B* 92 (2015), pág. 235128.
- [148] I. Kylänpää y col. En: *Phys. Rev. B* 94 (2016), pág. 115417.
- [149] J. S. Dehesa y col. En: *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 45 (2012), pág. 239501.
- [150] I. V. Toranzo y col. En: *J. Phys. A: Math. Theor.* 48 (2015), pág. 475302.
- [151] S. Kais, D. R. Herschbach y R. D. Levine. En: *J. Chem. Phys.* 91 (1989), pág. 7791.
- [152] P. Kościk. En: *Few-Body Syst.* 56 (2015), pág. 107.
- [153] M.L. Glasser e I. Nagy. En: *Phys. Lett. A* 377 (2013), pág. 2317.
- [154] Eloisa Cuestas y col. En: *Phys. Lett. A* 381.27 (2017), págs. 2153-2160.

-
- [155] Cuestas Eloisa. «Modelado de sistemas cuánticos de pocos cuerpos». Tesis doct. Facultad de Matemática, Astronomía y Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, 2016.
- [156] M. P. Avakian y col. En: *Phys. Lett. A* 124 (1987), pág. 233.
- [157] H Bachau y col. En: *Reports on Progress in Physics* 64.12 (2001), pág. 1815.
- [158] Carl De Boor. *A practical guide to splines*. Vol. 27. Springer-Verlag New York, 1978.
- [159] Qiao Hao-Xue, Shi Ting-Yun y Li Bai-Wen. En: *Communications in Theoretical Physics* 37.2 (2002), pág. 221.