

Sistemas de pocos cuerpos en un entorno del umbral
del continuo: estados ligados, resonancias, estados
Borromeanos y de Efimov

por

Federico Manuel Pont

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

Doctor en Física

de la

Universidad Nacional de Córdoba

Marzo de 2010

©FaMAF- UNC 2010

Director: Dr. Pablo Serra

Resumen

En esta Tesis se presenta un estudio de varios sistemas cuánticos cuyo común denominador es que poseen uno o más estados ligados cerca del umbral de energía del continuo. En este aspecto se analizaron los diagramas de estabilidad de varios sistemas de dos y tres partículas ligadas por diferentes potenciales centrales, tanto externos como de interacción entre partículas, determinando las zonas en que los sistemas son capaces de ligar tres, dos, una, o ninguna partícula. Se hace particular énfasis en sistemas de cargas que presentan enlace Borromeo o Efecto Efimov en cierta región de los parámetros donde son capaces de ligar tres partículas pero no dos. Se demuestra mediante cálculos variacionales de alta precisión que algunos sistemas de partículas cargadas inmersas en plasmas, en la aproximación de Debye-Hückel, presentan Efecto Efimov y enlace Borromeo. Se analizaron también sistemas con estados ligados cuya energía cruza el umbral del continuo al variar los parámetros del Hamiltoniano. En general estos estados son absorbidos por el continuo o generan una resonancia que tiene energías por arriba del valor de umbral. Se investigaron sistemas de una partícula tipo pozo barrera que presentan resonancias utilizando métodos variacionales y escaleo complejo. En un modelo de punto cuántico con dos electrones se analizó como varían la densidad de estados, vida media y distintos observables con la intensidad de la interacción Coulombiana entre electrones. Se propuso una definición de la entropía de información (von Neumann) que puede asignarse a una resonancia y se desarrolló un método basado en dilataciones analíticas para calcular el valor de las entropías.

Palabras Clave: Mecánica Cuántica, Aproximaciones Variacionales, Estados ligados, Resonancias, Efecto Efimov, Entropía de von Neumann.

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

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

31.15.ac, High-precision calculations for few-electron (or few-body) atomic systems.

31.15.xt, Variational techniques.

36.10.-k, Exotic atoms and molecules (mesons, antiprotons and other unusual particles).

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

Agradecimientos

Primero, antes de comenzar, aviso al lector que el título de esta sección es algo inadecuado porque es mi deseo incluir más que agradecimientos solamente.

La conclusión de esta Tesis esta plagada de fuertes sentimientos personales, como el final de cualquier etapa importante en la vida de una persona. Sentimientos, a veces, encontrados. La física es para mí una pasión difícil de explicar. Por ella trabajé durante cinco años quitándole tiempo a muchas otras actividades y, más importante aún, a muchas personas. A todas ellas les debo todo lo que no soy como físico y se los agradezco profundamente. Trabajé con calor, con frío, con red, sin red, con cluster y sin él, con mucha gente y otras solo con Belén, con mate y café, con humor, sin humor, y de mal humor (mis disculpas a los afectados), etc., etc., etc. La verdad es que he trabajado en muchas condiciones, pero siempre, siempre, trabajé con ganas.

Muchas ganas.

A veces vapuleadas por las caídas anímicas grupales de la Of. 328, que resolvíamos con una buena sesión de terapia no ortodoxa. Lo importante era sacar del sistema lo que teníamos dentro para seguir adelante, por esto doy gracias a las gentes de la 328 y visitantes.

Contando todas las otras actividades y sacrificios que hecho para quedarme estudiando, programando, pensando, laburando, etc. Los días que me gaste dándole vueltas a un problema que no quería salir. La cantidad innumerable de *papers* y libros que leí. La infinidad de ideas que se me ocurrieron para desarrollar. Contando todo eso, es que digo que la física es para mí una pasión. No encuentro otra forma de explicarlo.

A la Facultad como comunidad e institución debo agradecerle y mucho. La etapa de mí doctorado estuvo plagada de tintes políticos de la vida universitaria que me invitaron a intentar comprender un poco mejor el mundo en que vivimos. Fui consejero de esta Facultad durante 2 años en los que aprendí muchísimo, sobre cuestiones que no se enseñan en las aulas. Allí me enfrenté con gente, luché, voté, propuse, discutí, me opuse, etc. Pero, también encontré espacio. Lugar para poner una fichita de cambio. Cambio que ahora entiendo como un proceso de tiempos largos y no algo instantáneo. Gracias a los que hicieron posible ese lugar, con todo lo que esto significa.

A los amigos, doctorandos, estudiantes y ex-compañeros que siempre estuvieron *por ahí*.

A los integrantes del Grupo de Teoría de la Materia Condensada con quienes día a día enfrenté y resolví problemas, asistí a seminarios de grupo, discutí, trabajé y me tomé unos

buenos vasos de cerveza (eso solo los viernes, e incluyo al resto de los no pertenecientes al grupo). En especial a quería agradecer a Alejandro Ferrón y a Omar Osenda por ser como son.

No quiero dejar de agradecer especialmente a mi director Pablo Serra, a quien debo mucho más que logros académicos. Por lo académico, por enseñarme a trabajar duro y parejo. Por aguantarme cuando parecía que no llegaba. Por transmitirme sus conocimientos y vivencias para sacar adelante esta Tesis. Por recomendarme sobre películas, libros, lugares, relaciones personales, actitudes, políticas y otras actividades que constituyen la parte humana de una persona. La completan.

A mi familia. Mi madre y mi padre que siempre hicieron lo posible para que pueda seguir mis sueños, conseguir mis metas. Gracias, se los debo a ambos. A mis tres hermanos con los que he perdido mucho contacto durante estos años, pero siempre se esfuerzan en comprender mi manera de ser. A La familia política, que siempre fue un soporte fundamental para Belén y para mí.

Finalmente quiero agradecer a Belén. Por ser mi compañera incansable en esta aventura que hemos vivido durante 5 años y por los días interminables que me bancó. Por ser quien me conectó a tierra cuando se me estaba por saltar la chispa. Por ser la mujer con quien compartiré de ahora en adelante esta odisea llamada vida. Te amo. Gracias.

Agradecimientos Institucionales: A la Facultad de Matemática Astronomía y Física por facilitarme el lugar de trabajo e instalaciones para el desarrollo de la presente tesis. Al Grupo de Teoría de la Materia Condensada por aceptarme entre sus miembros. Al CONICET por la financiación de mis estudios de doctorado mediante el estipendio mensual de beca doctoral.

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	v
1. Introducción	3
1.1. Sistemas débilmente ligados	3
1.2. Estados Borromeanos	6
1.3. Resonancias	10
1.4. Efecto Efimov	13
1.5. Aportes realizados en esta Tesis	16
2. Sistemas de 2 partículas idénticas en un potencial externo	19
2.1. Introducción y Definiciones	19
2.2. Resultados Generales sin especificar potenciales	22
2.2.1. Existencia de la línea 2-0	25
2.2.2. Exponente $\alpha_{\mathcal{H}}$	26
2.3. Ejemplos de los tres tipos de diagramas	28
2.4. Potenciales Coulombianos de una partícula	31
2.4.1. Existencia de líneas críticas para una gran clase de potenciales W .	37
2.5. Conclusiones del capítulo	39
3. Tres cargas unitarias con interacciones apantalladas	41
3.1. Introducción	41
3.2. Hamiltoniano de tres partículas	43
3.3. Método variacional de Rayleigh-Ritz	45
3.4. Diagramas de Estabilidad	47
3.5. Efecto Efimov	56
3.6. Comportamiento crítico cerca del umbral	60
3.7. Conclusiones del capítulo	64
4. Sistemas simétricos de tres partículas cargadas con interacciones apantalladas	65
4.1. Hamiltoniano reescalado	65
4.2. Dos partículas no interactuantes ligadas a un núcleo de masa finita	66

4.2.1. Análisis del comportamiento crítico	68
4.3. Dos partículas idénticas de carga q	75
4.3.1. Energías y Apantallamientos críticos para Li^+ y He	77
4.4. Efecto Efimov	78
4.5. Conclusiones del capítulo	80
5. Resonancias en sistemas dos electrones	83
5.1. Resonancias en sistemas de una partícula	83
5.1.1. ¿Qué es una resonancia?	83
5.1.2. Resonancias en el espectro variacional de Rayleigh-Ritz	85
5.1.3. Escaleo complejo	88
5.2. Entrelazamiento y puntos cuánticos	95
5.3. Modelo para un Punto Cuántico	96
5.4. Densidad de Estados en un entorno de una resonancia	100
5.4.1. Densidad y tamaño de la base	103
5.5. Fidelidad y Doble Ortogonalidad	106
5.6. Entropía de una resonancia	109
5.7. Conclusiones del capítulo	116
6. Conclusiones y Perspectivas	121
A. Elementos de matriz con potencial de Yukawa en base tipo Hylleraas	129
A.1. Integrales de funciones tipo Hylleraas	133
B. Ecuaciones de Fadeev y el Efecto Efimov	137
B.1. Coordenadas Hiperesféricas	137
B.2. Ecuaciones de Fadeev	138
B.3. Potenciales unidimensionales con alcance $\frac{\Lambda}{r^2}$	140
B.3.1. Caso repulsivo: $\Lambda > 0$	141
B.3.2. Caso Atractivo: $\Lambda < 0$	143
C. Elementos de Matriz modelo de 1 partícula	149
D. Elementos de Matriz para el Modelo de punto cuántico	151
E. Significado Geométrico de la función \mathcal{G}	153
F. Autovectores a Izquierda, Matrices simétricas y producto-C	155
G. La densidad de estados cerca de la resonancia	159
H. Publicaciones	161

Capítulo 1

Introducción

1.1. Sistemas débilmente ligados

Los sistemas débilmente ligados normalmente pierden sus cualidades particulares y entran en un régimen de comportamiento universal clasificado por unas pocas variables globales del problema como la dimensión, el momento angular, etc.

El concepto de *estado ligado* en mecánica cuántica está relacionado con uno de los rasgos que más la diferencian de la mecánica clásica. Sin embargo, en muchas situaciones las dos teorías se comportan en forma similar. En un sistema clásico de varias partículas interactuando suele ocurrir que las mismas se mantienen localizadas en una región del espacio. Aquí el concepto de localización espacial va acompañado intrínsecamente de la noción de tiempo, ya que, aunque no lo hemos especificado, las partículas deben permanecer localizadas *ad infinitum*. Lo que ocurre normalmente es que la interacción entre partículas define un *pozo* de potencial en el cual quedan atrapadas. La configuración del sistema tiene menor energía que las barreras del pozo, y las partículas se mantienen localizadas dentro del mismo. La situación equivalente en mecánica cuántica tiene algunas similitudes. Como es bien sabido, la energía del sistema (para estados localizados) es un parámetro que podemos incorporar exteriormente en la forma de un estado inicial. Sin embargo para que el sistema permanezca localizado, el estado debe poder descomponerse completamente como una combinación de estados especiales: los autoestados o estados ligados. Los estados ligados corresponden a configuraciones que permanecen localizadas por tiempo infinito y conservan la energía. Vemos entonces que un estado localizado es una combinación lineal de estados ligados. Esto es cierto siempre y cuando el sistema evolucione el tiempo suficiente. Si lo hacemos, las posibles contribuciones del estado inicial sobre configuraciones no ligadas pierden coherencia y solo restan las contribuciones sobre estados localizados. Estas contribuciones, al igual que los modos normales en una cuerda vibrante, no interfieren entre sí y conservan coherencia por tiempo infinito.

Quizás la diferencia más popular entre el problema clásico y cuántico sea la *probabilidad no nula* de atravesar una barrera de potencial en mecánica cuántica. Las partículas confinadas en una región del espacio por barreras de potencial pueden escapar aún cuando

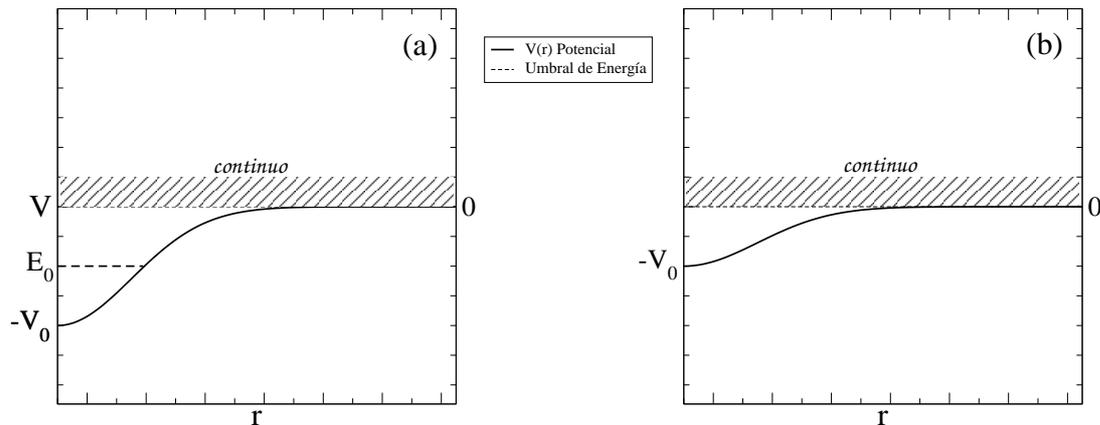


Figura 1.1: Esquema de un pozo de potencial: (a) Con un estado ligado y (b) uno de la misma forma, pero que no tiene la profundidad suficiente para ligar un estado. El caso (b) en mecánica clásica tiene estados localizados, si estos tienen energías por debajo de cero y arriba de $-V_0$.

su energía es menor que la de la barrera. Este tema es realmente muy interesante y en la presente Tesis nos encontraremos con él al calcular resonancias en puntos cuánticos. El concepto de Resonancias aparece en muchas ramas de la física de modo que hacemos una rápida definición para orientar las ideas, dejando una descripción más completa para el capítulo correspondiente. Dentro de los que venimos explicando, llamaremos resonancias a ciertos estados cuánticos del sistema que, si bien no son estados ligados, se mantienen localizados en alguna región del espacio un *tiempo finito*, luego del cual se considera que el sistema puede describirse como dos sistemas por separado. Este *tiempo* es básicamente el tiempo que demora el sistema en atravesar las barreras que lo mantenía localizado. Las resonancias en física cuántica son elementos complejos de analizar por su carácter dependiente del tiempo de evolución del sistema.

Otra particularidad en la que se quiere hacer incapié en esta introducción es el hecho de que el sistema cuántico puede no soportar estados ligados. Evidentemente esto también es posible en mecánica clásica, si no tenemos ningún pozo o barrera que impida que las partículas se separen infinitamente. Lo interesante del caso cuántico es que esto puede ocurrir aún cuando exista un pozo de potencial con valores de energéticos por debajo de cero (siendo cero la energía de las partículas infinitamente separadas). La conclusión general es que para que el sistema soporte estados ligados los pozos de potencial tienen que ser *lo suficientemente atractivos* como para lograr localizar las partículas constituyentes (ver Figura 1.1).

Durante el desarrollo de la Tesis estudiaremos varios tipos de sistemas cuánticos, en muchos de los cuales la capacidad de soportar estados ligados depende de las variables del problema. La línea conductora que une los capítulos de la Tesis son las propiedades de los estados y energías de un sistema cuántico cuyas variables son *sintonizadas a valores*

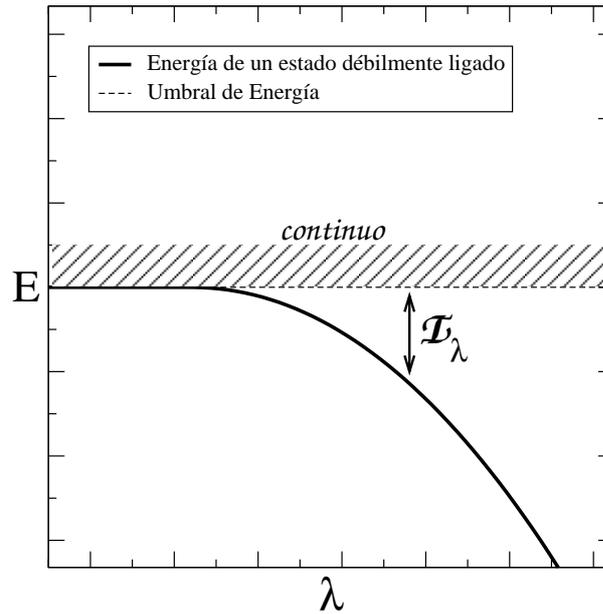


Figura 1.2: Energía de un estado ligado como función de un parámetro del Hamiltoniano.

críticos. Los valores críticos son aquellos en que la configuración del sistema tiene una energía muy cercana a la energía de uno o varios subsistemas del mismo. En esta idea global un subsistema puede consistir en un subconjunto de partículas del sistema original o también a todas ellas por separado (energía cero). En esta situación de *degeneración*, la física nos indica que la configuración menos energética es la más estable. Una pregunta que surge es : ¿Como ocurre la transición entre el sistema completo y el sistema separado en subsistemas ?. Sin duda que las respuestas posibles a esta pregunta son muchas y trataremos de encontrarlas, al menos parcialmente, a lo largo de la Tesis.

La situación recién descrita puede ser mínimamente formalizada considerando que un sistema cuántico en general está descrito por un Hamiltoniano \mathcal{H} , el cual tiene un parámetro λ que modifica las interacciones. Este parámetro nos indica la profundidad de los pozos de potencial involucrados en el problema. El valor de λ entonces modifica el sistema de forma que aumenta o disminuya la cantidad de estados ligados y sus energías. En particular, focalizaremos la atención en los casos en que un estado ligado alcanza una energía de umbral E_{umbral} , correspondiente a un subsistema. Cuando esto ocurre, el estado cambia su carácter de localizado o no. En este proceso los estados ligados siempre tienen asignada una energía que llamaremos de ionización o disociación $\mathcal{I}_\lambda = E_\lambda - E_{umbral}$ (ver Figura 1.2) . El valor umbral podemos definirlo, como la energía de uno o varios subsistemas con menor cantidad de partículas. Lo que sucede entonces es que al alcanzar, o superar, el umbral de energía la configuración más favorable para el sistema (la de menor energía) es *separarse* en subsistemas. Puede suceder que algunas partículas queden ligadas y otras libres o directamente todas ellas se separan infinitamente.

Nos referiremos entonces como *débilmente ligados* a los estados ligados del sistema cuya energía esta cerca del valor umbral de energía. Existe mucha literatura referida a los distintos fenómenos que ocurren cuando un estado esta débilmente ligado [1, 2, 3, 4, 5, 6]. Desde el punto de vista más formal, la función de onda de tales estados sufre cambios muy profundos a tal punto que puede dejar de ser normalizable en el sentido usual de la mecánica cuántica. Sin embargo, y desde un punto de vista más pragmático, muchos sistemas se mantienen localizados el tiempo suficiente como para ser medidos y caracterizados antes que el sistema deje de ser una sola entidad (resonancias). El comportamiento de la energía cerca del umbral es también un tema que ha sido atacado desde muchos ángulos. Normalmente la energía de ionización del sistema se hace no analítica cerca del umbral y puede definirse una forma asintótica,

$$\mathcal{I}_\lambda = E_\lambda - E_{umbral} \approx -a|\lambda - \lambda_c|^\alpha \quad \lambda \rightarrow \lambda_c^- \quad (1.1)$$

en donde λ_c indica el valor de λ para el cual la energía de ionización se hace cero. La notación $\lambda \rightarrow \lambda_c^-$ indica que nos acercamos al valor crítico desde la región con estados ligados. La energía de umbral E_{umbral} puede ser también una función de λ . Los exponentes de los términos dominantes (α en este caso) de estas expansiones son cruciales para clasificar a los sistemas. De manera similar a lo que ocurre que en mecánica estadística, los exponentes definen la clase de universalidad del sistema cerca al umbral. Veremos luego que esta comparación con la mecánica estadística no es casualidad y que las similitudes no terminan allí. En el caso de la mecánica cuántica los parámetros que definen la universalidad incluyen la dimensión del problema, el momento angular, la cantidad de partículas involucradas, la forma de las interacciones (corto o largo alcance), etc. Particularmente podemos decir que el comportamiento crítico cerca del umbral en potenciales esféricamente simétricos de una partícula ha sido estudiado en detalle. La dependencia con la dimensión espacial fue tratada por Klaus y Simon [3], mientras que respecto del momento angular (como un parámetro continuo), por Lassaut et al [1].

Las condiciones para la existencia de estados ligados en sistemas de pocos cuerpos también ha sido un tema de investigación relevante desde hace ya muchas décadas [7, 8, 9, 10, 11, 12]. Hoy en día la existencia de un estado ligado y el comportamiento cerca de la energía de umbral en sistemas de un cuerpo en potenciales externos, está bien documentado. Cotas superiores e inferiores al número de estados ligados para sistemas de una partícula se vienen obteniendo en forma sistemática desde los trabajos pioneros de Jost y Pais [13] y Bargmann [14]. En referencia a las energías de los sistemas de pocos y N-cuerpos, podemos decir que hay una cantidad considerable de trabajos realizados [8, 7, 9] (y referencias allí citadas) para obtener cotas superiores e inferiores a las mismas. El ámbito numérico ha hecho también un gran aporte al área con métodos para evaluar las energías y los valores de los parámetros críticos para un cuerpo [15] y para pocos cuerpos [16, 6].

1.2. Estados Borromeanos

Un sistema de varias partículas presenta estados ligados Borromeanos cuando tiene al menos un estado ligado y todos los posibles subsistemas son inestables.



Figura 1.3: Paradójicamente, el escudo heráldico de la Familia Borromeo representado en el jarrón de la fotografía (tomada en el castillo de la familia en isla Bella, lago Maggiore, Italia), no representa la topología correcta. Varios estudios estiman que los alfareros no realizaban el logo con la topología correcta por las dificultades técnicas que implica entrelazar tres anillos en forma Borromeana sobre un plano. De hecho esto es estrictamente imposible si los anillos son planos también.

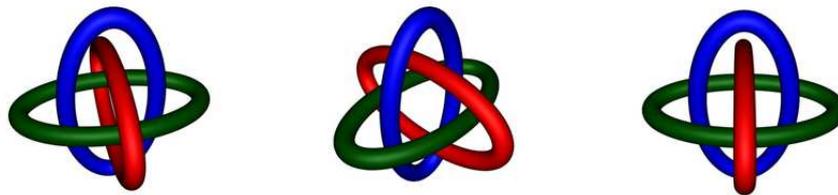


Figura 1.4: Vista 3D de los anillos borromeanos que muestra la topología de los mismos.

El Nombre de estos estados cuánticos viene dado por el escudo Heráldico de la familia italiana Borromeo (Figura 1.3). Los anillos representaban la unión de la familia Borromeo con otras dos familias que gobernaban el norte de Italia, la Visconti y Medici. Curiosamente, muchos de los escudos de la familia, representados en jarrones, monedas y demás artículos no presentan la topología correcta de los anillos (Figura 1.4). Sin embargo no es el único lugar en donde estos anillos han aparecido a lo largo de la historia, hay datos de ellos desde los vikingos (Figura 1.5) hasta los tiempos contemporáneos (en forma de logos de empresas (Figura 1.6)), pasando por obras de arte de reconocidos artistas de la talla de Boticelli o Miguel Angel (Figura 1.7). En la mayoría de los casos la motivación para su uso ha sido la sinergia representada por los tres anillos enlazados de forma tal que, si uno se corta los dos restantes quedan libres o pierden su *poder* conjunto.

El mundo de la físicos, como parte de la sociedad, claramente no ha quedado libre de caer en la tentación y utilizar el atractivo concepto topológico de los anillos para describir algunos sistemas. Los primeros sistemas cuánticos de pocos cuerpos descubiertos que presentaban enlace Borromeano se encontraron en física nuclear. Más específicamente el estudio de Halos [17] en núcleos débilmente ligados fue el ámbito en que nació la



Figura 1.5: Una de las más antiguas apariciones de los anillos en las runas nórdicas, el Valknut. Esta es una imagen de la piedra de Store Hammar en la que se representa un sacrificio. Hay varias teorías sobre el significado del Valknut, una de ellas sostiene que los anillos simbolizaban al dios Odin y su poder de confundir la mente de guerreros, como también la capacidad de regalarles dones para las batallas.



Figura 1.6: Muchas empresas contemporáneas escogen variaciones del los anillos como representación de alguna idea subyacente a su producto.

denominación de estos estados. Un halo, de su definición, es un círculo de luz difusa en torno de un cuerpo central luminoso. Un halo cuántico es equivalente pero el papel de la luz lo juega la densidad de probabilidad de las partículas del sistema. Uno de los sistemas en los que aparecen halos es el núcleo ${}^6\text{He}$. Este núcleo es estable con respecto a la disociación mientras que el núcleo más liviano ${}^5\text{He}$ decae espontáneamente en ${}^4\text{He}$ y un neutrón. El núcleo de ${}^6\text{He}$ puede describirse, debido al carácter Borromeano, como una partícula α central y dos neutrones delocalizados orbitando muy alejados de ella. Si despreciamos la estructura del núcleo, esto significa que el sistema (α, n, n) es estable cuando los sistemas (α, n) y (n, n) no lo son. Claramente el ${}^6\text{He}$ es un sistema con enlace Borromeano. Otro ejemplo es el del ${}^{11}\text{Li}$, que posee una conformación similar, con halos de neutrones, pero con una estructura central diferente [17]. Otro fenómeno relacionado con los estados Borromeanos son los agregados de ${}^3\text{He}$. Se sabe que la molécula de ${}^3\text{He}_2$



Figura 1.7: En la obra *Pallas y el Centauro* de Sandro Botticelli pueden observarse anillos Borrromeanos en la vestimenta de la mujer.

no es estable, sin embargo el Helio líquido si existe y es estable. Debe existir entonces un número crítico N para el cual el agregado ${}^3\text{He}_N$ es estable. Resultados en este aspecto han sido encontrados con métodos tipo Monte Carlo [18], sin embargo quizás el más relevante sea la cota [19] de 35 átomos como mínimo para que el sistema sea estable.

Enfocando un poco más a los problemas que se tratan en esta Tesis, podemos citar el caso de la molécula de Hidrógeno con interacciones apantalladas. Las interacciones apantalladas son normalmente resultado de teorías de campo medio en el que las interacciones entre partículas se ven reducidas debido a las condiciones del medio. Un ejemplo son los plasmas de Debye, en que se utiliza un potencial tipo Yukawa ($\frac{e^{-\sigma r}}{r}$) para simular las interacciones entre partículas en los plasmas ionizados térmicamente [20, 21, 22]. Las diferentes condiciones del plasma son ajustadas con el nivel de apantallamiento σ^1 . Para el caso de la molécula de Hidrógeno, se logró probar en 2004 [23] que la misma presenta estados Borrromeanos. Los estados Borrromeanos se encuentran cuando el valor del apantallamiento es suficiente como para desestabilizar los Hidrógenos que componen la molécula, pero esta sigue siendo estable (ver Figura 1.8). Este notable resultado tuvo su gran aporte para el rumbo de la presente Tesis, ya que fue el impulsor de una gran parte de los problemas aquí encarados. Otros resultados similares para sistemas con interacciones tipo Yukawa han sido encontrados recientemente también en Condensados de Bose [24]. Se ha propuesto que en los condensados de Bose se pueden generar auto ligaduras a través de interacciones con campos electromagnéticos inducidos por un láser externo. En este esquema las interacciones entre partículas de tipo $1/r$ se ven modificadas o apantalladas por la intensidad del láser.

Finalmente, diremos que los estados Borrromeanos atómicos y moleculares no han sido objeto de tantos trabajos como los sistemas nucleares. Hay sin embargo un creciente interés

¹La forma de obtener la interacción apantallada tipo Yukawa, se puede encontrar en el capítulo 3

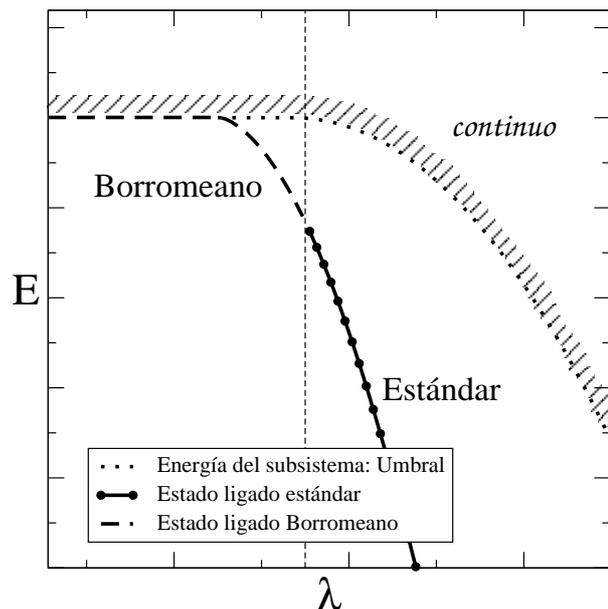


Figura 1.8: Esquema que muestra como la variación de energía en función de un parámetro (λ), como el apantallamiento nuclear, puede llevar a un sistema a ser Borromeano. La línea vertical de trazos indica el valor para el cual los subsistemas dejan de ser estables ($E = 0$) mientras que la energía del sistema completo sigue siendo estable.

en estos estados para los sistemas embebidos en plasmas [20, 21, 22, 25]. Mucho es lo que resta por hacer en este área para establecer conexiones con resultados de experimentos en los que las propiedades colectivas, emergentes de las interacciones fundamentales, son claves para comprender la física involucrada.

1.3. Resonancias

Probablemente el fenómeno más sorprendente en todo el rango de experimentos de dispersión sean las resonancias. John R. Taylor. [26]

Las resonancias sobre las que hablaremos en esta tesis son las así nombradas en la teoría de dispersión [26, 27]. Un problema típico de dispersión consiste en un *proyectil* que se hace incidir en un *blanco*. Los proyectiles y los blancos pueden ser electrones, partículas elementales, átomos o moléculas. Muchas veces se utilizan iones o partículas cargadas debido a la posibilidad de darles impulso y dirección cuando se encuentran bajo la acción de campos electromagnéticos. Dentro de los experimentos de dispersión también podemos encontrar los que tienen como blanco a superficies sólidas.

Los procesos de dispersión pueden ser naturalmente encasillados en dos grupos: elásticos o inelásticos. En los elásticos la energía inicial del proyectil se conserva durante todo el proceso. No hay intercambio de energía con el blanco. Por otro lado en el caso inelástico, si

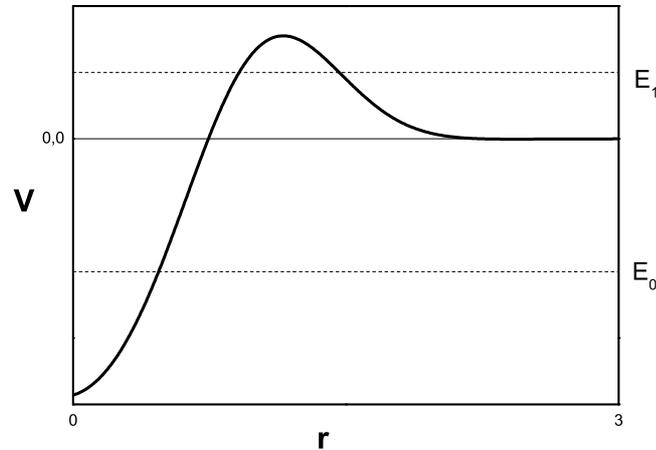


Figura 1.9: La figura muestra un potencial efectivo entre una partícula α y el núcleo en un proceso de decaimiento- α .

lo hay. Dentro de la dispersión elástica podemos a su vez considerar tres casos. El primero consiste en que el proyectil queda atrapado por el blanco. Otro posible caso es el opuesto, el proyectil se deflece en el blanco sin demorar un tiempo considerable durante la interacción. El tercer y más interesante caso, para esta tesis al menos, es el que da el nombre a las resonancias. Diremos que el sistema Proyectil-Blanco tiene una resonancia si el conjunto forma un estado de vida media larga (detectable) que tiene suficiente energía como para romperse en dos subsistemas. Claro que esta definición carece de rigurosidad matemática, pero funciona a la perfección para establecer una idea conceptual del problema.

El decaimiento- α de un núcleo radiactivo es quizás el problema de resonancias más estudiado y tal vez también el primero, ya que fue resuelto en 1928 por el físico ruso George Gamow [28, 29, 30]. Esto se puede modelar mediante un potencial esféricamente simétrico que representa la interacción de la partícula α con el núcleo. Una forma típica de este potencial se muestra en la Figura 1.9. En la figura se incluyen las energías de un estado ligado E_0 y una resonancia E_R . El tiempo característico de decaimiento del núcleo está relacionado con el tiempo que demora la partícula α en atravesar la barrera de potencial cuando está en el estado 1. Este tiempo de vida es siempre una función inversamente proporcional del valor de la energía del estado E_R^2 . Esto quiere decir que la vida media de una resonancia muy cercana al umbral es muy larga. La dependencia de la vida media con la energía cinética de la partícula α está expresada por la ley de Geiger-Nuttall, corroborada posteriormente por los cálculos de Gamow. Veremos que esto tiene su origen en que las resonancias de forma surgen de un estado ligado que atraviesa

²En realidad de la diferencia con el umbral $E_R - E_{th}$. Pero aquí el umbral es cero.

el umbral al modificar los parámetros del potencial. En la Figura 1.9 podemos pensar que hacemos el pozo de potencial más profundo y la energía E_R se hace cada vez más cercana al umbral hasta que lo cruza.

En una mirada más técnica las resonancias se obtienen como polos de la matriz de dispersión definida en el plano complejo de vectores de onda k ($\frac{(\hbar k)^2}{2m} = E$). Los polos en el cuarto cuadrante ($\text{Re}(k) > 0$; $\text{Im}(k) < 0$) son los que corresponden a las resonancias y tienen energías complejas $E_{res} = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$. La parte imaginaria de esta energía es inversamente proporcional al tiempo de vida media de la resonancia. Esta relación del tiempo de vida con una energía imaginaria motivó que muchos métodos para analizar las resonancias incluyan extensiones analíticas al plano complejo. Otra importante propiedad de los estados de resonancia es que cumplen la ecuación

$$\mathcal{H}\psi_{res} = E_{res}\psi_{res} \quad (1.2)$$

pero no son autoestados de un problema Hermitiano y claramente E_{res} no puede ser una autoenergía ya que es compleja. Sin embargo, veremos que el estado ψ_{res} no es normalizable y esto hace que el Hamiltoniano deje de ser Hermitiano permitiendo energías complejas. Esta simple ecuación de pseudo-autovalores da cuenta de lo interesante que son estos estados que aparecen al considerar espacios de funciones no acotadas dentro del dominio del Hamiltoniano. En un problema de una partícula en un potencial central, las funciones ψ_{res} son divergentes para $r \rightarrow \infty$. La integral de la densidad de probabilidad hasta una distancia r_0 fija tiende a cero con el paso del tiempo, para cualquier r_0 que elijamos. Esto claramente va de la mano con la idea intuitiva que tenemos de una resonancia como un estado localizado por tiempo finito que luego escapa al infinito.

Las resonancias que pueden describirse como un proceso de tunneling³ través de una barrera de potencial son llamadas *resonancias de forma*. Estas resonancias tienen origen *puramente cuántico* y desaparecen si consideramos el mismo problema en el límite clásico $\hbar \rightarrow 0$. Este tipo de resonancias es el que estudiaremos a lo largo de esta Tesis. Otro tipo de resonancias son las conocidas como resonancias de Feshbach. Estas se deben, por ejemplo, a la dependencia angular de las interacciones proyectil-blanco. Si pensamos en un blanco con simetría cilíndrica, el potencial de interacción con el proyectil será diferente según sea la dirección en que se acerque. Si lo hace en forma radial (perpendicular al eje de simetría) no será lo mismo que si lo hace a lo largo del eje de simetría. Lo interesante del caso es que la energía correspondiente a un estado ligado en una dirección puede ser una energía de resonancia para la otra dirección. Este tipo de resonancia es el que se presenta por ejemplo en la interacción de moléculas diatómicas (simetría cilíndrica) con superficies planas. Como veremos a continuación las resonancias de Feshbach tienen un importante papel en la detección experimental de los estados de Efimov en átomos ultrafríos.

³Lamentablemente no hay un vocablo en castellano aceptado para describir el pasaje a través de regiones clásicamente prohibidas. La mejor opción, desde el punto de vista del autor, es decir que en un proceso de *tuneleo* las partículas *tunelean*.

1.4. Efecto Efimov

Forty years of Efimov physics: How a bizarre prediction turned into a hot topic. Physics 3, 9 (2010).

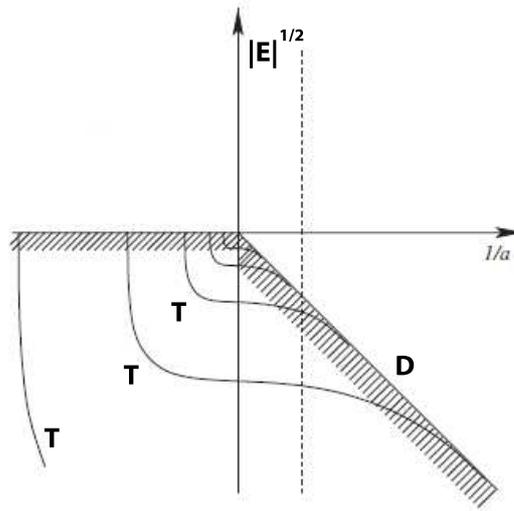


Figura 1.10: Esquema de las energías de estados de Efimov (T) y la energía umbral de los subsistemas de dos partículas (D). El eje horizontal es la inversa de la longitud de dispersión a de los subsistemas.

El efecto Efimov fue *descubierto* por el físico ruso de nombre homónimo en el año 1970 [31]. Remarcamos la palabra descubierto por que la medición del efecto propuesto *teóricamente* por Efimov demoró nada menos que 36 años en ser comprobada. El efecto propone la existencia de infinitos estados ligados de tres partículas cuando la interacción de pares se hace resonante. Supondremos que de alguna forma se puede sintonizar las interacciones entre ellas, haciéndolas mas o menos atractivas. Si las interacciones son de corto alcance, y se disminuye gradualmente la atracción, los subsistemas formados por pares de partículas (por ahora todos ellas iguales) ya no son capaces de tener estados ligados y se expresa diciendo que la interacción de a pares es *resonante*. Aún cuando los pares de partículas no forman estados ligados, las tres partículas en conjunto si lo hacen. El efecto Efimov consiste en la aparición de infinitos estados ligados de tres partículas, cuando las interacciones son sintonizadas al valor exacto (valores críticos) en que los pares se hacen inestables (Figura 1.10). Algunas particularidades de estos estados incluyen un punto de acumulación en el umbral del continuo con un espectro geométrico en el cual,

$$E_T^n / E_T^{n+1} = e^{\pi/s_0} \quad (1.3)$$

con E_T^n el n -ésimo estado ligado por arriba del fundamental y $s_0 = 1,00624$ es una constante universal del efecto Efimov para bosones idénticos. La constante universal s_0 es

diferente si las partículas son distinguibles entre sí y es función del cociente de masas si estas no son iguales. Es claro que los infinitos estados no aparecen discontinuamente cuando la interacción se hace resonante. Recordamos aquí que la longitud de dispersión comienza a divergir cuando la interacción de a pares se acerca a la zona resonante. Los estados de Efimov comienzan a aparecer antes de alcanzar la divergencia y lo hacen de una manera universal, independiente de la forma particular de las interacciones. En la Figura 1.10 puede verse que sobre la línea de trazos la cantidad de estados de Efimov es solamente dos. En 1970 Efimov [31] logra determinar que la cantidad de estados ligados cerca de la divergencia esta dada por

$$N \rightarrow \frac{s_0}{\pi} \ln \frac{|a|}{l} \quad \frac{|a|}{l} \rightarrow \infty \quad (1.4)$$

en donde a es la longitud de dispersión de los pares de partículas y l es una longitud característica de la interacción. Como vemos en (1.4) para que el efecto tenga lugar es necesario que la longitud de dispersión de un sistema de dos partículas debe hacerse infinita (o muy grande) respecto de la longitud característica l .

La longitud de dispersión es el coeficiente del término con $l = 0$ de la amplitud de dispersión en un desarrollo en ondas parciales. Si la energía del proyectil es muy baja la dispersión es isotrópica y la única escala del problema es a . Si el estado ligado esta cerca del umbral (energía baja), la longitud de dispersión diverge y salta discontinuamente a menos infinito cuando el estado es *absorbido* por el continuo. Es decir, que para longitudes de dispersión negativas no tenemos estados ligados de dos partículas, mientras que para las positivas si. Tenemos entonces que *si las longitudes de onda son negativas los estados de Efimov son estados Borromeanos* ya que no existen subsistemas estables.

El origen del carácter universal del efecto Efimov esta relacionado directamente con el alcance de las interacciones. Para analizar la posibilidad de existencia del efecto en un sistema cuántico, es necesario determinar algunas escalas. Una de ellas es el alcance de la interacción entre partículas l . Podemos visualizarla fácilmente si pensamos un pozo de potencial de profundidad V_0 y radio l . Evidentemente en este caso el alcance es l . Otra escala es la longitud de dispersión a , que caracteriza las interacciones cerca del umbral. La tercera escala que utilizaremos es la del tamaño de los estados, o las distancias relativas entre las partículas r_{ij} . Las interacciones solo juegan un papel importante cuando las tres partículas se encuentran dentro de un volumen de orden l^3 . Vimos que si la interacción de pares se hace resonante, la energía de los pares alcanza el umbral del continuo y la longitud de dispersión a diverge. Ahora, es sabido también que en ese caso crece el tamaño de los estados de dos partículas r_{ij} , y las interacciones de corto alcance pueden ser despreciadas ya que $r_{ij} \gg l$. Lo interesante es que el otro parámetro dimensional del sistema, la longitud de dispersión a , es mucho mayor que las r_{ij} . Entonces no existe una *escala característica* del sistema ya que $l \ll r_{ij} \ll a$ y los resultados son universales e independientes del potencial involucrado. Las interacciones en esta región solo dependen de la simetría de las permutaciones entre las partículas, el momento angular total y la paridad de las soluciones.

Una condición para que el efecto Efimov se haga visible se desprende del párrafo anterior, la longitud de dispersión debe ser grande respecto a l ,

$$a \gg l. \quad (1.5)$$

En este sentido podemos definir dos límites para los cuales se ha demostrado que el efecto ocurre,

- Límite resonante ($a \rightarrow \infty$, l fijo)
- Límite de escala ($l \rightarrow 0$, a fijo)

En caso de hacer solo el límite resonante, obtenemos el espectro geométrico con punto de acumulación en el umbral, acotado por debajo como mencionamos anteriormente. Si además hacemos $l \rightarrow 0$, el espectro no es acotado por debajo y no existe un estado fundamental. Si solamente hacemos el límite de escala, también tenemos infinitos estados arbitrariamente profundos, pero no tenemos un punto de acumulación en el umbral⁴.

Desde la publicación del trabajo de Efimov hasta el presente año, ha habido bastantes intentos por medir dichos estados. Los éxitos han sido nulos hasta 2006 en que el grupo de Rudolf Grimm [33] logró medir uno de los estados en átomos de Cesio ultrafríos. Este trabajo despertó en el ámbito de la física de los átomos fríos un recalcado interés que tuvo como resultado varias publicaciones reportando diferentes sistemas que presentan el efecto [33, 34, 35]. Los átomos de Cesio ultrafríos se enfrían mediante un sistema láser que consiste en transmitirle impulso solamente a los átomos con más energía cinética. El efecto es que la cantidad de átomos con energía cinética muy cercana a cero aumenta, y la temperatura disminuye considerablemente (≈ 10 nK). Como recalcamos en los párrafos anteriores, el efecto aparece si la longitud de dispersión átomo-átomo diverge. Para lograr esto con un sistema físico se utilizan las resonancias de Feshbach que nombramos en la sección 1.3. La base para la existencia de las resonancias de Feshbach es tener interacciones con diferentes simetrías moleculares, las cuales tienen energías asintóticas muy diferentes para distancias grandes [36]. Esto hace que para una dada energía hay estados ligados en una simetría y en la otra una región de energía continua. Vale decir que dos partículas que colisionan con energía E cercana al umbral en un canal *abierto*, se ven acopladas con el estado ligado de igual energía en la otra simetría o canal cerrado. La consecuencia es que la longitud de dispersión aumenta notablemente, logrando las condiciones para medir el efecto. Para poder sintonizar las energías en juego se utilizan campos magnéticos o láseres cuyo efecto depende de la simetría, con lo cual los estados de cada simetría varían de diferente forma. La cuestión no trivial es el hecho absolutamente notable de que puedan manipular la fuerza de la interacción entre los átomos y con ello cambiar la longitud de dispersión del sistema [36].

Lo que se mide para asegurar la existencia del efecto es la longitud de recombinación. Esto es una medida de cuantos átomos se acoplan de a tres, como función de la longitud

⁴El llamado efecto Thomas [32], descubierto en 1937 mucho antes que el efecto Efimov, es básicamente lo que ocurre en límite de escala

de dispersión. Se espera y se predice de la teoría que la longitud de recombinación muestre una resonancia cuando un estado de Efimov intersecta el umbral del continuo. Esto es lógico porque los átomos libres, que tienen energía muy baja, fácilmente se acoplan para formar un trímero con energía cerca del umbral del continuo, lo que genera un pico de recombinación.

1.5. Aportes realizados en esta Tesis

El capítulo 2 está enfocado a las propiedades críticas de sistemas de dos partículas en campos externos. El tratamiento es netamente matemático, con resultados rigurosos generales y particulares para algunos casos de interés. Se obtuvieron resultados sobre las propiedades de diagramas de estabilidad de estados fundamentales que conectan la existencia de líneas críticas con el alcance de las interacciones. Se hace particular énfasis en la existencia de líneas críticas que separan regiones con 2 partículas ligadas de las regiones con ninguna partícula ligada (*doble ionización*). Se hizo también un análisis de los exponentes críticos sobre las líneas críticas en estos diagramas.

Los capítulos 3 y 4 están dedicados al análisis de sistemas de partículas cargadas con interacciones apantalladas por el potencial de Yukawa (Plasmas de Debye). El capítulo 3 esta dedicado a sistemas con cargas unitarias y configuración $(\pm 1, \pm 1, \mp 1)$, es decir dos de ellas tienen carga de signo opuesto a la tercera. El acercamiento utilizado difiere de los realizados anteriormente ya que no incluye simulaciones estocásticas [23], ni ecuaciones de tipo Fadeev [37]. Consiste en un acercamiento puramente variacional que permite obtener cotas superiores para las energías de los estados ligados y construir diagramas de estabilidad de estados fundamentales en forma sistemática. Se describen los diagramas de estabilidad del estado fundamental de sistemas con diferentes valores de apantallamiento, haciendo énfasis en la existencia de estados Borromeanos. Mediante las cotas variacionales se logró obtener una expresión analítica que permite evaluar si un determinado sistema es Borromeano o no. Dentro del conjunto de sistemas simétricos que presentan estados Borromeanos, se analiza la existencia del Efecto Efimov en función de las masas relativas de las partículas. Utilizando escaleo de tamaño finito (FSS) para mecánica cuántica se logra determinar exponentes críticos en las líneas críticas de los diagramas de estabilidad y mejorar los resultados variacionales obtenidos para dichas líneas.

En el capítulo 4 se realiza un análisis de las propiedades de sistemas simétricos con cargas no unitarias. Como caso límite se analiza en detalle las propiedades críticas de un sistema de dos partículas idénticas no interactuantes en el campo atractivo de una tercera de signo opuesto y masa finita. Se obtienen las energías del Helio y el ión $Li+$ con interacciones apantalladas y de los iones moleculares tipo He_2^{3+} analizando la existencia de efecto Efimov y estados Borromeanos.

Finalmente el capítulo 5 está íntegramente abocado a las resonancias de forma de dos electrones en potenciales externos. Los sistemas pueden describirse como un pozo de potencial forma variable sintonizada externamente. Este tipo de modelo se utiliza para describir electrones en puntos cuánticos en la aproximación de masa efectiva. El

cambio de forma del potencial que permite llevar la energía de los electrones hasta el umbral del continuo donde nace una resonancia, tal como se describió en esta introducción. En el principio del capítulo 5 se dan algunas nociones de como detectar resonancias en sistemas de una partícula. Se analizan los espectros variacionales de Rayleigh-Ritz en la presencia de resonancias y se aplica el método de escaleo complejo para obtener las energías y tiempos de vida media. En resto del capítulo 5 abarca el problema de dos electrones en un punto cuántico en el rango en que aparecen resonancias. Se propone un método alternativo para encontrar las energías de las resonancias, la doble ortogonalidad, basado en los estados variacionales. También se utiliza por primera vez una herramienta de teoría de la información para la detección de resonancias, la fidelidad. Completando investigaciones realizadas anteriormente [38, 39], se estudia la entropía de Von Neumann de una resonancia mediante el análisis de las entropías variacionales y se propone por primera vez una definición basada en el método de escaleo complejo.

Para concluir se hace un recuento de los distintos avances logrados durante el trabajo de Tesis y sobre la perspectiva de trabajos futuros en esta línea de investigación.

Para quienes identifican desarrollo con crecimiento económico, y en particular industrialización, la ciencia se justifica en la medida en que puede ayudar a dicho proceso. Esta visión es tan difundida como miope. Desgraciadamente no hay pocos científicos que la comparten o simulan compartirla: unos cuando se avergüenzan porque sus investigaciones no contribuyen a resolver los problemas sociales, y otros cuando alegan desvergonzadamente que sus investigaciones, por básicas y abstractas que sean, poseen también un tremendo valor práctico. Unos y otros le hacen un flaco favor al desarrollo científico: los primeros por ignorar que el atraso cultural es uno de los grandes problemas de los países en desarrollo, y los segundos por dar una imagen utilitaria de la ciencia básica como mero instrumento para fines ulteriores.

Mario Bunge, “Ciencia, Técnica y Desarrollo”.

Capítulo 2

Sistemas de 2 partículas idénticas en un potencial externo

En este capítulo analizaremos la estabilidad del estado fundamental de sistemas conformados por dos partículas idénticas en un potencial externo. Los casos que trataremos consisten en partículas con interacción repulsiva y un potencial externo es atractivo. Daremos algunas pautas sobre la existencia de estados en el umbral y del valor del exponente de la energía para potenciales de corto y largo alcance. Probaremos que en algunos sistemas existe la posibilidad de doble ionización simultánea. El resultado más relevante de este capítulo es que para una atracción de largo alcance y repulsión de corto alcance, existen regiones en el espacio de los parámetros en que el aumento de la magnitud del potencial atractivo provoca la inestabilidad del sistema.

2.1. Introducción y Definiciones

El trabajo realizado aquí es sobre la existencia de un estado fundamental como función de los parámetros del Hamiltoniano en sistemas *tipo* átomos de dos electrones. Decimos *tipo* por que los sistemas consisten en dos partículas idénticas que se repelen entre ellas y se ven atraídas por un potencial externo. Si todas las interacciones son todas Coulombianas, estamos describiendo una aproximación de Born-Oppenheimer (masa nuclear infinita) de un átomo con dos electrones, en la que el potencial externo es la atracción del núcleo. Aquí extendemos los sistemas permitiendo que la interacción repulsiva entre electrones sea de varios tipos y, aún más relevante, no es igual a la atracción ejercida por el *núcleo*.

Las unidades con las que trabajaremos en este capítulo y en toda la Tesis son las atómicas. Están definidas con los valores numéricos $\hbar = 1$; $e = -1$; $m_e = 1$. En los capítulos 3 y 4 daremos alguna explicación más detallada para la elección de las unidades de masa cuando trabajemos con 3 masas de diferente magnitud.

Los Hamiltonianos para dos partículas que estudiaremos tienen la siguiente forma

$$\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2) = \mathcal{H}_0(\lambda_1; 1, 2) + \lambda_2 W(1, 2), \quad (2.1)$$

en donde $\mathcal{H}_0(\lambda_1; 1, 2)$ es un Hamiltoniano de dos partículas no interactuantes y $W(1, 2) = W(r_{12})$ es la interacción entre partículas que depende de la distancia entre ellas r_{12} . Los parámetros λ_1, λ_2 son ambos positivos. El Hamiltoniano \mathcal{H}_0 tiene la forma

$$\mathcal{H}_0(\lambda_1; 1, 2) = h(\lambda_1)(1) + h(\lambda_1)(2), \quad (2.2)$$

en donde h representa el Hamiltoniano de una partícula

$$h(\lambda_1) = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \lambda_1 v(r), \quad (2.3)$$

Consideraremos que la interacción externa $v(r)$ es siempre más atractiva que repulsiva, pudiendo tener cambios de signo con la distancia r . Con estos solo queremos asegurar que exista un valor $\lambda_1^{(c)} \geq 0$ tal que si aumentamos la constante de acople por arriba de él ($\lambda_1 > \lambda_1^{(c)}$), entonces $h(\lambda_1)$ soporta un estado ligado. Igualmente importante es que si $\lambda_1 < \lambda_1^{(c)}$ entonces h no tiene estado ligados. Las interacciones entre partículas idénticas que tendremos en cuenta consisten en potenciales $W(r_{12})$ puramente repulsivos. Asumimos también que la repulsión debida al potencial es tal que para λ_1 fijo, el sistema de dos partículas no soporta un estado ligado si λ_2 es suficientemente grande.

La estabilidad del estado fundamental y el comportamiento de la energía cerca del umbral para potenciales radiales de una partícula esta estudiada con mucho detalle y por varios autores [1, 3, 6, 10, 11, 15, 40]. Las condiciones para la existencia de un estado ligado en el umbral y los valores asintóticos de la energía cerca de $\lambda_1^{(c)}$ son bien conocidas también [1, 3, 6].

Antes de analizar el problema de la estabilidad, estableceremos algunas hipótesis acerca de los potenciales de una y dos partículas:

1. $h(\lambda_1)$ es autoadjunto para $\lambda_1 \geq 0$ y $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ es autoadjunto en la región ($\lambda_1 \geq 0, \lambda_2 \geq 0$).
2. $v(r)$ y $W(r_{12})$ no tienen parámetros libres, por lo que el Hamiltoniano (2.1) depende solo de λ_1 y λ_2 .
3. Ambos potenciales, de una y dos partículas son radiales, esto es $v = v(r)$ y $W(1, 2) = W(r_{12})$.
4. Los potenciales decaen en el infinito, es decir que $\lim_{r \rightarrow \infty} v(r) = 0$ y $\lim_{r_{12} \rightarrow \infty} W(r_{12}) = 0$.
5. $v(r)$ es suficientemente atractivo como para que $\exists 0 \leq \lambda_1^c < \infty$ tal que la ecuación de autovalores para el estado fundamental del sistema de una partícula, dada por

$$h(\lambda_1)\psi_0(\lambda_1; r) = \mathcal{E}_0(\lambda_1)\psi_0(\lambda_1; r) \quad (2.4)$$

tiene una solución acotada, $\mathcal{E}_0(\lambda_1) < 0$ y $\|\psi_0(\lambda_1)\| = 1 \forall \lambda_1 > \lambda_1^{(c)}$. Hacemos notar que $\mathcal{E}_0(\lambda_1^{(c)}) = 0$ puede o no ser un autovalor.

6. W es completamente repulsivo $W(r_{12}) > 0 \forall r_{12} \geq 0$.
7. $\exists \hat{\lambda}_1 > \lambda_1^{(c)}$ tal que para $\lambda_1^{(c)} < \lambda_1 < \hat{\lambda}_1$ se tiene que $2\mathcal{E}_1(\lambda_1) \geq \mathcal{E}_0(\lambda_1)$, en donde $\mathcal{E}_1(\lambda_1)$ es la energía del primer estado excitado de $h(\lambda_1)$ ($\mathcal{E}_1(\lambda_1) = 0$ si $h(\lambda_1)$ solo tiene un estado ligado).
8. El potencial entre partículas W cumple que

$$\langle \psi_0(1), \psi_0(2) | W^{-1}(1, 2) | \psi_0(1), \psi_0(2) \rangle > 0, \quad (2.5)$$

en donde $|\psi_0(1), \psi_0(2)\rangle$ representa el estado fundamental de \mathcal{H}_0 para $\lambda_2 \equiv 0$.

La razón de requerir algunas estas condiciones será aclarada cuando hagamos uso de ellas, sin embargo vale la pena hacer aquí algún comentario al respecto. Las condiciones (7) y (8) condiciones suficientes para asegurar que a valores grandes de λ_2 no existen estado ligados. Estas condiciones no restringen considerablemente el rango de aplicación. Por ejemplo, la condición (7) es válida para potenciales atractivos de corto alcance, que satisfacen $r^2 v(r) \rightarrow 0$ para $r \rightarrow \infty$. Esto se debe a que el valor crítico del acople λ_1 para estados excitados es estrictamente mayor que el valor $\lambda_1^{(c)}$ para el estado fundamental. Esto quiere decir se puede hacer el valor de energía del primer estado excitado tan chico como se desee, manteniendo la del estado fundamental con un valor finito. En el caso de potenciales de largo alcance, puede recalarse que el potencial Coulombiano cumple la condición (7) $\forall \lambda_1 > 0$, por lo que $\hat{\lambda}_1 = \infty$. La condición (8) excluye potenciales W que se anulan a partir de un radio determinado, como un pozo o una barrera cuadrada. El límite $\lambda_2 \rightarrow \infty$ representa en esos casos partículas de tamaño finito (del ancho de la barrera), que si tienen estados ligados si $v(r)$ es un potencial Coulombiano. Eso es justamente lo que quería evitarse con la condición.

La ecuación de autovalores para el estado fundamental del sistema de dos partículas está dada por

$$\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2) \Psi_0(\lambda_1, \lambda_2; r_1, r_2, r_{12}) \chi = E_0(\lambda_1, \lambda_2) \Psi_0(\lambda_1, \lambda_2; r_1, r_2, r_{12}) \chi, \quad (2.6)$$

Los Hamiltonianos considerados son independientes del espín, de modo que las variables de espín en el espinor χ se toman en cuenta solamente a través de la simetrización de la parte espacial de la función de onda. Es más, siempre podemos elegir la parte espacial de la función de onda en forma simétrica y los resultados serán válidos tanto para fermiones como para bosones ya que solo debemos cambiar la simetría del espinor en consecuencia.

La principal razón de este capítulo es caracterizar los diagramas de estabilidad de estados fundamentales como función de los parámetros (λ_1, λ_2) . Debemos entonces demostrar cuales son los dominios en donde existe un estado fundamental, esto es, $E_0(\lambda_1, \lambda_2) \leq \mathcal{E}_0(\lambda_1)$ y $\|\Psi_0(\lambda_1, \lambda_2)\| = 1$.

La línea crítica está definida implícitamente por la condición de umbral

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2^{(c)}(\lambda_1)) = \mathcal{E}_0(\lambda_1). \quad (2.7)$$

La forma asintótica de la energía de ionización $\mathcal{I} = E_0(\lambda_1, \lambda_2) - \mathcal{E}_0(\lambda_1)$, define un exponente crítico α cuando se anula [6] y cumple la Ec. (2.7). Con el fin de esclarecer esto primero analizaremos el caso de una partícula. El exponente α_h para la energía del estado fundamental de una partícula puede definirse como

$$\mathcal{E}(\lambda_1) \sim -e(\lambda_1 - \lambda_1^{(c)})^{\alpha_h} \quad ; \quad \text{for } \lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+}, \quad (2.8)$$

en donde e es una constante positiva. En las referencias [3, 1, 6] pueden encontrarse expresiones para los exponentes críticos α_h de una clase de potenciales atractivos (corto alcance) esféricamente simétricos.

En el caso de dos partículas, la definición es un más engorrosa de escribir, pero el concepto es el mismo. La energía de dos partículas depende de dos parámetros y la energía de umbral corresponde a la del estado fundamental de una partícula. El exponente crítico $\alpha_{\mathcal{H}}$ se define con el comportamiento asintótico de la energía cerca de un punto crítico ($\lambda_1^0, \lambda_2^0 = \lambda_2^{(c)}(\lambda_1^0)$). Este comportamiento puede obtenerse en una dirección arbitraria excepto la dirección tangente a la línea crítica (a lo largo de esta el exponente es siempre mayor que $\alpha_{\mathcal{H}}$). Por conveniencia utilizamos uno de los ejes coordenados como la dirección de cálculo

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) - \mathcal{E}_0(\lambda_1) \sim -a|\lambda_i^0 - \lambda_i|^{\alpha_{\mathcal{H}}} \quad ; \quad \text{for } \lambda_i \rightarrow \lambda_i^{0-} \quad ; \quad i = 1, 2 \quad (2.9)$$

donde la línea $\lambda_{2/1} = \lambda_{2/1}^0$ no es tangente a la línea crítica y a es una constante positiva.

Aquí $\lambda_i \rightarrow \lambda_i^{0-}$ significa que el límite debe hacerse desde adentro del dominio en donde existe un estado fundamental de dos partículas.

Simon [41] probó que, para un dado Hamiltoniano, $\alpha = 1$ si y solo si la energía del umbral corresponde a un autovalor con solución acotada. La importancia del exponente crítico $\alpha_{\mathcal{H}}$ reside entonces en que su valor determina si la línea crítica pertenece al dominio ligado ($\alpha_{\mathcal{H}} = 1$) o no ($\alpha_{\mathcal{H}} > 1$).

2.2. Resultados Generales sin especificar potenciales

En esta sección se demuestra cuales los posibles escenarios para el diagrama de estabilidad de diferentes potenciales, y también algunos resultados generales válidos para una clase grande de interacciones de una y dos partículas. Se asume que los Hamiltonianos que escribimos aquí satisfacen las condiciones (1-8) de la sección anterior.

El operador W es definido positivo, de modo que $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ no puede tener estados ligados si $\lambda_1 < \lambda_1^{(c)}$. Esto se debe a que si $\lambda_1 < \lambda_1^{(c)}$ el Hamiltoniano \mathcal{H}_0 no tiene estados con energía negativa y agregarle la repulsión W aumenta la energía del sistema. Otro resultado útil sobre el espectro [42], es que las autoenergías fundamentales del Hamiltoniano $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ son funciones cóncavas crecientes de λ_2 , para $\lambda_1 > \lambda_1^{(c)}$.

Utilizando algunos resultados descriptos en [42], pueden obtenerse cotas inferiores para la energía del sistema en la región donde el parámetro λ_2 cumple

$$\lambda_2 \leq \tilde{\lambda}_2(\lambda_1), \quad (2.10)$$

en donde

$$\tilde{\lambda}_2(\lambda_1) = 2(\mathcal{E}_1(\lambda_1) - \mathcal{E}_0(\lambda_1)) \left\langle \frac{1}{W} \right\rangle_0, \quad (2.11)$$

y $\mathcal{E}_1(\lambda_1)$ es la energía del primer estado excitado del Hamiltoniano $h(\lambda_1)$ de una partícula. En particular la desigualdad que utilizaremos es

$$2\mathcal{E}_0(\lambda_1) + \lambda_2 \langle \psi_0(1)\psi_0(2) | \frac{1}{W} | \psi_0(1)\psi_0(2) \rangle^{-1}(\lambda_1) \leq E_0(\lambda_1, \lambda_2). \quad (2.12)$$

Reemplazando λ_2 por su valor límite $\tilde{\lambda}_2(\lambda_1)$, y utilizando la condición (7) se obtiene

$$\mathcal{E}_0(\lambda_1) \leq 2\mathcal{E}_1(\lambda_1) \leq E_0(\lambda_1, \tilde{\lambda}_2), \quad (2.13)$$

lo que muestra que $\tilde{\lambda}_2(\lambda_1)$ es un cota superior para la curva crítica $\lambda_2^{(c)}(\lambda_1)$ definida por la Ec. (2.7).

Una cota inferior para $\lambda_2^{(c)}(\lambda_1)$ la puede obtenerse a partir del siguiente lema,

$$\left| \begin{array}{l} \mathbf{Lema 1.} \forall \lambda_1 > \lambda_1^{(c)}, \exists \lambda_2^* > 0 \text{ tal que si } 0 \leq \lambda_2 < \lambda_2^* \text{ entonces} \\ \mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2) \text{ soporta al menos un estado ligado.} \end{array} \right|$$

Prueba. Usando el principio variacional con la función de prueba $\Phi_0(\lambda_1; 1, 2) = \psi_0(\lambda_1; r_1)\psi_0(\lambda_1; r_2)$, se tiene

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) \leq \langle \mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2) \rangle_0 = 2\mathcal{E}_0(\lambda_1) + \lambda_2 \langle W \rangle_0(\lambda_1). \quad (2.14)$$

De acuerdo con el principio variacional, la existencia de un estado ligado esta asegurada si encontramos una función de prueba tal que el valor medio de $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ esta debajo del umbral de energía $\mathcal{E}_0(\lambda_1)$. Si pedimos que (2.14) cumpla esto, tenemos

$$\mathcal{E}_0(\lambda_1) + \lambda_2 \langle W \rangle_0(\lambda_1) < 0 \quad (2.15)$$

de donde podemos definir λ_2^* como

$$\lambda_2^*(\lambda_1) = \frac{|\mathcal{E}_0(\lambda_1)|}{\langle W \rangle_0(\lambda_1)} > 0. \clubsuit \quad (2.16)$$

Al analizar un problema puede entonces encontrarse cotas superiores e inferiores a la curva crítica

$$\lambda_2^*(\lambda_1) \leq \lambda_2^{(c)}(\lambda_1) \leq \tilde{\lambda}_2(\lambda_1). \quad (2.17)$$

Quizás lo más importante de estas cotas sea que son una prueba de la existencia de la línea crítica y que la misma no es idénticamente nula o infinitamente grande.

Describiremos a continuación los posibles escenarios para los diagramas de estabilidad del estado fundamental. Dentro del diagrama pueden existir tres dominios posibles en que $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ soporta estados con 0, 1, o 2 partículas ligadas. El primer caso ocurre cuando $h(\lambda_1)$ no tiene estados ligados. En el segundo caso $h(\lambda_1)$ tiene al menos un estado ligado

pero $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ no posee ninguno. Finalmente, en el tercer caso ambas partículas están ligadas si \mathcal{H} tiene al menos un estado ligado. Las líneas críticas entre estas regiones serán denotadas como la línea 1 – 0, la línea 2 – 1 y la línea 2 – 0.

Con estos conceptos en mente, podemos clasificar los diagramas de estabilidad en tres casos, mostrados cualitativamente en la Figura 2.1.

Caso 1: línea 2-0 inexistente.

El caso se muestra en Figura (2.1.a). Para $\lambda_2 > 0$ la ionización ocurre siempre en la secuencia $2 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ partículas, por lo que no existe doble ionización para $\lambda_2 > 0$ en este caso.

Caso 2: línea 2-0 de extensión finita.

La Figura (2.1.b) muestra un gráfico cualitativo de este caso. $\exists \lambda_2^{(mc)} > 0$ tal que para $\lambda_2 < \lambda_2^{(mc)}$ el sistema de dos partículas tiene al menos un estado ligado para $\lambda_1 > \lambda_1^{(c)}$, pero no hay estados ligados en un entorno de $\lambda_1^{(c)}$ para $\lambda_2 > \lambda_2^{(mc)}$. La línea $\lambda_1 = \lambda_1^{(c)}$ es una línea 2-0 para $\lambda_2 < \lambda_2^{(mc)}$.

Caso 3: línea 2-0 infinita.

Podemos ver un ejemplo de este caso en la Figura (2.1.c). Este caso se puede obtener del caso 2 cuando $\lambda_2^{(mc)} \rightarrow \infty$. La línea $\lambda_1 = \lambda_1^{(c)}$ es una línea 2-0 en todo su extensión. Vale la pena notar, aunque lo haremos más adelante en detalle, que en este caso el sistema puede perder un estado ligado de dos partículas aumentando la atracción del potencial externo.

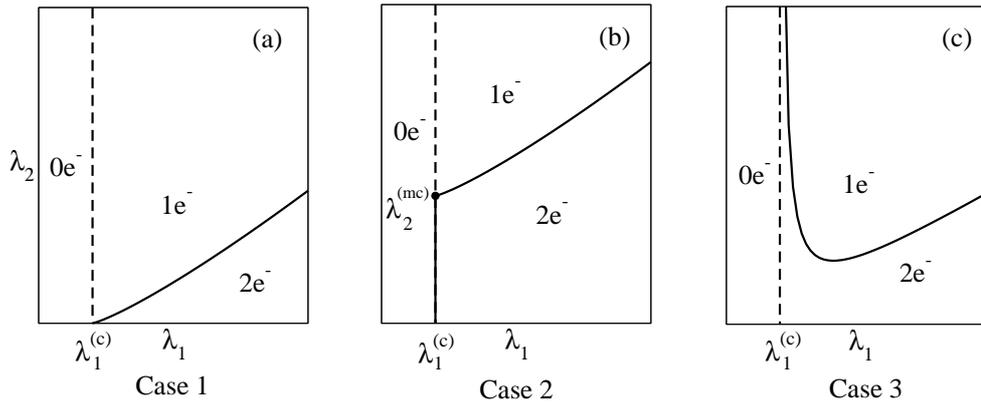


Figura 2.1: Diagramas de estabilidad cualitativos. Muestran los tres posibles escenarios para el diagrama de estabilidad. Dos de ellos presentan líneas de doble ionización 2-0.

2.2.1. Existencia de la línea 2-0

La existencia de la línea 2-0 está determinada por las propiedades de los potenciales involucrados en el problema, $v(r)$ y $W(r_{12})$. Al estudiar la cota (2.16) se observa que si $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+}$, la cota inferior para la línea crítica puede ser finita, infinita o cero, dependiendo del comportamiento asintótico de la energía $\mathcal{E}_0(\lambda_1)$ y $\langle W \rangle_0(\lambda_1)$. Suponemos entonces la expansión asintótica

$$\langle W \rangle_0(\lambda_1) \sim w (\lambda_1 - \lambda_1^{(c)})^\omega \quad \text{for } \lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+} \quad (2.18)$$

con $w > 0$. Analicemos entonces los comportamientos de la cota (2.16) cuando $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+}$,

- Si $\omega > \alpha_h$, de acuerdo con (2.16), la cota inferior se va a infinito indicando que el diagrama es del tipo 3.
- Para $\omega = \alpha_h$ la cota inferior es finita, entonces el diagrama es del tipo 2 o 3.
- Si $\omega < \alpha_h$ la cota inferior tiende a cero. Para este caso puede obtenerse una expansión perturbativa de la energía, a primer orden en λ_2 , del sistema de dos partículas

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) - \mathcal{E}_0(\lambda_1) \sim \mathcal{E}_0(\lambda_1) + \lambda_2 \langle W \rangle_0(\lambda_1) + O(\lambda_2^2). \quad (2.19)$$

para $\lambda_2 \sim 0$, y $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)}$, la energía de ionización $E_0(\lambda_1, \lambda_2) - \mathcal{E}_0(\lambda_1)$ es positiva por que $\mathcal{E}_0(\lambda_1)$ decae mas rápido que $\langle W \rangle_0(\lambda_1)$. Por lo tanto la energía de ionización se anula para $\lambda_1 > \lambda_1^{(c)+}$ y el diagrama es del tipo 1.

A continuación se incluyen estos conceptos en forma de lema para resumir lo obtenido hasta ahora.

Lema 2. *Si el comportamiento cerca del umbral de $\langle W(r_{12}) \rangle_0$ está dado por (2.18), entonces el diagrama de estabilidad para la energía del estado fundamental de $\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2)$ corresponde a*

1. caso 1 si $\omega < \alpha_h$,
2. caso 2 o 3 si $\omega = \alpha_h$,
3. caso 3 si $\omega > \alpha_h$.

En lo que sigue, probaremos que si el potencial de una partícula es de corto alcance el diagrama de estabilidad puede ser de cualquiera de los tres tipos, es decir, todos los casos son posibles. Un potencial $v(r)$ se define como de corto alcance si $\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 v(r) = 0$. Mas aún, en este caso, el umbral de energía $\mathcal{E}_0 = 0$ no es un autovalor y el exponente crítico de la energía para el estados fundamental es $\alpha_h = 2$ [3, 6].

Teorema 1. *El diagrama de estabilidad para potenciales $v(r)$ de corto alcance puede ser de tipo 1, 2 o 3.*

Prueba. Los potenciales de corto alcance se tienen un comportamiento cerca del umbral que es universal y no depende de la forma particular del potencial. El resultado que utilizamos aquíes sobre la función de onda, de una partícula, que tiene la forma universal $\psi_0(\lambda_1^{(c)} + \epsilon; r) \sim \epsilon^{1/2} \psi(\epsilon; r)$ con $\psi(0; r) > 0 \forall r > 0$.

Por otro lado, de (6) puede verse que $\exists [a, b]$ tal que $W(r_{12}) > 0$ en $[a, b]$. Sea $W_{min} = \min_{r_{12} \in [a, b]} W(r_{12})$, entonces

$$\langle W \rangle_0 \geq \epsilon^2 W_{min} \int_{r_{12} \in [a, b]} \psi_0^2(r_1) \psi_0^2(r_2) d^3 x_1 d^3 x_2 > a \epsilon^2 ; a > 0. \quad (2.20)$$

Luego cuando $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+}$, $\langle W \rangle_0 \sim w (\lambda_1 - \lambda_1^{(c)})^\omega$ con $\omega \leq 2$. Entonces según el **lema 2** esto implica que el diagrama de estabilidad puede ser del tipo 1, 2 o 3. ♣

2.2.2. Exponente $\alpha_{\mathcal{H}}$

La existencia de la línea 2-0 está determinada, de acuerdo a lo analizado en la sección anterior, por los comportamientos asintóticos relativos del potencial externo y la interacción repulsiva entre partículas. En esta sección estudiamos el exponente crítico $\alpha_{\mathcal{H}}$ sobre la línea 2-0.

Lema 3. *Si la línea 2-0 existe, entonces $\alpha_{\mathcal{H}} = \alpha_h$ sobre esta línea.*

Prueba. La línea crítica 2-0 está definida por $(\lambda_1 = \lambda_1^{(c)}, \lambda_2)$ con $\lambda_2 < \lambda_2^{(mc)}$ y $E_0(\lambda_1^{(c)}, \lambda_2) = \mathcal{E}_0(\lambda_1^{(c)}) = 0$. Dado que la energía $E_0(\lambda_1, \lambda_2)$ es una función creciente de λ_2 se tiene que

$$\begin{aligned} E_0(\lambda_1, \lambda_2) &> E_0(\lambda_1, 0) \\ &= 2 \mathcal{E}_0(\lambda_1) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Luego de la Ec. (2.8), para $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+}$, se obtiene

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) > -2e(\lambda_1 - \lambda_1^{(c)})^{\alpha_h}, \quad (2.22)$$

y utilizando la Ec. (2.9), se obtiene

$$\alpha_{\mathcal{H}} \geq \alpha_h. \quad (2.23)$$

Luego, dado que la línea 2-0 existe, las energías cumplen

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) < \mathcal{E}_0(\lambda_1), \quad (2.24)$$

y en la región $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)+}$ esta ecuación se convierte en

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) < -e(\lambda_1 - \lambda_1^{(c)})^{\alpha_h} \quad \Rightarrow \quad \alpha_{\mathcal{H}} \leq \alpha_h. \quad (2.25)$$

A partir de la Ec. (2.23) y Ec. (2.25) se concluye entonces que

$$\alpha_{\mathcal{H}} = \alpha_h \quad \clubsuit \quad (2.26)$$

En el siguiente lema se prueba que la existencia de un estado ligado de una partícula en el umbral prohíbe que el diagrama tenga una línea crítica 2 – 0.

| **Lema 4.** Si $\alpha_h = 1$, entonces no existe una línea 2 – 0. |

Prueba. $\alpha_h = 1 \Rightarrow \exists \psi_0 : \|\psi_0(\lambda_1^{(c)})\| = 1$, donde ψ_0 es una autofunción de $h(\lambda_1^{(c)})$ con energía nula. Luego el valor medio de W esta bien definido en $\lambda_1^{(c)}$ y $\langle W \rangle_0(\lambda_1^{(c)}) > 0$. Haciendo una expansión perturbativa a primer orden se obtiene,

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) - \mathcal{E}_0(\lambda_1) \sim \mathcal{E}_0(\lambda_1) + \lambda_2 \langle W \rangle_0(\lambda_1), \quad (2.27)$$

para $\lambda_1 \sim \lambda_1^{(c)}$ y $\lambda_2 \sim 0$. El hecho de que $\mathcal{E}_0 \rightarrow 0$ cuando $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)}$ y que $\langle W \rangle_0(\lambda_1^{(c)}) > 0$ implica que $\lambda_2^{(c)} \rightarrow 0$, porque de otra forma la energía de ionización $E_0(\lambda_1^{(c)}, \lambda_2 \sim 0) - \mathcal{E}_0(\lambda_1^{(c)})$ es positiva.

Un argumento más a favor es que la derivada $\frac{\partial E_0}{\partial \lambda_2} = \langle W \rangle_0(\lambda_1^{(c)})$ en el punto $(\lambda_1^{(c)}, \lambda_2 = 0)$ es positiva. Aplicando ahora el teorema de la función implícita a la ecuación $E_0(\lambda_1, \lambda_2) - \mathcal{E}_0 = 0$, obtenemos el valor de $\frac{\partial \lambda_2^{(c)}(\lambda_1^{(c)})}{\partial \lambda_2}$ en $\lambda_2 = 0$,

$$\frac{\partial \lambda_2^{(c)}(\lambda_1^{(c)})}{\partial \lambda_2} = \frac{\partial(\mathcal{E}_0 - E_0)}{\partial \lambda_1} \frac{1}{\frac{\partial E_0}{\partial \lambda_2}} \quad (2.28)$$

$$= -\frac{\langle v \rangle_0}{\langle W \rangle_0} \geq 0, \quad (2.29)$$

entonces $0 \leq \frac{\partial \lambda_2^{(c)}(\lambda_1^{(c)})}{\partial \lambda_2} < \infty$ en el punto $(\lambda_1^{(c)}, \lambda_2 = 0) \quad \clubsuit$

Los **lemas 3 y 4** pueden ser incorporados en una conclusión sobre el exponente sobre la línea 2 – 0.

Teorema 2. Si existe una línea 2-0, entonces $\alpha_{\mathcal{H}} = \alpha_h > 1$ sobre esta línea.

Los mostrados hasta aquí son los conocimientos sobre el exponente crítico de la energía para una línea 2-0 que se obtuvieron. En la próxima sección se mostrará como son posibles los diferentes escenarios para los diagramas de estabilidad si las propiedades relativas entre la repulsión y la atracción son las adecuadas. En la sección 2.4 nos abocaremos de lleno a potenciales Coulombianos atractivos de una partícula.

2.3. Ejemplos de los tres tipos de diagramas

Utilizando un ejemplo simple puede demostrarse que los tres tipos de diagramas son posibles si se escoge un potencial externo $v(r)$ de corto alcance y se cambia la repulsión entre partículas $W(r_{12})$ (**Teorema 1**). Para el potencial externo se utilizó el potencial de Hulthén [43],

$$v(r) = -\frac{e^{-r}}{1 - e^{-r}}. \quad (2.30)$$

Este potencial puede resolverse exactamente para ondas s , y las energías y autofunciones tienen expresiones analíticas. Las energías tienen la forma

$$\mathcal{E}_n(\lambda_1) = -\frac{(2\lambda_1 - (n+1)^2)^2}{8(n+1)} ; \quad n = 0, \dots, \left[\sqrt{2\lambda_1} - 1 \right], \quad (2.31)$$

y particularmente, para el estado fundamental,

$$\mathcal{E}_0(\lambda_1) = -\frac{(2\lambda_1 - 1)^2}{8} \Rightarrow \lambda_1^{(c)} = \frac{1}{2}. \quad (2.32)$$

Esta expresión muestra que el exponente crítico de la energía es $\alpha_h = 2$, que es lo esperado para un potencial de corto alcance. Al trabajar en regiones con $\lambda_1 \sim \lambda_1^{(c)}$, es conveniente escribir $\lambda_1 = \lambda_1^{(c)} + \epsilon/2 = (1 + \epsilon)/2$. Utilizando esta notación la función de onda del estado fundamental tiene la forma

$$\psi_0(\epsilon; r) = \frac{1}{4\pi} C(\epsilon) e^{-\epsilon r/2} \frac{(1 - e^{-r})}{r}; \quad C(\epsilon) = \sqrt{\frac{\epsilon}{2} (1 + \epsilon)(2 + \epsilon)}. \quad (2.33)$$

En esta expresión puede verse que la dependencia con ϵ es la utilizada en la prueba del **Teorema 1**, $\psi_0(\epsilon; r) \sim \epsilon^{1/2} \psi(\epsilon; r)$. Los resultados generales se utilizan para realizar predicciones sin necesidad de conocer todos los detalles del potencial y para casos en que los resultados exactos no son conocidos (la gran mayoría de ellos).

Los tres tipos de diagramas pueden ser obtenidos con $v(r)$ dado por el potencial de Hulthén cambiando el rango de W .

Interacción de corto alcance: La repulsión entre partículas que se escogió aquí es un tipo δ (notar que este potencial no cumple con todas las condiciones (1-8), pero estas son suficientes y no necesarias),

$$W(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \frac{1}{r_1^2} \delta(r_1 - r_2) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) \delta(\varphi_1 - \varphi_2). \quad (2.34)$$

Con este tipo de repulsión el valor medio del potencial se puede calcular fácilmente

$$\begin{aligned} \langle W \rangle_0(\lambda) &= \int d^3 x_1 \int d^3 x_2 \psi_0^2(\epsilon; r_1) \psi_0^2(\epsilon; r_2) \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \\ &= 4\pi (5 \ln 2 - 3 \ln 3) \epsilon^2 + O(\epsilon^3). \end{aligned} \quad (2.35)$$

A partir de este resultado y de la Ec.(2.17) puede obtenerse una cota inferior λ_2^* para la línea crítica $\lambda_2^{(c)}(\lambda_1)$,

$$\lambda_2^{(c)}(\lambda_1) \geq \lambda_2^* = 1/8\pi(5 \ln 2 - 3 \ln 3). \quad (2.36)$$

Luego según el **lema 2**, esto prueba que el diagrama es del tipo 2 o 3.

Interacción de Largo alcance: Como un ejemplo típico de potencial de largo alcance se escogió una repulsión Coulombiana,

$$W(r_{12}) = \frac{1}{r_{12}}, \quad (2.37)$$

con este potencial se obtiene,

$$\langle W \rangle_0(\lambda_1) = \ln 4 \epsilon \quad (2.38)$$

entonces según **Teorema 1** el diagrama es del tipo 1.

El hecho de que el diagrama sea del tipo 1 y no exista línea 2-0 en el ejemplo anterior está relacionado con el largo alcance de la interacción. Si bien este ejemplo lo hicimos para Coulomb, el resultado no depende de la forma particular del potencial. De hecho, podemos entender el mecanismo en una forma cualitativa. Es conocido que la función de onda de una partícula se deslocaliza cuando $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)}$. Si ahora encendemos el acople repulsivo λ_2 , y W es de corto alcance, las partículas están tan alejadas que no sienten la repulsión y el sistema puede tener un estado ligado para $\lambda_2 > 0$ cerca de $\lambda_1 \sim \lambda_1^{(c)}$. Para el caso de largo alcance la situación es exactamente opuesta. La interacción repulsiva es suficientemente larga como para separar al sistema para todo $\lambda_2 > 0$ cerca de $\lambda_1 \sim \lambda_1^{(c)}$. Este razonamiento es en realidad válido aún cuando la atracción del potencial externo es de largo alcance, como se mostrará en la sección 2.4.

Teorema 3. Si $v(r)$ es de corto alcance, $\alpha_h = 2$ y si W es un potencial Coulombiano repulsivo, entonces el diagrama de estabilidad es del tipo 1.

Prueba. Para potenciales de corto alcance puede definirse una constante R tal que $v(r) \sim 0$ for $r > R$. Entonces la forma asintótica de la función de onda cerca del umbral es

$$\psi_0(\lambda_1; r)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{\exp(-\sqrt{2\mathcal{E}_0} r)}{r}, \quad (2.39)$$

que es exacta si $v(r)$ es de soporte compacto¹. Esta expresión es válida para $r > R$ de

¹El soporte es básicamente la región en donde no es nulo el potencial, $\text{supp } v(r) = \{r \in \mathbb{R} : v(r) \neq 0\}$. Si esta región es compacta (cerrada y acotada, normalmente esto significa finita, como en el pozo de potencial discontinuo), el soporte del potencial es compacto

modo que puede escribirse

$$\psi_0(\lambda_1; r) = \begin{cases} \mathcal{N} \psi_{<}(\lambda_1; r) & \text{if } r < R \\ \mathcal{N} \psi_{<}(\lambda_1; R) \frac{R}{r} \exp(-\sqrt{2\mathcal{E}_0}(r-R)) & \text{if } r > R, \end{cases} \quad (2.40)$$

en donde \mathcal{N} es una constante de normalización dada por $\|\psi_0\| = 1$. Como la función $\psi_{<}$ es finita y sin discontinuidades ni divergencias en $\lambda_1 = \lambda_1^{(c)}$, la excluimos del comportamiento crítico. La norma puede ser elegida arbitrariamente, por ejemplo

$$4\pi \int_0^R \psi_{<}^2(\lambda_1; r) r^2 dr = 1 \quad (2.41)$$

de lo que se obtiene,

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \left[\frac{\sqrt{\mathcal{E}_0}}{\sqrt{2} (2\pi \sqrt{2\mathcal{E}_0} + R^2 \psi_{<}^2(\lambda_1; R))} \right]^{1/2} \sim A \epsilon^{\alpha_h/4} \quad \lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)} \quad (2.42)$$

donde $A > 0$ es una constante, $\epsilon = \lambda_1 - \lambda_1^{(c)}$ y $\psi_{<}^2(\lambda_1; R)$ es estrictamente positivo y finito aún para $\lambda_1 = \lambda_1^{(c)}$. Como no se conoce la forma del potencial cerca del origen, el valor $\psi_{<}(\lambda_1; R)$ esta indeterminado (se necesita la condición de continuidad en la derivada de la función de onda en $r = R$ para obtenerla).

Aquí solamente interesa el valor de la condición de continuidad en el límite $\epsilon \rightarrow 0$. Por un lado se sabe que $\psi_{<}(\lambda_1; R)$ no se anula, luego el coeficiente en la Ec. (2.40) para $r > R$ es positivo y no nulo para $r = R$, entonces puede escribirse la función de onda en la forma

$$\psi_0(\lambda_1; r) = \mathcal{N}(\epsilon) C(\epsilon) \frac{\exp(-\sqrt{2\mathcal{E}_0}r)}{r} \quad \text{donde } C(\epsilon = 0) = C_0 > 0 \quad (2.43)$$

Una vez que obtenida la forma de la función de onda, se puede comenzar a estudiar el comportamiento asintótico de $\langle W \rangle_0(\lambda_1)$:

$$\langle W \rangle_0(\lambda_1) = 4\pi^2 \int_0^\infty dr_1 r_1 \psi_0^2(\lambda_1; r_1) \int_0^\infty dr_2 r_2 \psi_0^2(\lambda_1; r_2) \times \quad (2.44)$$

$$\int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} r_{12} W(r_{12}) \quad (2.45)$$

Hasta aquí no se ha utilizado el hecho que W es un potencial de Coulomb. Reemplazando entonces $W(r_{12}) = 1/r_{12}$ en la expresión para $\langle W \rangle_0(\lambda_1)$ y resolviendo la integral

en r_{12} analíticamente

$$\begin{aligned}
\langle W \rangle_0(\lambda_1) &= 2(4\pi)^2 \int_0^\infty dr_{>} \psi_0^2(\lambda_1; r_{>}) \int_0^{r_{>}} dr_{<} r_{<}^2 \psi_0^2(\lambda_1; r_{<}) = \\
&= 2(4\pi)^2 \mathcal{N}^4 \left\{ \int_0^R dr_{>} \psi_{<}^2(r_{>}) \int_0^{r_{>}} dr_{<} r_{<}^2 \psi_{<}^2(r_{<}) + \right. \\
&\quad C(\epsilon)^2 \int_R^\infty dr_{>} \frac{\exp(-2\sqrt{2\mathcal{E}_0}r_{>})}{r_{>}} \left[\int_0^R dr_{<} r_{<}^2 \psi_{<}^2(r_{<}) + \right. \\
&\quad \left. \left. C(\epsilon)^2 \int_R^{r_{>}} dr_{<} \exp(-2\sqrt{2\mathcal{E}_0}r_{>}) \right] \right\} \quad (2.46)
\end{aligned}$$

Solo debe analizarse el término dominante de la integral al hacer $\epsilon \rightarrow 0$. La primera integral en (2.46) se encuentra en la región $r < R$ y por lo tanto es una constante positiva al evaluar en $\epsilon = 0$. Respecto de las integrales entre corchetes, puede verse que la primera es igual a uno y la segunda es de orden $\epsilon^{-\alpha_h/2}$. Entonces la segunda integral es la dominante. Para reducir el tamaño de las ecuaciones se define β y Δ como $2\sqrt{3\mathcal{E}_0} \sim \beta\epsilon^{\alpha_h/2}$; $\Delta = 2(4\pi)^2 A^4 C_0^4/\beta > 0$. Reemplazando en la integral se obtiene

$$\langle W \rangle_0(\lambda_1) \sim \Delta \epsilon^{\alpha_h} \times \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned}
&\times \int_R^\infty dr_{>} \frac{\exp(-\beta\epsilon^{\alpha_h/2}r_{>})}{r_{>}} \left(\frac{\exp(-\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) - \exp(-\beta\epsilon^{\alpha_h/2}\epsilon r_{>})}{\epsilon^{\alpha_h/2}} \right) \\
&= \Delta \left[\exp(-\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) E_1(\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) - E_1(2\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) \right] \epsilon^{\alpha_h/2}, \quad (2.48)
\end{aligned}$$

en donde $E_1(x)$ es la integral exponencial [44], que diverge en $x = 0$, pero las divergencias se cancelan en la Ec. (2.47), lo que resulta en

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\exp(-\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) E_1(\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) - E_1(2\beta\epsilon^{\alpha_h/2}R) \right] = \ln 2 \quad (2.49)$$

Entonces,

$$\langle W(1, 2) \rangle_0(\lambda_1) \sim \epsilon^{\alpha_h/2} \text{ for } \epsilon \rightarrow 0 \quad (2.50)$$

por lo tanto, de acuerdo con el **lema 2**, el diagrama es del tipo 1 ♣

2.4. Potenciales Coulombianos de una partícula

En esta sección se mostraran ejemplos en los que $v(r)$ es un potencial Coulombiano y se calcularán los distintos diagramas con diferentes potenciales repulsivos. Si bien se utilizó el potencial Coulombiano, los resultados son válidos para potenciales de largo alcance en general. Largo alcance significa que $v(r)$ es tal que $v(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$, y $\lim_{r \rightarrow \infty} v(r)r^2 \rightarrow \infty$. Los potenciales de largo alcance tienen un acople crítico igual a cero, $\lambda_1^{(c)} = 0$.

La solución completa para el Hamiltoniano de una partícula con el potencial $v(r) = -1/r$ esta explicada en muchos libros de texto sobre mecánica cuántica, por ello se la incluye

sin dar muchos detalles de su obtención. La función de onda del estado fundamental y la energía de $h(1) + h(2)$ son

$$\Psi_0(\lambda_1, 0; r_1, r_2, r_{12}) = \psi_0(\lambda_1; r_1) \psi_0(\lambda_1; r_2) = \frac{1}{\pi} \lambda_1^3 e^{-\lambda_1(r_1+r_2)} \quad ; \quad E_0(\lambda_1, \lambda_2 = 0) = -\lambda_1^2. \quad (2.51)$$

Como interacción repulsiva se escogió, como un primer ejemplo, el potencial de corto alcance tipo Yukawa

$$W(r_{12}) = \frac{\exp(-r_{12})}{r_{12}}. \quad (2.52)$$

El primer paso para estimar el diagrama consiste en calcular $\langle W \rangle_0$ utilizando la Ψ_0 de la ec. (2.51). La parte esférica de la repulsión tiene la forma

$$W(r_1, r_2) = \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} r_{12} W(r_{12}) = 2 e^{-r_{>}} \sinh r_{<} \quad (2.53)$$

entonces, para $\langle W \rangle_0$ se obtiene

$$\begin{aligned} \langle W \rangle_0 &= 16 \lambda_1^6 \int_0^\infty r_{>} dr_{>} e^{-2\lambda_1 r_{>}} \int_0^{r_{>}} r_{<} dr_{<} e^{-2\lambda_1 r_{<}} e^{-r_{>}} \sinh r_{<} \\ &= \frac{(1 + 8\lambda_1 + 20\lambda_1^2)}{(1 + 2\lambda_1)^4} \lambda_1^3. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Luego, a partir de este resultado, la energía del sistema tiene una expansión a primer orden en λ_2 de la forma

$$E_0(\lambda_1, \lambda_2) = -\lambda_1^2 + \frac{(1 + 8\lambda_1 + 20\lambda_1^2)}{(1 + 2\lambda_1)^4} \lambda_1^3 \lambda_2 + O(\lambda_2^2) \quad (2.55)$$

Inmediatamente, el atento lector habrá notado que, según el **lema 2**, el diagrama es del tipo 3 ya que $\alpha_h = 2$ (lo cual se ve claramente en la Ec. (2.51)).

Es conveniente, para convencerse de que es un diagrama de tipo 3, observar la forma de la cota inferior $\lambda_2^*(\lambda_1)$ descrita en la Ec. (2.17),

$$\lambda_2^{(c)}(\lambda_1) \geq \lambda_2^*(\lambda_1) = \frac{(1 + 2\lambda_1)^4}{2(1 + 8\lambda_1 + 20\lambda_1^2)} \frac{1}{\lambda_1} \sim \frac{1}{\lambda_1} \quad \text{para } \lambda_1 \rightarrow 0 \quad (2.56)$$

y se obtiene $\lambda_2 = \infty$ como cota inferior, lo que nos dice que $\lambda_2^{(c)} \rightarrow \infty$ para $\lambda_1 \rightarrow 0$.

Una posibilidad, aunque poco común, puede ser que la línea crítica en realidad no exista, es decir el potencial nunca se capaz de ligar las dos partículas. Para asegurar su existencia se calculó la cota superior $\tilde{\lambda}_2(\lambda_1)$ para la línea crítica de la Ec. (2.17). Primero se controló que se cumple la condición (7), es decir $2\mathcal{E}_1(\lambda_1) \geq \mathcal{E}_0(\lambda_1)$. De hecho

$$2\mathcal{E}_n(\lambda_1) = -2 \frac{\lambda_1^2}{2(n+1)^2}, \quad (2.57)$$

para $n = 1$, $2\mathcal{E}_1 = -\lambda_1^2/4 > -\lambda_1^2/2$. El potencial de Yukawa también satisface la condición (8) de modo que puede calcularse $\tilde{\lambda}_2(\lambda_1)$,

$$\tilde{\lambda}_2 = \lambda_1^2 \frac{3}{4} \langle r e^r \rangle_0 = \lambda_1^5 \frac{3(3 - 36\lambda_1 + 140\lambda_1^2)}{2(1 - 2\lambda_1)^6}. \quad (2.58)$$

Puede verse que la cota superior se va a infinito para $\lambda_1 \rightarrow 1/2$, y la cota inferior lo hace para $\lambda_1 \rightarrow 0$. Esto sugiere que en el rango $0 < \lambda_1 < 1/2$ siempre existen estados ligados, no importa cuan grande sea λ_2 . Sin embargo, en el límite esto no es cierto lo que hace sospechar que la divergencia es solo producto de que la cota no es muy ajustada. La Figura 2.2 muestra las cotas variacionales superior e inferior.

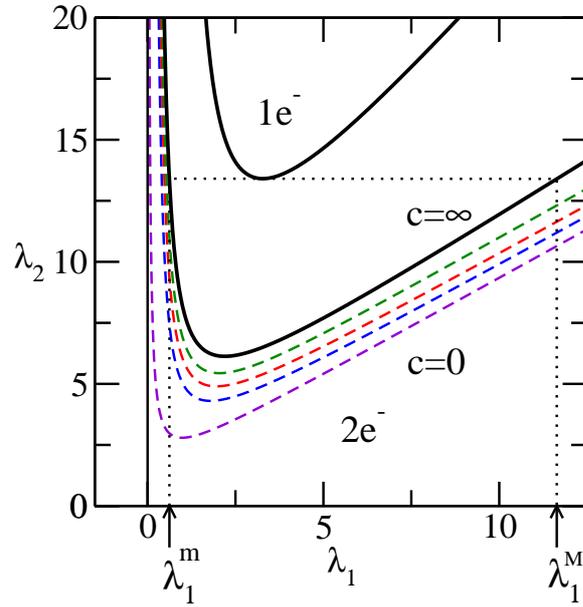


Figura 2.2: Diagrama de estabilidad variacional $\lambda_2^{(v)}(\lambda_1)$ en el caso en que h es un Hamiltoniano hidrogenoide y W es un potencial de Yukawa usando la función de onda variacional de la ec. (2.59) con $\beta = \lambda_1$, y varios valores de c . También se muestra la cota superior de la ec. (2.58). La curva crítica exacta yace entre las dos líneas continuas, la cota superior y la mejor cota inferior ($c = \infty$).

Se pueden obtener cotas inferiores más precisas utilizando funciones variacionales que incluyen correlación entre las partículas, como por ejemplo

$$\psi_v(r_1, r_2, r_{12}) = \frac{8\beta^4}{\sqrt{8\beta^2 + 35\beta c + 48c^2}} e^{-\beta(r_1+r_2)} (1 + c r_{12}), \quad (2.59)$$

en donde β y c son parámetros variacionales. Para esta función se obtiene,

$$\langle \psi_v | T | \psi_v \rangle = \frac{(8\beta^2 + 25\beta c + 32c^2) \beta^2}{8\beta^2 + 35\beta c + 48c^2}, \quad (2.60)$$

$$\langle \psi_v | v(r_1) + v(r_2) | \psi_v \rangle = - \frac{4(4\beta^2 + 15\beta c + 18c^2) \beta}{8\beta^2 + 35\beta c + 48c^2}, \quad (2.61)$$

y

$$\langle \psi_v | W(r_{12}) | \psi_v \rangle = 4 \beta^5 \quad (2.62)$$

$$\times \left\{ \frac{(4\beta(5\beta + 2) + 1)(2\beta + 1)^2 + 4(2\beta(16\beta + 5) + 1)c(2\beta + 1)}{(2\beta + 1)^6 (8\beta^2 + 35\beta c + 48c^2)} + \frac{2(4\beta(35\beta + 9) + 3)c^2}{(2\beta + 1)^6 (8\beta^2 + 35\beta c + 48c^2)} \right\}. \quad (2.63)$$

El cálculo de los parámetros β y c que minimizan la energía no se pudo obtener analíticamente, de modo que se eligió $\beta = \lambda_1$ y se graficó la línea crítica para diferentes valores de $c \in (0, \infty)$ en la Figura 2.2.

Observando el diagrama de estabilidad de la Figura 2.2, y sus cotas, pueden obtenerse algunas conclusiones sobre la línea crítica exacta. Por ejemplo, todos los sistemas con $\lambda_2 < \text{mín}_{\lambda_1} \lambda_2^*(\lambda_1)$ tienen al menos un estado ligado por debajo del umbral. La línea crítica exacta debe tener entonces al menos un mínimo $\lambda_2^{(min)}$ en algún punto $\lambda_1^{(0)}$ entre λ_1^m y λ_1^M , que están definidos como,

$$\lambda_1^m = \left\{ \text{mín}_{\lambda_1} \lambda_1 : \lambda_2^*(\lambda_1) = \text{mín}_{\lambda_1} \tilde{\lambda}_2(\lambda_1) \right\} \quad (2.64)$$

y

$$\lambda_1^M = \left\{ \text{máx}_{\lambda_1} \lambda_1 : \lambda_2^*(\lambda_1) = \text{mín}_{\lambda_1} \tilde{\lambda}_2(\lambda_1) \right\}. \quad (2.65)$$

Este hecho implica que cerca de $\lambda_1^{(0)}$ la curva crítica tiene una expansión $\lambda_2^{(c)}(\lambda_1) \sim \lambda_2^{(min)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \lambda_2^{(c)}}{\partial \lambda_1^2} (\lambda_1 - \lambda_1^{(0)})^2$, con $\frac{\partial^2 \lambda_2^{(c)}}{\partial \lambda_1^2} > 0$. El sistema muestra un comportamiento interesante cerca de este punto.

Para un valor dado de $\lambda_2 > \lambda_2^{(min)}$, al disminuir λ_1 desde $\lambda_1 = \infty$ el sistema cruza las cotas en la secuencia ordenada inferior-superior. Como la línea exacta está en la región comprendida entre las dos cotas, entonces el sistema se hace inestable al disminuir λ_1 (la atracción) como era de esperar. Por otro lado si *se aumenta* λ_1 desde $\lambda_1^{(c)}$, el sistema cruza las cotas en el mismo orden inferior-superior. Por lo tanto, pierde el estado ligado *cuando aumenta el acople atractivo del potencial de una partícula* λ_1 . La Figura (2.3) muestra un dibujo explicativo del proceso descrito aquí. Desde el punto 2 disminuyendo λ_1 el sistema se hace inestable, y desde el punto 1 *aumentando* λ_1 el sistema también se hace inestable!

Una explicación física de este comportamiento puede hacerse en términos de los alcances de los potenciales involucrados. Si λ_1 es suficientemente grande, y λ_2 es fijo, el sistema es capaz de ligar dos partículas, no importa cuán repulsivo sea W . Con un menor acople λ_1 el sistema pierde el estado ligado debido a que la repulsión W es muy fuerte frente a la

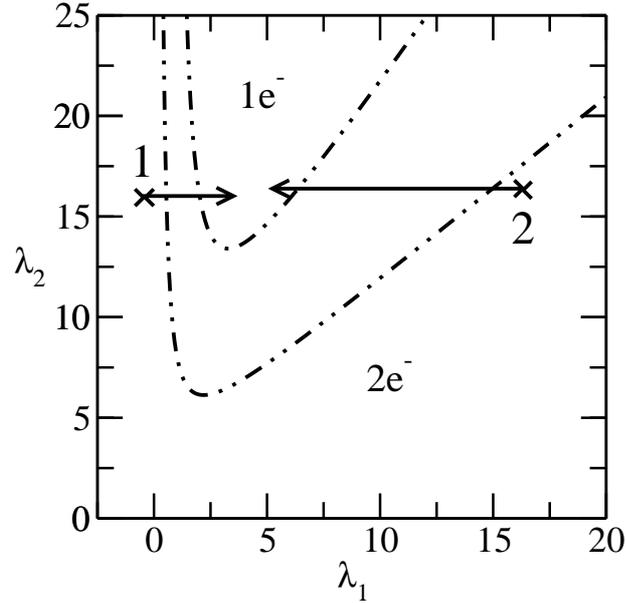


Figura 2.3: Dibujo explicativo del comportamiento para los diagramas de tipo 3. Las curvas de líneas y puntos son cotas superiores e inferiores a la línea crítica exacta. Los puntos 1 y 2 representan sistemas con estados fundamentales ligados que se desligan cuando λ_1 aumenta o disminuye, respectivamente.

atracción. Pero, cerca de $\lambda_1^{(c)}$, a partir del comportamiento crítico de sistemas débilmente ligados, la función de onda se deslocaliza y la distancia entre partículas diverge. De hecho, $\langle r_{12} \rangle_0 \sim 1/\lambda_1$, con lo cual la repulsión de corto alcance W se hace despreciable y puede ser ignorada por que la distancia entre partículas es mayor que el alcance del potencial repulsivo. El sistema se estabiliza nuevamente debido a la atracción Coulombiana de largo alcance.

Si W es de largo alcance, este argumento no es válido. Es más, para $W(r_{12}) \geq 1/r_{12}$ la cota superior de la línea crítica prohíbe este comportamiento. Por otro lado, si $W = \exp(-\sigma r)/r$ con $\sigma > 0$, el sistema siempre muestra la *reentranza* cerca de $\lambda_1^{(c)} = 0$, porque la cota inferior λ_2^* diverge como $1/\lambda_1$.

Resultados en otros potenciales:

1. Como $W = 1/r_{12}$ es un potencial homogéneo, puede obtenerse la forma funcional de la línea crítica [2] $\lambda_2^{(c)} = C \lambda_1 \sim 1.1 \lambda_1$. No hay una línea 2-0, por lo tanto el diagrama es del tipo 1. El estado fundamental es normalizable en $\lambda_2 = \lambda_2^{(c)}(\lambda_1)$ [2], por lo que el exponente de la energía es $\alpha_{\mathcal{H}} = 1$.
2. Las cotas superiores e inferiores para el potencial de Yukawa se pueden usar para probar, con argumentos variacionales, que las líneas críticas para otros potenciales repulsivos existen, manteniendo el mismo potencial atractivo. Supongamos que

tenemos 2 potenciales W_a y W_b tal que $W_b > W_a$. Sean los Hamiltonianos correspondientes

$$\mathcal{H}_\gamma = h(1) + h(2) + \lambda_2 W_\gamma \quad \gamma = a, b \quad (2.66)$$

y $|\gamma\rangle$ el estado fundamental de \mathcal{H}_γ , entonces

$$\begin{aligned} E_a(\lambda_1, \lambda_2) &\leq \langle b | \mathcal{H}_a | b \rangle \\ &= E_b(\lambda_1, \lambda_2) + \lambda_2 \langle b | W_a - W_b | b \rangle \\ &\leq E_b(\lambda_1, \lambda_2). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Esta relación para las energías implica que $\lambda_2^{(c)}(a) \geq \lambda_2^{(c)}(b)$, lo que significa que si existe una cota superior(inferior) para $\lambda_2^{(c)}(a)$ ($\lambda_2^{(c)}(b)$), entonces esta es también una cota superior(inferior) para $\lambda_2^{(c)}(b)$ ($\lambda_2^{(c)}(a)$). Utilizando el punto anterior, si $W > 1/r \forall r$, no existe una línea 2-0, y el diagrama es del tipo 1 (esto no incluye potenciales $1/r^n$ con $n > 1$, salvo que el decaimiento del potencial se cambie por $1/r$).

3. Para $W = 1/r^\beta$ y $2 \leq \beta < 3$ puede verse que $\langle W \rangle_0 \sim \lambda_1^\beta$. El diagrama es del tipo 3 para $\beta > 2$ y del tipo 2 o 3 para $\beta = 2$. Para $\beta \rightarrow 3$, $\langle W \rangle_0 \rightarrow \infty$ para todo λ_1 .
4. Si W tiene un decaimiento repulsivo de corto alcance y un comportamiento $1/r^2$ en el origen, $\langle W \rangle_0 \sim \lambda_1^3$, y el diagrama es del tipo 3.

El último punto muestra que el comportamiento en $r = 0$ de la repulsión es también importante en el comportamiento de $\langle W \rangle_0$ cuando $\lambda_1 \rightarrow 0$.

Finalmente estudiamos el caso de un potencial en el cual las dos cotas son finitas para todo λ_1 , y por lo tanto el diagrama es del tipo 2. En este caso se cambió el método y en realidad se investigó cómo debe ser el potencial para que esto ocurra, basándonos en los resultados obtenidos. Se buscó un potencial acotado que cumpla $W(r) < 1/r$, de modo que la línea crítica está por arriba de la que corresponde a $W = 1/r$. Por otro lado, para un potencial con decaimiento $1/r^2$ el diagrama es del tipo 2 o 3 con lo cual una modificación de este potencial es un buen candidato. La propuesta, que cumple con lo requerido, es

$$W = \left(-\frac{r^2}{2} + \frac{3}{2} \right) \Theta(1-r) + \frac{1}{r^2} \Theta(r-1). \quad (2.68)$$

Este potencial cumple con la condición (7), de modo que pueden calcularse las cotas superior e inferior como se muestra en la Figura 2.4. Los valores límites de las cotas son

$$\lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} \lambda_2^*(\lambda_1) = \lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} \frac{|\mathcal{E}_0(\lambda_1)|}{\langle W \rangle_0} = \frac{4}{3} \quad (2.69)$$

$$\lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} \tilde{\lambda}_2(\lambda_1) = \lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} 2(\mathcal{E}_1(\lambda_1) - \mathcal{E}_0(\lambda_1)) \left\langle \frac{1}{W} \right\rangle_0 = \frac{9}{2} \quad (2.70)$$

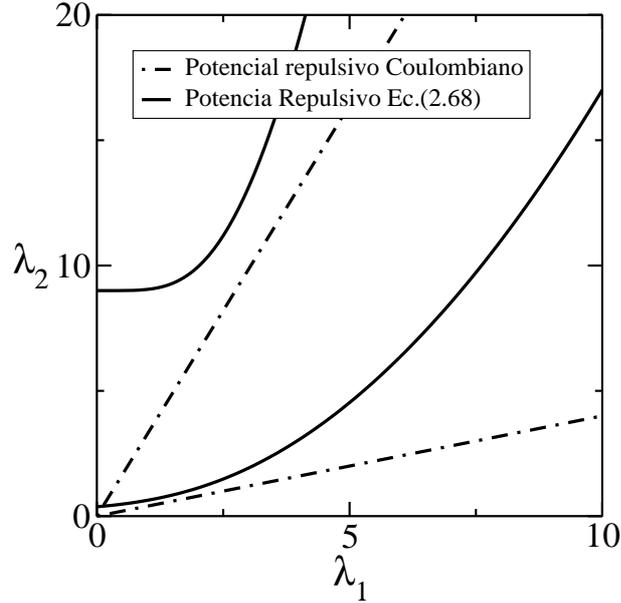


Figura 2.4: Cotas superiores e inferiores para el potencial repulsivo W de la Ec. (2.68). Se muestran, para comparar, las cotas obtenidas con $W = 1/r$.

2.4.1. Existencia de líneas críticas para una gran clase de potenciales W

En las secciones anteriores se probó que si $W(r) = e^{-r}/r$, entonces existe una línea crítica, al menos para $\lambda_1 > 1/2$. Si se hace una dilatación $r \rightarrow \tau r$ en el Hamiltoniano, y reescalamos la energía $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}\tau^2$, se obtiene que

$$\mathcal{H}(\lambda_1, \lambda_2) \rightarrow \mathcal{H}(\lambda_1/\tau, \lambda_2/\tau) \quad (2.71)$$

entonces la cota obtenida para el potencial de Yukawa ahora se convierte en

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(c)}(\tau) &= \lambda_1^{(c)}(1) \tau \\ \lambda_2^{(c)}(\tau) &= \lambda_2^{(c)}(1) \tau, \end{aligned} \quad (2.72)$$

que es una cota superior para $e^{-\tau r}/r$. Cuando $\tau \rightarrow 0$ se observa que la cota superior (2.58) tiende a $105 \lambda_1/64$, lo que corresponde a la cota obtenida para $W(r) = 1/r$. La cota mantiene la divergencia en $\lambda_1 = \tau/2 \forall \tau > 0$, y desaparece para $\tau = 0$.

Utilizando esta familia de cotas superiores puede probarse la existencia de líneas críticas para muchos potenciales. Por ejemplo, potenciales de la forma $1/r^n$ con $n > 1$ satisfacen la condición $1/r^n > e^{-\tau(n)r}/r$, con $\tau(n) \geq (n-1)/e$, de modo que existen las líneas críticas para estos potenciales. De hecho, para $\lambda_2 = 0$ siempre existe por lo menos un estado ligado. Luego, de la continuidad de la energía en λ_2 , concluimos que existe una

región con $\lambda_2 > 0$ debajo de la cota superior donde el sistema soporta un estado ligado normalizable.

La existencia de la línea 2–1 también puede probarse para potenciales de corto alcance finitos en el origen. Para lograr esto se utilizó un potencial exponencial e^{-r} , cuya cota superior tiene la forma

$$\tilde{\lambda}_2 = \lambda_1^2 \frac{3}{4} \langle e^r \rangle_0 = \lambda_1^5 \frac{3(1 - 10\lambda_1 + 32\lambda_1^2)}{4(2\lambda_1 - 1)^5}. \quad (2.73)$$

Al igual que en el caso del potencial de Yukawa, esta cota permite obtener una para el potencial $e^{-\tau r}$,

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(c)}(\tau) &= \lambda_1^{(c)}(1) \tau \\ \lambda_2^{(c)}(\tau) &= \lambda_2^{(c)}(1) \tau^2. \end{aligned} \quad (2.74)$$

La cota es en realidad una herramienta que puede utilizarse para probar la existencia de las líneas críticas de todo potencial que cumpla las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} W(0) &\geq 1 ; \quad W'(0) \geq -\tau \\ W(r) &> e^{-\tau r} \quad \forall \quad r > 0 \quad \text{para algún } \tau > 0. \end{aligned} \quad (2.75)$$

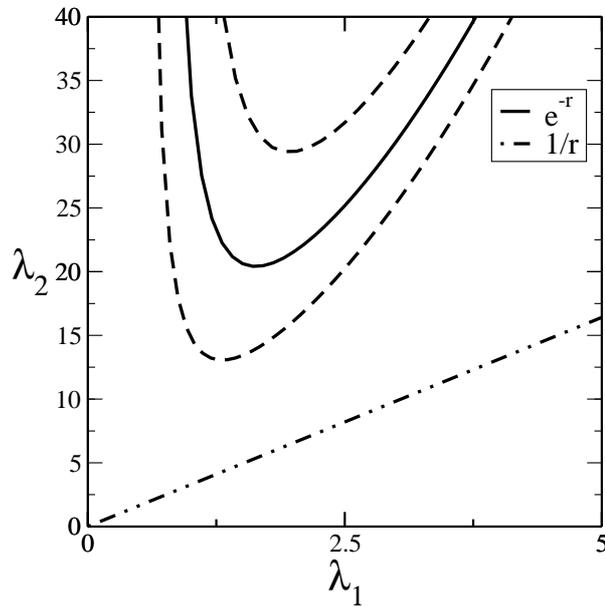


Figura 2.5: El gráfico muestra las cotas superiores dadas por (2.58) y (2.73) para el potencial exponencial y el potencial Coulombiano (trazos y puntos). También se muestra dos cotas para dos exponenciales (trazos) $e^{-\tau r}$ con $\tau = 0.8, 1.2$ obtenidas de (2.74).

2.5. Conclusiones del capítulo

En este capítulo hemos introducido los conceptos e ideas para definir el comportamiento de sistemas cerca del umbral. Los aplicamos a sistemas de dos partículas idénticas que se ven atraídas por un potencial externo que puede o no, ser generado por un núcleo atómico. El trabajo en su mayoría consistió en descifrar cuales son los escenarios posibles para los diagramas de estabilidad del estado fundamental cerca del umbral de energía correspondiente. Dentro de este ámbito discutimos también el valor que toma el exponente crítico de la energía en las diferentes líneas críticas del diagrama.

Los diagramas de estabilidad fueron clasificados en tres tipos, de acuerdo a lo mostrado en la Figura 2.1. Algo digno de destacarse es que los tres tipos de diagramas son posibles si la interacción atractiva es Coulombiana.

El resultado más relevante del capítulo es la *reentranza* que puede ocurrir en algunos sistemas de dos partículas cuando se disminuye la constante de acople atractiva. El efecto es consecuencia directa de la competición existente entre el potencial atractivo de largo alcance y la repulsión de corto alcance entre las partículas idénticas. Si el exponente crítico de la energía de una partícula es mayor que 1, los estados fundamentales de una partícula aumentan considerablemente su tamaño cerca del umbral. Al disminuir la constante de acople y acercarnos al umbral, el sistema aumenta su tamaño y la repulsión de corto alcance entre partículas idénticas deja de ser relevante.

Respecto del comportamiento crítico logramos probar que $\alpha_{\mathcal{H}} > 1$ sobre una línea $2-0$, y por lo tanto la función de onda se extiende cuando $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^{(c)-}$ para $\lambda_2 < \lambda_2^{(mc)}$ fijo. De todas formas, hay varios puntos que quedaron sin respuesta. Uno de los más relevantes es el valor del exponente sobre la línea crítica $2-1$. No hemos logrado demostrar en forma rigurosa cuál es el valor de este exponente, pero podemos argumentar que $\alpha_{\mathcal{H}} = 1$, y luego existe una función normalizable de dos partículas sobre dicha línea. Sobre la línea $2-1$ el Hamiltoniano de una partícula tiene un estado fundamental bien definido y cuya energía es negativa. Por otro lado, dos partículas idénticas en un estado fundamental poseen el mismo juego de números cuánticos espaciales. La función de onda del estado fundamental de un sistema de dos partículas no puede entonces transformarse continuamente (extendiéndose) en un estado correspondiente a una partícula ligada y una libre, de modo que el exponente crítico tiene que valer 1 sobre la línea crítica $2-1$. Es decir, no existe en el Hamiltoniano una diferencia entre las partículas que provoque la separación de una de ellas más que la otra. El sistema mantiene las dos partículas ligadas hasta valores muy cercanos al crítico y luego pierde una partícula al atravesar la línea.

En los capítulos siguientes (3 y 4) estudiaremos algunos sistemas que incluyen partículas distinguibles. Veremos que el comportamiento crítico depende sensiblemente de las propiedades de simetrización y del umbral de energía. Una pregunta abierta que no respondimos en este capítulo es cuál es el valor del exponente crítico en el punto $(\lambda_1^{(c)}, \lambda_2^{(mc)})$, si el diagrama es del tipo 2. En el capítulo 3 investigaremos sobre sistemas que incluyen puntos en el diagrama de estabilidad en los cuales las líneas $2-1$ se transforma en una $2-0$. El punto en que esto sucede es equivalente al $(\lambda_1^{(c)}, \lambda_2^{(mc)})$ estudiado aquí y veremos que su comportamiento crítico cambia notablemente.

...Y cuál es el papel que me has destinado en tu plan, El de mártir, hijo mío, el de víctima, que es lo mejor que hay para difundir una creencia y enfervorizar una fe. Las dos palabras, mártir, víctima, salieron de la boca de Dios como si la lengua que dentro tenía fuese de leche y miel, pero un súbito hielo estremeció de horror a los miembros de Jesús, parecía que la niebla se hubiese cerrado sobre él, al mismo tiempo que el Diablo lo miraba con expresión enigmática, mezcla de interés científico e involuntaria piedad. Me dijiste que me darías poder y gloria, balbuceó Jesús, temblando aún de frío, Y te los daré, te los daré, pero recuerda lo que acordamos en su día, lo tendrás todo, pero después de la muerte, Y de que me sirven poder y gloria si estoy muerto, Bien, no estarás precisamente muerto, en el sentido absoluto de la palabra, pues siendo tú mi hijo estarás conmigo, o en mí, aún no lo tengo decidido de manera definitiva, En ese sentido que dices, qué es no estar muerto, Es, por ejemplo, ver, siempre, cómo te veneran en templos y altares, hasta el punto, puedo adelantártelo ya, de que las personas del futuro olvidarán un poco al Dios inicial que soy, pero eso no tiene importancia, lo mucho puede ser compartido, lo poco no. Jesús miró a Pastor, lo vió sonreír, y comprendió, Ahora entiendo por que esta aquí el Diablo, si tu autoridad se prolonga a más gente y a más países, también se prolongará su poder sobre los hombres, pues tus límites son sus límites, ni un paso más, ni un paso menos,...

José Saramago, “ El Evangelio según Jesucristo”.

Capítulo 3

Tres cargas unitarias con interacciones apantalladas

En este capítulo estudiaremos sistemas de tres partículas inmersos en plasmas de Debye. La particularidad de estos sistemas es que las interacciones entre ellas se ven apantalladas. Veremos que este cambio en la forma de las interacciones fundamentales entre partículas genera una cascada de nuevas propiedades y fenómenos que no están presentes cuando las interacciones son del tipo Coulombiano. En particular haremos énfasis en la existencia de estados borromeos y del efecto Efimov. Incluimos también un análisis del comportamiento crítico de la energía y los diagramas de estabilidad para el estado fundamental.

3.1. Introducción

El plasma es un estado de la materia que puede describirse como un conjunto de electrones con un fondo uniforme de carga positiva. A pequeña escala el sistema se debería poder describir como un conjunto de muchas colisiones de dos cuerpos, sin embargo en una escala mayor esto no es así. Si, por ejemplo, en algún punto del espacio aparece un exceso de carga positiva los electrones se verán atraídos hacia ese punto (venciendo la repulsión entre ellos)y neutralizarán el exceso. En forma colectiva esto da origen a las oscilaciones en los plasmas, que es prácticamente una rama de la física actual. Las oscilaciones también tienen el efecto de reducir el alcance de la interacción Coulombiana entre electrones, algo que nosotros utilizaremos aquí.

La interacción apantallada en los plasmas

Se puede hacer una derivación rápida de cual es la forma de las interacciones apantalladas a partir de un modelo electrostático. Como dijimos, un plasma es una colección de electrones en un fondo de cargas positivas. Vamos a suponer que en equilibrio térmico el potencial electrostático al que se ven sometidos es Φ . De acuerdo con esto la distribución de electrones esta dado por el factor de Boltzmann $e^{-\frac{-e\Phi}{kT}}$, en donde $-e\Phi$ es la Energía potencial de un electrón. La densidad espacial de electrones es entonces

$$n(\mathbf{x}) = n_0 e^{\frac{-e\Phi}{kT}}. \quad (3.1)$$

en donde n_0 es la densidad uniforme de fondo. Para determinar el potencial de interacción vamos a utilizar la ecuación de Poisson. Planteamos entonces cual es el potencial que sufre una carga de prueba ubicada en el origen debido a la densidad electrónica $e n_0$ y el fondo uniforme de iones positivos. Tenemos que

$$\nabla^2\Phi = -4\pi Ze\delta(\mathbf{x}) - 4\pi en_0 \left[e^{\frac{-e\Phi}{kT}} - 1 \right]. \quad (3.2)$$

Si la energía térmica es suficiente para remover los electrones de los posibles pozos de potencial que puedan existir, podemos asumir que $\frac{-e\Phi}{kT}$ es pequeño. La Ec. (3.2) se puede linearizar ($e^{-r} \approx 1 - r$), y se obtiene

$$\nabla^2\Phi - \sigma_D^2\Phi = -4\pi Ze\delta(\mathbf{x}) \quad (3.3)$$

en donde

$$\sigma_D^2 = \frac{4\pi n_0 e^2}{kT}. \quad (3.4)$$

La Ec. (3.3) tiene la solución esféricamente simétrica

$$\Phi(r) = Ze \frac{e^{-\sigma_D r}}{r} \quad (3.5)$$

lo que muestra que los electrones se mueven de una forma en que el campo Coulombiano de una partícula se ve apantallado a una distancia del orden de σ_D^{-1} .

Las interacciones Coulombianas entre las partículas dentro del plasma se ven apantalladas por la presencia del mismo. Una forma simple de describir este apantallamiento es la de reemplazar las interacciones Coulombianas de largo alcance por interacciones tipo Yukawa $\exp(-\sigma r)/r$. El parámetro de apantallamiento σ simula plasmas de diferente tipo, desde $\sigma = 0$ para vacío, hasta grandes valores de σ para plasmas ionizados térmicamente.

Algunos sistemas de tres cargas unitarias que ya han sido estudiados en plasmas son H_2^+ , $pp\mu^-$, Ps^- , H^- [23, 20, 21, 22]. Para el H_2^+ se encontró que el estado fundamental si es Borromeano [23], siendo este resultado la razón de nuestro estudio de estos sistemas.

Uno de los fenómenos que aparece cuando las interacciones son heterogéneas (de corto y largo alcance) son los llamados estados Borromeanos. Un sistema de N partículas tiene un

estado ligado Borromeano cuando todos los posibles subsistemas son inestables. Inestable aquí significa que ninguno de los subsistemas soporta un estado ligado con energía por debajo del correspondiente umbral del continuo. Para $N = 3$ podemos poner dos ejemplos: el anión $H^- (+M, -m, -m)$ o la molécula ionizada $H_2^+ (+M, +M, -m)$. Diremos que cualquiera de los dos sistemas es Borromeano si el único posible subsistema, el átomo de hidrógeno $H (+M, -m)$ no tiene estados ligados. Recordemos que esto es posible ya que las interacciones son apantalladas y el espectro del átomo de hidrógeno no posee un punto de acumulación de energías en el cero, como en el caso puramente Coulombiano.

El campo de estudio en el que nacieron los estados Borromeanos fue el de la teoría nuclear. La principal razón es que en algunos casos experimentalmente comprobables los estados Borromeanos presentan halos cuánticos en los núcleos atómicos. La inversa, sin embargo, no es cierta, muchos sistemas nucleares presentan halos sin poseer estados Borromeanos [17]. El nombre de estos estados fue tomado por la relación que existe entre ellos y los anillos Borromeanos. Una interesante cantidad de iconos, logos, escudos heráldicos e interrelaciones de historias pueden encontrarse en la web. Es por ello que incluimos algo sobre la epistemología del nombre adoptado para estos estados en la sección 1.2 de la introducción. Como dijimos anteriormente, el hecho de que la molécula de hidrógeno ionizada (H_2^+) presenta estados Borromeanos al estar inmersa en un plasma, nos motivó a tratar de determinar la estabilidad del estado fundamental de este tipo de sistemas. Estudiamos la estabilidad frente a cambios en el plasma (cambiando el apantallamiento σ) con las masas constituyentes fijas y también la estabilidad de otros sistemas, tomando a las masas constituyentes como parámetros continuos.

3.2. Hamiltoniano de tres partículas

El Hamiltoniano de un sistema inmerso en un plasma de Debye debe ser tal que represente las interacciones efectivas que ocurren dentro de él. Como explicamos anteriormente la forma de representar las interacciones apantalladas por el plasma es reemplazar el potencial Coulombiano entre cargas por un potencial de Yukawa. Los sistemas que estudiamos en este capítulo son del tipo H^- , H_2^+ , por lo tanto una de las cargas tiene el signo opuesto a las otras dos. Para el caso de cargas unitarias el Hamiltoniano tiene la siguiente forma,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{1}{2m_2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2m_3}\nabla_3^2 + \frac{e^{-\sigma|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} - \frac{e^{-\sigma|\vec{r}_2-\vec{r}_3|}}{|\vec{r}_2-\vec{r}_3|} - \frac{e^{-\sigma|\vec{r}_1-\vec{r}_3|}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_3|}. \quad (3.6)$$

Recordamos aquí que utilizamos unidades atómicas a lo largo de esta Tesis. En el Hamiltoniano podemos reconocer los términos de energía cinética para cada una de las cargas y las interacciones entre pares de cargas. Notar que hemos enumerado con 3 a la carga de signo opuesto a 1 y 2. Tampoco utilizamos los términos *positivo* y *negativo* para denominar el signo de las cargas. Esto se debe a que el sistema tiene una simetría que permite cambiar el signo todas sus cargas y lo deja invariante. Este hecho no es tan sorprendente, ya que la denominación positivo y negativo de una carga carece de

significado si la misma no esta en presencia de otra. Aún así solo es relevante el signo relativo.

Continuando con el análisis del Hamiltoniano, con el fin de reducir la dimensión del espacio de trabajo realizamos la transformación usual al centro de masa y referimos las posiciones de las partículas 1 y 2 a la posición de 3,

$$\left. \begin{array}{l} \vec{r}_1 \\ \vec{r}_2 \\ \vec{r}_3 \end{array} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \vec{R}_{CM} \\ \vec{r}_1 - \vec{r}_3 \rightarrow \vec{r}_1 \\ \vec{r}_2 - \vec{r}_3 \rightarrow \vec{r}_2 \end{array} \right. .$$

Omitiendo el término de energía cinética correspondiente al centro de masa, podemos reescribir el Hamiltoniano en la forma,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2\mu_1}\nabla_1^2 - \frac{1}{2\mu_2}\nabla_2^2 - \frac{1}{m_3}\nabla_1 \cdot \nabla_2 - \frac{e^{-\sigma r_1}}{r_1} - \frac{e^{-\sigma r_2}}{r_2} + \frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}} . \quad (3.7)$$

en donde hemos definido la nueva variable $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ y las masas reducidas de 1 y 2 respecto de 3, $\mu_i = \frac{m_i m_3}{m_i + m_3}$; $i = 1, 2$. Debido a la transformación aparece también el término $\nabla_1 \cdot \nabla_2$, llamado de Hughes-Eckart o de polarización de masas. Tras el análisis de resultados y algunos indicios analíticos veremos que este término juega un importante papel en la formación de estructuras. La ecuación de Schrödinger para el sistema es

$$\mathcal{H}\Psi_0(r_1, r_2, r_{12}) = E_0(\mu_1, \mu_2, m_3, \sigma)\Psi_0(r_1, r_2, r_{12}), \quad (3.8)$$

en donde Ψ_0 es la parte espacial de la función de onda. Como explicamos en el capítulo 2 el espinor puede ser elegido de forma de asegurar la simetrización correcta. Resolver la Ec. 3.8 nos permitirá encontrar la energía E_0 de los sistemas $(\pm m_1, \pm m_2, \mp m_3; \sigma)$, en donde los signos delante de las masas indican el signo de las cargas. Para estudiar la disociación¹ de este y cualquier otro sistema, debemos conocer o establecer cual es la energía de umbral relevante (en adelante, *el umbral*) para cada elección de las masas constituyentes. El umbral es la menor energía de los estados fundamentales de los dos posibles subsistemas $(\pm m_1, \mp m_3; \sigma)$ y $(\pm m_2, \mp m_3; \sigma)$. Cuando la energía de las tres partículas es mayor que la de umbral, el sistema se disocia por que existe una configuración menos energética, un átomo y una partícula libre. El Hamiltoniano de dos partículas es

$$h^{(i)}(\mu_i, \sigma) = -\frac{1}{2\mu_i}\nabla_i^2 - \frac{e^{-\sigma r_i}}{r_i}; \quad i = 1, 2, \quad (3.9)$$

Sin pérdida de generalidad podemos suponer que $m_1 \geq m_2$, lo que implica $\mu_1 \geq \mu_2$. Usando el principio variacional podemos probar que para un valor fijo de apantallamiento

¹Aquí se podría decir *ionización* en lugar de disociación, sin embargo el verbo ionizar, según la Real Academia Española de Lenguas, se utiliza cuando el producto del proceso químico incluye iones. Los productos de las *reacciones* estudiadas aquí son iones si pensamos en el proceso de adquirir una carga. Por lo tanto utilizaremos ambos indistintamente.

σ , el estado fundamental del Hamiltoniano $h^{(1)}$ tiene menor energía que el de $h^{(2)}$. La prueba es,

$$\mathcal{E}_0^{(1)} \leq \langle h^{(1)} \rangle_2 = \mathcal{E}_0^{(2)} + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 \rangle_2 \left(\frac{1}{\mu_2} - \frac{1}{\mu_1} \right) \leq \mathcal{E}_0^{(2)}. \quad (3.10)$$

en donde $\mathcal{E}_0^{(i)}$, $i = 1, 2$ son las energías de los estados fundamentales de los Hamiltonianos en la Ec. (3.9) y $\langle h^{(1)} \rangle_2$ es el valor medio del Hamiltoniano $h^{(1)}$ en el estado fundamental de $h^{(2)}$. Vemos entonces que el umbral corresponde a la energía del subsistema con mayor masa. Esta información la podemos utilizar para escoger una escala apropiada para las masas. Si $m_1 > m_2$ y fijamos apantallamiento σ , el umbral solo depende de μ_1 y entonces escogemos la escala con la condición $\mu_1 = 1$ de modo que el umbral solo depende de σ , $\mathcal{E}_0(\sigma) \equiv \mathcal{E}_0(1, \sigma)$. En esta escala puede verse que $m_3 = 1 + \frac{m_3}{m_1}$ por lo tanto $m_3 \in [1, \infty]$.

La masa reducida μ_2 puede escribirse como $\frac{\frac{m_3}{m_1} + 1}{\frac{m_3 m_1}{m_1 m_2} + 1}$, y dado que $m_1/m_2 > 1$ el intervalo de valores de μ_2 es $[0, 1]$.

El umbral, como dijimos anteriormente, es la energía del estado fundamental del subsistema con mayor masa. Esto es cierto siempre y cuando *exista* un estado fundamental de dos partículas. Si ninguno de los dos subsistemas soporta estados ligados, la energía de umbral es cero. Lo que sucede es que la energía del estado fundamental disminuye con el aumento del apantallamiento, hasta que alcanza el cero de energía. La existencia de una constante de acople crítica, para la cual $\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma}_c) = 0$, fue probada por Klaus y Simon [3] para potenciales de corto alcance. El valor de $\tilde{\sigma}_c$ ya ha sido obtenido anteriormente en forma numérica [16, 45, 46] para el potencial de Yukawa. Aquí utilizamos el método variacional de Rayleigh Ritz, descrito en [16], con polinomios de Laguerre hasta orden $n = 1400$ para calcular $\mathcal{E}_0(\sigma)$, y obtuvimos $\tilde{\sigma}_c \approx 1.1904$. Si el apantallamiento reescalado σ/μ es mayor que $\tilde{\sigma}_c$ entonces no existen estados ligados de dos partículas. En este punto, si el sistema de tres partículas es capaz de ligar un estado diremos que es Borromeano. A continuación daremos una breve explicación de los metodos utilizados para calcular las energías.

3.3. Método variacional de Rayleigh-Ritz

Para estimar las energías del estado fundamental utilizamos el método variacional de Rayleigh y Ritz con una base no ortogonal del espacio de Hilbert [47]. Trabajamos con el conjunto de funciones base tipo Hylleraas,

$$\Phi_n^{(\gamma, \delta)} = e^{-(\gamma r_1 + \delta r_2)} r_1^i r_2^j r_{12}^k \quad ; \quad n = 1, \dots, M(N) \quad ; \quad i, j, k = 0, \dots, N. \quad (3.11)$$

en donde (γ, δ) son parámetros no lineales que mantenemos fijos. El número $M(N) = (N + 1)^3$ es el tamaño de las matrices en el caso de partículas distinguibles. Si las partículas son idénticas ($m_1 = m_2$) las funciones de base deben ser simetrizadas y el tamaño de las matrices se reduce a $M(N) = (N + 1)^2(N + 2)/2$ (ver Apéndice A). Para un dado conjunto

base $\{\Phi_i\}_1^M$ de tamaño M , la aproximación óptima para la energía del estado fundamental esta dada por el mínimo autovalor del siguiente problema de autovalores generalizado,

$$H^{(N)}\mathbf{c}^{(N)} = \lambda \mathcal{M}^{(N)} \mathbf{c}^{(N)}, \quad (3.12)$$

en donde

$$(H^{(N)})_{kj} = \langle \Phi_k | \mathcal{H} | \Phi_j \rangle, \quad \mathcal{M}_{kj}^{(N)} = \langle \Phi_k | \Phi_j \rangle. \quad (3.13)$$

Su correspondiente función de onda es la representada por el autovector del mínimo autovalor. Básicamente resolvemos la ecuación de Schrödinger dentro del subespacio de dimensión M expandido por el conjunto base. Las aproximaciones a la energía y la función de onda son,

$$E_0 \leq E_0^{(N)} = \min\{\lambda_i\} \quad ; \quad \Psi_0 \simeq \Psi_0^{(N)} = \sum_{j=1}^{M(N)} c_{0,j}^{(N)} \Phi_j \quad (3.14)$$

en donde $\{\lambda_i\}_1^M$ son los autovalores de $H^{(N)}$, y $\mathbf{c}_0^{(N)}$ es el autovector correspondiente a $E_0^{(N)}$.

La matriz de *solapamiento* \mathcal{M} (la matriz de *overlap*), es igual a la identidad si la base es ortogonal y el problema generalizado Ec. (3.12) se convierte en uno común. Ese no es nuestro caso y debemos mapear el problema generalizado a uno común aplicando una descomposición de Cholesky a la matriz de solapamiento \mathcal{M} [48].

Los parámetros no lineales de la base fueron elegidos de forma tal que minimicen la energía en regiones de interés del espacio de parámetros lineales. La minimización se realizó con algoritmos de minimización estándar para más de una dimensión obtenidos de [48]. La misma se realizó con tamaño de base $N = 4$ dando como resultado ($\gamma = 0.36, \delta = 0.13$). Para todos los tamaños de base mayores, se utilizaron los mismos valores ya que realizar una minimización es computacionalmente muy costoso, inclusive para $N = 4$ (75 funciones de base). La razón mas importante es que para cada conjunto de parámetros no lineales se deben calcular integrales y realizar la descomposición de Cholesky con muchas cifras significativas (≈ 180) para no perder precisión.

El conjunto de funciones base puede tener problemas numéricos para algunas regiones del espacio de parámetros del Hamiltoniano. Para chequear nuestros resultados, calculamos también la energía usando una combinación lineal de 10 funciones exponenciales de la forma $\exp(-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_{12})$; $i = 1, \dots, 10$. Con esta base utilizamos el método de Ritz en conjunto con el método de pivoteo para realizar una optimización global [49] y obtener los valores de los 30 parámetros variacionales no lineales.

Todas las integrales necesarias para la evaluación de los elementos de matriz las obtuvimos en forma cerrada y como expresiones analíticas, ver [50] y el apéndice A.1. Para poder evaluar las integrales y realizar la descomposición de Cholesky en forma correcta hasta 16 cifras significativas, desarrollamos un código en FORTRAN que trabaja con precisión arbitraria utilizando FORTRAN multiprecisión [51]. FORTRAN multiprecisión es una extensión de FORTRAN 90 que permite establecer un número arbitrario de cifras significativas para trabajar, con una ventaja notable en rapidez de cálculo sobre aplicaciones más complejas como MAPLE o MATHEMATICA. Una vez calculadas las integrales,

el problema de autovalores se resuelve usando precisión doble, algo estándar en un código FORTRAN.

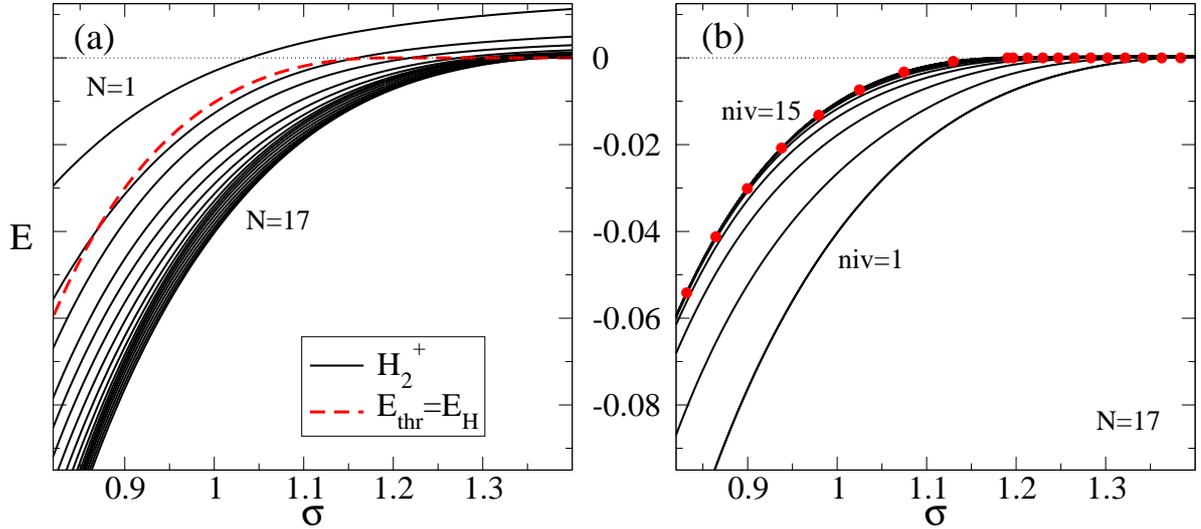


Figura 3.1: Energía del estado fundamental del H_2^+ inmerso en plasma como función del apantallamiento σ . Las mismas fueron obtenidas con el método de Rayleigh-Ritz utilizando la base de la Ec. (3.11). (a) Las bases utilizadas corren de $N = 1, \dots, 17$. También se muestra la energía del estado fundamental del H , el único subsistema del H_2^+ . (b) Las primeras 15 autoenergías del espectro de Ritz obtenidas con una base de $N = 17$. Los puntos rojos indican la energía del H .

La Figura 3.1 muestra la energía del estado fundamental del H_2^+ inmerso en plasma, obtenida con diferentes tamaños de base. La masa relativa utilizada para los cálculos fue $\frac{m_3}{m_1} = 1836.1527$ obtenida del sitio web del National Institute for Standards and Technology². Se observa una buena convergencia de las curvas de energía obtenidas con N creciente. El ión molecular H_2^+ tiene un estado fundamental Borromeano y es estable aún cuando el Hidrógeno inmerso en plasma H (el único subsistema posible) es inestable. En la parte (b) de la figura, se ve como las primeras 15 energías que entrega el método de Ritz se adensan en el umbral del continuo, que corresponde a la energía del Hidrógeno. Claramente, el H_2^+ no solo tiene un estado Borromeano, sino que presenta muchos estados por debajo de cero cuando el Hidrógeno ya no es estable. Esto, veremos luego, se debe a la presencia del Efecto Efimov para el H_2^+ .

3.4. Diagramas de Estabilidad

En un diagrama de estabilidad se muestran las líneas críticas del estado fundamental (líneas críticas, de ahora en adelante). Una línea crítica es la que divide el diagrama en

²<http://physics.nist.gov>

dos dominios, uno en donde los sistemas (de tres partículas) poseen un estado ligado con energía por debajo del umbral y otro en el que no.

Aquí utilizaremos un diagrama triangular, o en coordenadas Baricéntricas, para representar los sistemas de tres partículas. En varios trabajos previos a esta Tesis [52, 53] (para interacciones Coulombianas), se han utilizado los diagramas en coordenadas baricéntricas en la inversa de las masas para representar los posibles sistemas de tres partículas. En la opinión del autor esto ha sido tanto por razones de simplicidad en la comprensión gráfica, como por la estética tríplica, en muchos casos mística y ancestral, con la que el hombre siempre a tratado de representar los conjuntos de tres cuerpos o *entes* cualesquiera fueran ellos. La definición de las coordenadas es la siguiente,

$$\alpha_i = \frac{1/m_i}{1/m_1 + 1/m_2 + 1/m_3} \quad ; \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.15)$$

notar que solo dos de estos parámetros son independientes ya que

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1. \quad (3.16)$$

Las coordenadas baricéntricas son especialmente útiles para las interacciones Coulombianas, ya que el potencial Coulombiano es una función homogénea. A causa de esto el diagrama de estabilidad es invariante ante un reescalo global de las tres masas por una constante. Ciertamente esta particularidad hace del potencial Coulombiano uno bastante especial. La interacción de Yukawa, por su parte, no es invariante ante ese reescalo. Las líneas críticas son, en cambio, invariantes ante la transformación simultánea

$$m_i \rightarrow \beta m_i \quad ; \quad \sigma \rightarrow \sigma/\beta \quad ; \quad r \rightarrow \beta r. \quad (3.17)$$

Tomando $\beta = 1/\mu_1$, podemos ver que los siguientes sistemas son equivalentes

$$(\mu_1, \mu_2, m_3, \sigma) \longleftrightarrow (1, \mu_2/\mu_1, m_3/\mu_1, \mu_1\sigma). \quad (3.18)$$

De modo que, sin perder la generalidad en el análisis, podemos fijar $\mu_1 = 1$ y estudiar los diagramas de estabilidad en coordenadas baricéntricas para diferentes valores de σ .

El diagrama de estabilidad para un valor fijo del apantallamiento σ esta representado por un triángulo equilátero de altura 1, como podemos ver en la Figura 3.2. Los parámetros α_i corresponden a las distancias que existe entre un punto dentro del triángulo y cada uno de los lados del mismo. Ahora es claro por que la ecuación Ec. (3.16) debe cumplirse, ya que un punto en el triángulo esta unívocamente determinado por dos distancias solamente. Cada lado del triángulo representa un sistema con una masa igual a infinito. En consecuencia, un vértice representa un sistema con 2 partículas de masa infinita. El eje de simetría (línea de trazos) en el medio del triángulo representa los sistemas en que las partículas con la misma carga son idénticas. De modo que sistemas muy conocidos como $He, H_2^+, ppp^-, tt\mu^-, e^-e^-e^+$, etc. son representados por un punto en esta línea.

Dado que tenemos dos partículas con la misma carga, el diagrama de estabilidad será simétrico con respecto a el eje de simetría mostrado en la Figura 3.2. Demostraremos

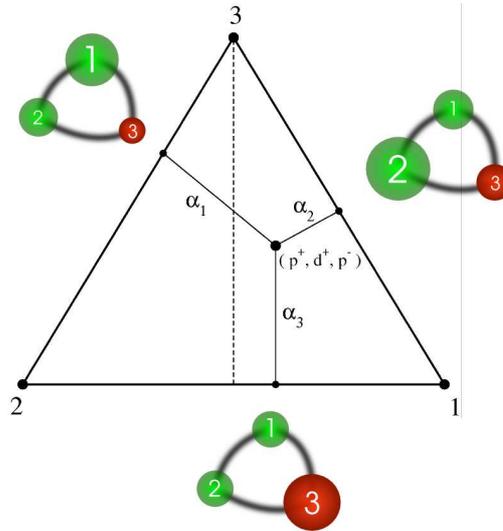


Figura 3.2: Gráfico triangular de coordenadas baricéntricas. El tamaño relativo de las esferas numeradas indica cual partícula es la de mayor masa en las cercanías de ese punto del triángulo. Indicamos las coordenadas del punto que corresponde al sistema exótico (p^+, d^+, p^-) .

dos propiedades más de las líneas críticas, válidas también para interacciones Coulombianas [52], que son útiles para tener un esquema de la forma de los diagramas.

(i) La línea crítica es cruzada solo una vez si trazamos una línea desde un vértice al eje de simetría.

La prueba para el caso Coulombiano dada en [52] solo incluye la energía cinética, de modo que es válida para interacciones de cualquier tipo.

(ii) El dominio de inestabilidad es convexo.

Para este segundo punto incluimos la prueba en el recuadro titulado **Prueba de convexidad**. Si bien la prueba sigue los pasos del caso Coulombiano, la interacción apantallada no es homogénea y debemos chequear que todos los pasos sean válidos.

La información sobre las líneas críticas mostrada hasta aquí solo hace referencia a la existencia de estados ligados. No hemos establecido aún ninguna información sobre la existencia de estados ligados Borromeanos. La primera y más básica información es una condición necesaria para la existencia de estos estados. La condición se obtiene directamente del Hamiltoniano. Aplicando el principio variacional al Hamiltoniano de la Ec. (3.7)

con $\mu_1 = 1$ obtenemos

$$E_0 = \langle \mathcal{H} \rangle_{\Psi_0} \geq \mathcal{E}_0(\sigma) + \mathcal{E}_0(\mu_2, \sigma) + \left\langle \frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}} \right\rangle_{\Psi_0} - \frac{1}{m_3} \langle \nabla_1 \cdot \nabla_2 \rangle_{\Psi_0}, \quad (3.19)$$

$$E_0 - \mathcal{E}_0(\sigma) \geq \mathcal{E}_0(\mu_2, \sigma) + \left\langle \frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}} \right\rangle_{\Psi_0} - \frac{1}{m_3} \langle \nabla_1 \cdot \nabla_2 \rangle_{\Psi_0}. \quad (3.20)$$

en donde Ψ_0 es la autofunción del estado fundamental del sistema de tres partículas. También utilizamos que $\langle h^{(i)} \rangle_{\psi_0} \geq \mathcal{E}_0$. Para que un sistema pueda tener estados Borromeos, todos sus posibles subsistemas deben ser inestables. Esto nos dice que debemos considerar valores del apantallamiento mayores a $\tilde{\sigma}_c$, en donde los dos posibles subsistemas no tienen estados ligados. Con la elección $\mu_1 = 1$ basta con elegir $\sigma > \tilde{\sigma}_c$ ya que las energías de los dos subsistemas se anulan $\mathcal{E}_0(\mu_2, \sigma) \geq \mathcal{E}_0(1, \sigma) = 0$. Entonces para un estado fundamental Borromeo

$$E_0 < 0 \text{ y } E_0 \geq \left\langle \frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}} \right\rangle_{\Psi_0} - \frac{1}{m_3} \langle \nabla_1 \cdot \nabla_2 \rangle_{\Psi_0}. \quad (3.21)$$

Claramente

$$\langle \nabla_1 \cdot \nabla_2 \rangle_{\Psi_0} > 0, \quad (3.22)$$

es una condición necesaria para la existencia de un estado Borromeo. La condición (3.22) muestra la importancia de los términos de correlación en funciones de prueba para describir el enlace Borromeo. Basta notar que si utilizamos funciones de prueba descorrelacionadas de la forma $\phi_{12} = \phi(r_1)\phi(r_2)$, obtenemos $\langle \nabla_1 \cdot \nabla_2 \rangle_{\phi_{12}} = 0$.

El paso que sigue es conseguir información de los resultados numéricos obtenidos con el método variacional. Una vez calculada la energía variacional del sistema, la línea crítica esta implícitamente definida por

$$E_0(1, \mu_2, m_3, \sigma) = E_{th} \text{ ; donde } E_{th} = \begin{cases} \mathcal{E}_0(\sigma) & \text{si } \sigma < \tilde{\sigma}_c \\ 0 & \text{si } \sigma \geq \tilde{\sigma}_c. \end{cases} \quad (3.23)$$

Podemos ver en las Figuras 3.4 y 3.6 las líneas críticas para dos valores de apantallamiento.

A partir de los cálculos variacionales podemos derivar una cota analítica, a costa de perder algo de precisión. Si recorremos el lado 2–3 ($m_1 = \infty$) desde el vértice 2 al 3, existe un valor crítico $\left(\frac{m_3}{m_2}\right)^*$ (σ) para el cual el sistema se vuelve inestable. A este valor crítico le corresponde un valor $\alpha_3^*(\sigma)$. En la figura 3.4 para $\sigma = 1.1$, se muestra el punto $\alpha_3^*(1.1)$ en azul sobre el eje de simetría. Como la línea crítica variacional es una cota estrictamente inferior a la exacta, de acuerdo con la figura 3.4 todos los sistemas con $\alpha_3 > \alpha_3^*(\sigma)$ son estables si mantenemos el valor de apantallamiento σ fijo.

Prueba de convexidad

Denominemos momentáneamente x_i a las inversas de las masas $x_i = \frac{1}{m_i}$. La transformación de escalas $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$ y $x_1 + x_3 = \mu_1^{-1} = 1$ en el espacio de las x , se puede pensar como una proyección de un plano sobre otro y por lo tanto conserva las líneas rectas (ver Figura 3.3). De este modo una prueba de convexidad para las x'_i s es válida como prueba de convexidad para los α'_i s. Supongamos que dos puntos $\{x'_i\}$ y $\{x_i\}$ pertenecen a la línea crítica. El umbral para el sistema es $\mathcal{E}_0(\sigma)$, entonces $E_0(x_i) = E_0(x'_i) = \mathcal{E}_0(\sigma)$ por definición de línea crítica. De acuerdo con las elecciones que hemos realizado, para todos los puntos en la línea $x(\eta) = \{(1 - \eta)x_i + \eta x'_i\}; \eta \in [0, 1]$ el umbral es el mismo. Es más,

$$\mathcal{H}(\eta) = \mathcal{H}((1 - \eta)x_i + \eta x'_i) \quad (3.24)$$

$$= (1 - \eta)\mathcal{H}(x_i) + \eta\mathcal{H}(x'_i). \quad (3.25)$$

y del principio variacional, utilizando la función de prueba $\Psi_0(\eta)$, tenemos que

$$E_0(\eta) \geq (1 - \eta)E_0(x_i) + \eta E_0(x'_i) = \mathcal{E}_0(\sigma). \quad (3.26)$$

Entonces el dominio de inestabilidad es convexo en los diagramas de estabilidad para el estado fundamental de tres partículas con interacción de Yukawa. En pocas palabras, al trazar una línea recta entre dos puntos de la línea crítica solo pasamos por sistemas con energías mas grandes que el umbral, y por lo tanto pertenecen al dominio de inestabilidad. ♣

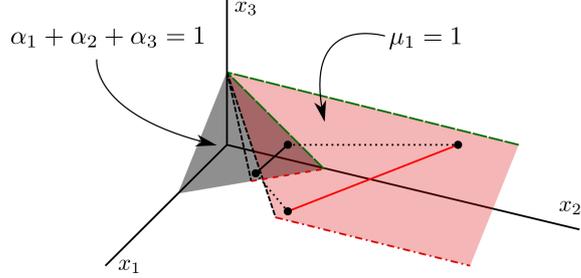


Figura 3.3: Representación de una línea en las dos normalizaciones $\mu_1 = 1$ y $\sum_i \alpha_i = 1$.

Entonces de la Ec. (3.15) puede verse que todos los sistemas que cumplen con

$$\frac{m_3}{m_1} \left(\frac{m_1}{m_2} + 1 \right) < \left(\frac{1}{\alpha_3^*(\sigma)} - 1 \right), \quad (3.27)$$

son estables. Desde luego este resultado es aplicable a cualquier valor de σ , hasta para $\sigma = 0$, aunque es más preciso para $\sigma \gtrsim \tilde{\sigma}_c$. La región de estabilidad representada por la Ec. (3.27) es el triángulo formado con el vértice 3 y base igual a la línea de trazos con el punto azul en la Figura 3.4.

En la Figura 3.5 mostramos la función $\sigma(\alpha_3^*)$ que se obtiene de invertir la relación $\alpha_3^*(\sigma)$. Si aplicamos la cota con el apantallamiento crítico, resulta en que todos los sistemas que

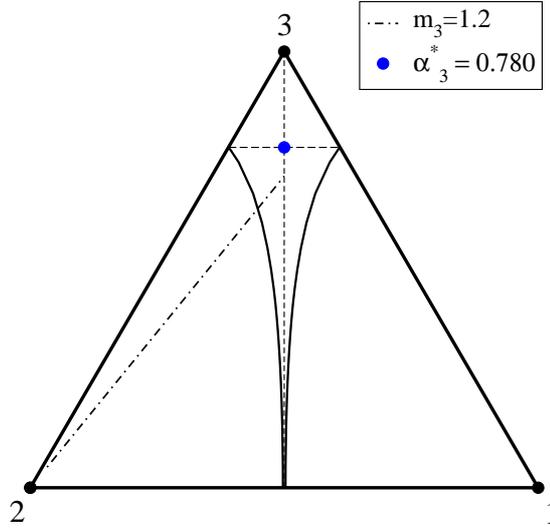


Figura 3.4: Diagrama de estabilidad para $\sigma = 1.1$ calculado con una base de tamaño $N = 14$. La línea de trazos y puntos es una recta que corresponde a $m_3 = 1.2$ y μ_2 cambiando de 0 a 1. El punto azul corresponde a $(\alpha_1 = \frac{1-\alpha_3}{2}, \alpha_2 = \alpha_1, \alpha_3 = \alpha_3^*(1.1) = 0.780)$.

cumplan con (3.27) poseen estados Borromeos. En ese caso obtenemos $\alpha_3^*(\tilde{\sigma}_c) = 0.880$, de modo que aquellos sistemas que cumplan

$$\frac{m_3}{m_1} \left(\frac{m_1}{m_2} + 1 \right) < 0.136 \quad (3.28)$$

tienen un estado fundamental Borromeo cuando el valor del apantallamiento es el crítico. Claramente, si aumentamos el valor de σ la cota cambia pudiendo dejar fuera algunos sistemas. De todas formas, la continuidad de los valores de $\alpha_3^*(\sigma)$ con σ nos asegura que un sistema que cumple con (3.28) es también Borromeo en un entorno de $\sigma > \sigma_c$, siendo la única excepción un sistema que cumpla la igualdad exacta en la cota.

En la Figura 3.4 puede verse que el eje de simetría es estable para $\sigma = 1.1$. Si la interacción se apantalla aún más, el dominio de estabilidad se reduce hasta que la única región estable es el vértice superior (una molécula simétrica con dos núcleos infinitamente pesados y una partícula liviana). La Figura 3.6 muestra la reducción del dominio de estabilidad cuando el valor de apantallamiento es el crítico. De esta forma construimos un gráfico (Figura 3.7) que muestra la línea crítica $\sigma(\alpha_3)$ que define los apantallamientos críticos para todos los sistemas simétricos. En la Figura 3.7 puede verse que existe un valor de apantallamiento por arriba del cual todos los sistemas simétricos son inestables, $\sigma > \sigma_c^{(3)} = 1.369$. Sobre este valor existen resultados previos optimizados para sistemas simétricos. En [23] obtuvieron el valor $\sigma_c^{(H_2^+)} = 1.373(4)$, para la molécula ionizada de hidrógeno H_2^+ , utilizando un método de Montecarlo Cuántico No Adiabático. Este resultado acuerda con el nuestro dentro del error estadístico reportado. En realidad este valor

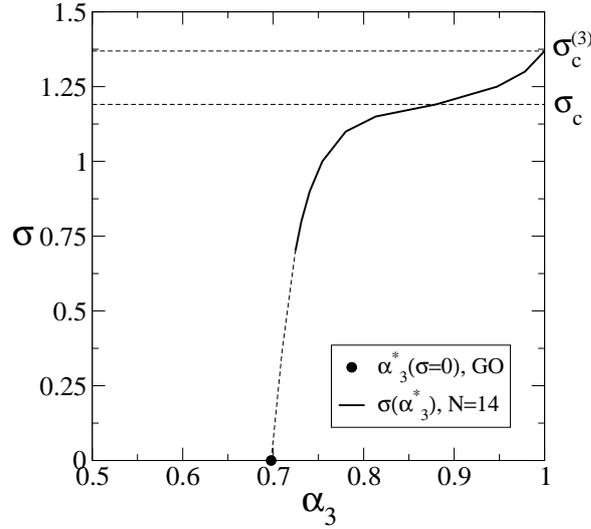


Figura 3.5: La función $\sigma(\alpha_3)$ para la cual los sistemas ($m_1 = \infty, m_2, m_3 = 1$) se vuelven inestables, obtenida de cálculos variacionales. También se muestra el punto $\alpha_3^*(\sigma = 0)$, obtenido para el límite Coulombiano con Optimización Global, y el punto $\sigma_c^{(3)}$ para el cual todos los sistemas de tres partículas son inestables.

crítico es válido para los sistemas simétricos y también para los asimétricos. Esto se debe a que el valor de $\sigma_c^{(3)}$ corresponde al apantallamiento tal que la línea crítica llega al vértice 3 en el gráfico triangular. La condición de convexidad nos asegura entonces que $\sigma_c^{(3)}$ es igual o menor para los sistemas simétricos.

En la sección 3.6 veremos como calcular el comportamiento crítico de estos sistemas utilizando Escaleo de Tamaño Finito (FSS, de sus siglas en inglés *Finite Size Scaling*). Con este método podemos obtener un valor más preciso de la línea crítica, haciendo uso de las propiedades de escaleo de la base truncada. La línea crítica obtenida con FSS también se muestra en la Figura 3.7. Esta línea indica que todos los sistemas simétricos con tres masas iguales, como el Ps^- , son Borromeanos para $\sigma = \tilde{\sigma}_c$. De este modo FSS nos da una fuerte evidencia numérica de la existencia de sistemas Borromeanos, que extiende los resultados del método variacional.

Es sabido que para las interacciones Coulombianas ($\sigma = 0$) todos los sistemas que yacen sobre el eje de simetría, son estables [54, 55]. En las Figuras 3.6 y 3.7 se observa que si el valor de apantallamiento es el crítico existen sistemas inestables sobre el eje de simetría. Queda claro entonces que existe un valor de apantallamiento $0 < \sigma^* < \tilde{\sigma}_c$ por debajo del cual el eje de simetría se vuelve estable. Una estimación variacional para ese valor es $\sigma^* \simeq 1.1661$. Si aumentamos infinitesimalmente el apantallamiento, aparece una brecha en la estabilidad del eje de simetría. Esto significa que la inestabilidad no aparece en $\alpha_3 = 0$, sino que lo hace para un valor finito. Con valores alrededor de $\alpha_3 = 0.02$ los sistemas son inestables, pero para $\alpha_3 \gtrsim 0$ son estables. Los sistemas desde el vértice

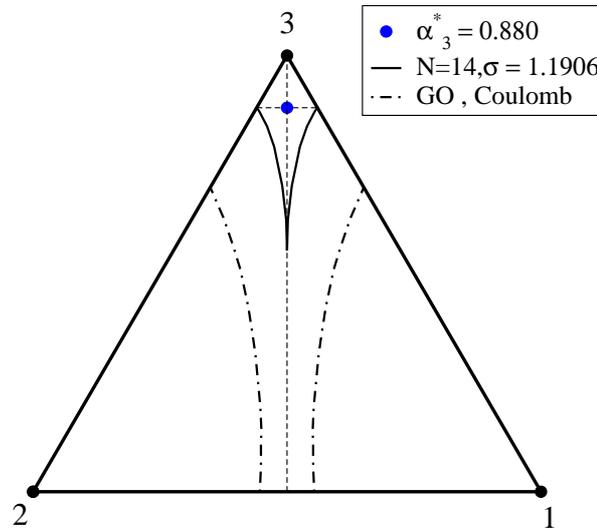


Figura 3.6: Diagrama de estabilidad para $\sigma = 1.1906 \approx \tilde{\sigma}_c$ calculado con una base de tamaño $N = 14$ (para los sistemas simétricos los resultados son hasta orden $N = 17$). El punto azul corresponde a la coordenadas $(\alpha_1 = \frac{1-\alpha_3}{2}, \alpha_2 = \alpha_1, \alpha_3 \equiv \alpha_3^*(1.1906) = 0.880)$. También mostramos la línea crítica para el límite Coulombiano $\sigma = 0$, calculada con un algoritmo de Optimización Global [49].

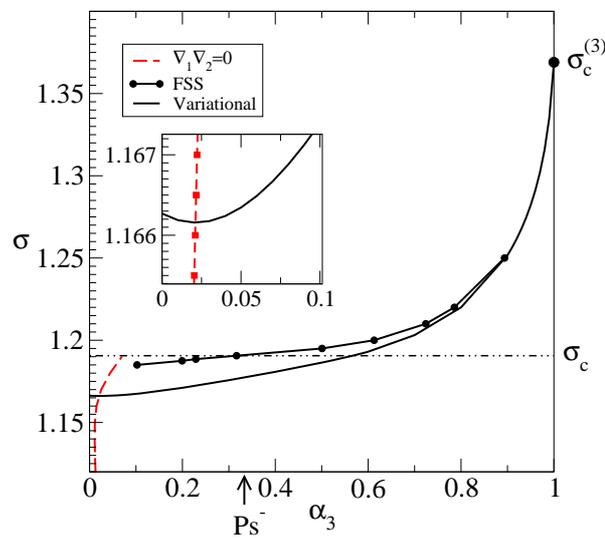


Figura 3.7: La línea crítica $\sigma(\alpha_3)$ para sistemas simétricos. En el detalle se muestra un dominio muy pequeño alrededor de $\alpha_3 = 0$, en el cual puede verse una brecha de inestabilidad en el eje de simetría (ver el texto para más detalles).

superior hasta $\alpha_3 \gtrsim 0.02$ también son estables³.

En las investigaciones realizadas con interacción Coulombiana se sugirió [54] que al variar la carga de las partículas la región de estabilidad se separa en dos islas, una cerca de $\alpha_3 = 0$ y la otra en el vértice superior. En el modelo apantallado un incremento muy pequeño del apantallamiento hace que la isla cercana a $\alpha_3 = 0$ desaparezca. Esta *sensibilidad* al parámetro de apantallamiento puede estudiarse mediante la *fracción de ligadura*, $g = \frac{E - E_{th}}{E_{th}}$. La Figura 3.8 muestra la fracción de ligadura para un apantallamiento $\sigma = 1.1$. Vemos que cerca de $\alpha_3 \approx 0.02$ se observa un mínimo que esta ampliado en el detalle. Si se aumenta ligeramente el valor de σ por arriba del valor crítico σ^* , la primera región que se hace inestable es la que corresponde a $\alpha_3 \approx 0.02$.

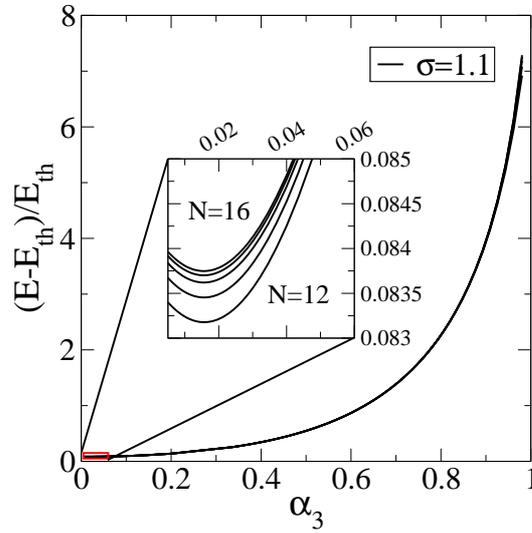


Figura 3.8: Fracción de ligadura obtenida para una longitud de apantallamiento de Debye $\sigma = 1.1$. Las curvas corresponden a diferentes tamaños de la base $N = 12, \dots, 16$. El detalle muestra que el sistema esta más cerca de la inestabilidad para $\alpha_3 \approx 0.02$

La línea crítica obtenida aquí es una cota inferior numérica a la exacta, la brecha podría no existir realmente. La existencia o no de esta isla de estabilidad es un punto que merece un estudio detallado desde un punto de vista más analítico que el realizado en esta tesis. Como punto de partida puede acotarse que, como se ve en la Figura 3.7, el término de polarización de masas se anula en el punto en que aparece la brecha. Esto también fue observado con interacciones Coulombianas [56], pero la variable utilizada en ese caso fue la carga relativa de las partículas.

³Por ejemplo, el ión exótico μ^-, μ^-, t^+ que se obtiene de reemplazar los electrones por muones posee un valor $\alpha_3 \approx 0.0185$, con lo cual es inestable (según la aproximación variacional). Por otro lado el ión H^- con masas relativas mas pequeñas ($\alpha_3 \approx 0$) es estable, al igual que el ión Ps^- con las tres masas iguales ($\alpha_3 = 0.33$).

3.5. Efecto Efimov

El efecto Efimov está presente en muchos sistemas de tres cuerpos, aunque el más conocido de todos es el compuesto por tres bosones idénticos [31, 57, 58, 59, 60, 61]. Muy recientemente se midió experimentalmente el primer estado de Efimov en átomos de Cesio ultrafríos [33]. Evidentemente, a partir de este resultado ha habido un impulso considerable en las investigaciones sobre el tema e inclusive algunas controversias. Por nombrar un ejemplo, en [62] Lee *et al* sostienen que el estado observado no es de Efimov, sino que es un estado ligado molecular Borromeano. Hoy en día es aceptado por toda la comunidad que los estados observados en la resonancias de Feshbach de los átomos ultrafríos, son de Efimov.

El efecto, como explicamos en la introducción, consiste en la aparición de un conjunto universal de estados ligados de tres partículas, cuando la longitud de dispersión a de dos cuerpos diverge. La longitud de dispersión diverge cuando la energía de un estado ligado de dos cuerpos se hace igual al umbral del continuo. Esto puede ocurrir cuando sintonizamos algún parámetro del Hamiltoniano para que las interacciones sean resonantes. Entonces, la divergencia de la longitud de dispersión es un fenómeno natural en las cercanías del umbral que, en nuestro caso, corresponde a llevar el apantallamiento a su valor crítico $\tilde{\sigma}_c$. El conjunto de estados de Efimov de tres partículas satisface las conocidas relaciones geométricas [31, 57],

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = e^{-2\pi/s_0}, \quad (3.29)$$

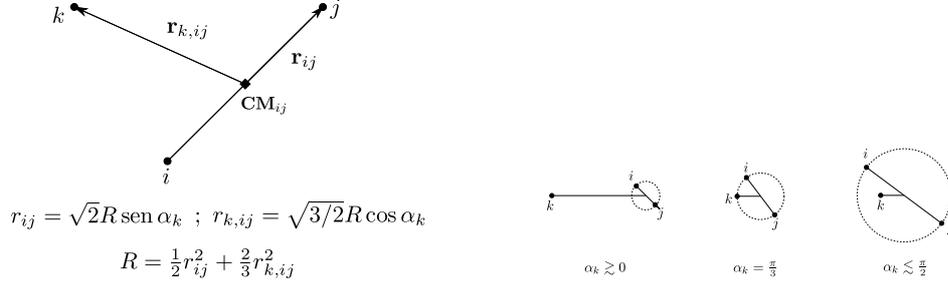
con $s_0 = 1,00624$. Mediante el formalismo de las ecuaciones de Fadeev utilizado para sistemas de tres partículas uno puede obtener una descripción universal del efecto. La idea básica es que la divergencia de la longitud de dispersión lleva a una interacción atractiva y efectiva que decae como $\frac{1}{R^2}$, en donde $R^2 = r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2$. En el recuadro mostramos rápidamente como se llega a la interacción efectiva y el desarrollo completo se encuentra en el apéndice B.

La energía de un estado de Efimov se hace igual al umbral del continuo en un entorno de la divergencia de a . El umbral del continuo es la energía del estado ligado de dos cuerpos para $a > 0$ y es igual a cero para $a < 0$, que corresponde a tres partículas libres. El número de estados ligados tiene un comportamiento universal en un entorno de la divergencia que fue obtenido por Efimov [31]

$$N \rightarrow \frac{s_0}{\pi} \ln \frac{|a|}{l}, \quad (3.30)$$

en donde l es la escala natural de longitud, relacionada con el rango de las interacciones. En nuestro caso la escala de longitud es de orden $\frac{1}{\sigma}$. La Ec. 3.30 muestra otra posibilidad para obtener infinitos estados ligados, en lo que se llama el límite de escala $l \rightarrow 0$, pero aquí nos concentraremos en la divergencia de a solamente.

De la ecuación de Fadeev de baja energía^a a la interacción efectiva $\frac{1}{R^2}$



Las ecuaciones de Fadeev son una forma de resolver la ecuación de Schrödinger utilizando coordenadas hipersféricas (definidas en las Figuras). La mismas se utilizan para encontrar soluciones de la forma $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$, en donde los subíndices de ψ indican la elección de coordenadas hipersféricas. Las tres ecuaciones se pueden reducir a una utilizando un operador integral (\mathcal{R}), que proviene de transformar las funciones con las coordenadas α_2 y α_3 a las coordenadas con α_1 . En el caso de tres partículas idénticas con momento angular total nulo y tomando en cuenta solo subsistemas con ondas S , la ecuación tiene la forma

$$(T_R + T_{\alpha_1} - E)\psi(R, \alpha_1) = -V(\sqrt{2}\operatorname{sen} \alpha_1)\mathcal{R}[\psi(R, \alpha_1)] \quad (3.31)$$

en donde

$$\mathcal{R}[\psi(R, \alpha)] = \psi(R, \alpha) + \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{\pi/3-\alpha}^{\pi/2-|\pi/6-\alpha|} \frac{\operatorname{sen} 2\alpha'}{\operatorname{sen} 2\alpha} \psi(R, \alpha') d\alpha' \quad (3.32)$$

El subíndice 1 indica que elegimos las coordenadas con la partícula 1 diferenciada.

Una forma de resolver esta ecuación es la de utilizar una *expansión hipersférica*. Para cada valor de R la función $\psi(R, \alpha)$ se expande en una base completa de funciones $\phi_n(R, \alpha)$ del hiperángulo α ,

$$\psi(R, \alpha) = \frac{1}{R^{5/2} \operatorname{sen} 2\alpha} \sum_n f_n(R) \phi_n(R, \alpha) \quad (3.33)$$

La divergencia que se observa en el prefactor de la suma para $\alpha = 0$ y $\alpha = \pi/2$ impone que $\phi_n(R, \alpha)$ debe anularse en los puntos extremos. Las $\phi_n(R, \alpha)$ son soluciones de la ecuación integro-diferencial en una sola variable α ,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \lambda_n(R) \right] \phi_n(R, \alpha) = -\frac{2m R^2}{\hbar^2} V(\sqrt{2}R \operatorname{sen} \alpha) \mathcal{R}[\phi_n(R, \alpha)] \quad (3.34)$$

En esta ecuación la variable R es un parámetro y los autovalores $\lambda_n(R)$ son funciones de dicho parámetro. Los autovalores $\lambda_n(R)$ definen los potenciales para cada canal de la variable hiperradial $V_n(R) = [\lambda_n(R) - 4] \frac{\hbar^2}{2m R^2}$, en donde el término -4 proviene del operador T_α . Este procedimiento es completamente análogo al que se realiza en la aproximación de Born-Oppenheimer de una molécula diatómica. Allí se resuelve el Hamiltoniano electrónico y se obtienen las energías $\mathcal{E}_n(R)$ como función de la distancia entre los núcleos atómicos R . Las energías obtenidas luego representan los potenciales de interacción entre los núcleos, definiendo diferentes *canales* de interacción $V_n(R)$.

El último paso que nos resta para llegar a una interacción efectiva que va como $\frac{1}{R^2}$ es suponer que los autovalores $\lambda_n(R)$ varían muy lentamente con R . Si estos no dependieran en absoluto de R , entonces las autofunciones hipersféricas son independientes de R , $\phi_n(R, \alpha) \equiv \phi_n(\alpha)$ y las ecuaciones para las $f_n(R)$ quedan desacopladas. Podemos entonces suponer que para regiones de R en que los autovalores $\lambda_n(R)$ varían lentamente los diferentes canales n se desacoplan y las soluciones pueden ser bien aproximadas por la ecuación

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{15}{4R^2} \right) + V_n(R) \right] f_n(R) \approx E f_n(R). \quad (3.35)$$

En el apéndice B.3 puede verse que las soluciones para los potenciales $\frac{1}{R^2}$ atractivos presentan el espectro típico del Efecto Efimov. La forma particular de las constantes de acople y potenciales de cada canal será dependiente de las masas y cargas relativas.

^aTodo lo desarrollado aquí está explícitamente resuelto en el apéndice B.

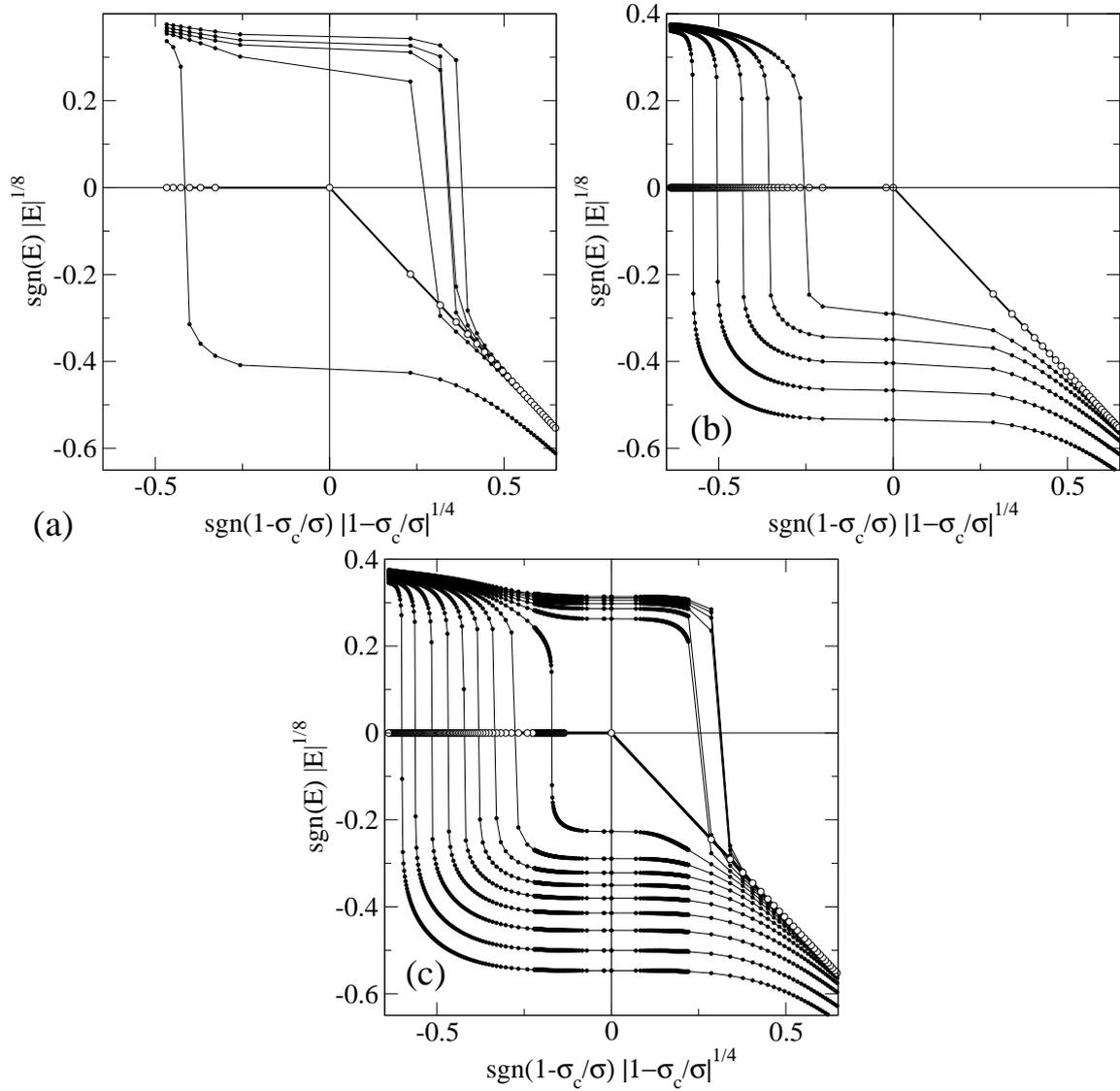


Figura 3.9: Los autovalores de menor energía obtenidos del método variacional de Rayleigh-Ritz con $N = 17$ para sistemas simétricos con (a) $m_1/m_3 = 10$, (b) $m_1/m_3 = 198$, and (c) $m_1/m_3 = m_p/m_e = 1836.15$, como función del apantallamiento escalado σ . Claramente no hay trímeros de Efimov para $m_1/m_3 = 10$ [58].

Para sistemas de dos fermiones idénticos interactuando con una partícula diferente, hay algunos resultados previos [57, 58]. Una de las diferencias entre este tipo de sistemas y el compuesto por bosones, es que la constante universal $e^{-\pi/s_0}$ es ahora una función de $\frac{m_1}{m_3}$. Más aún, el efecto desaparece para $\frac{m_1}{m_3} < 13.6$ cuando la constante de escala e^{π/s_0} diverge. En el otro extremo, cuando $\frac{m_1}{m_3} \rightarrow \infty$, la constante de escala tiende a 1. En todos los trabajos previos nunca se ha tenido en cuenta las interacciones repulsivas entre las

partículas, como hemos hecho aquí, sin embargo el comportamiento universal no debiera verse afectado por los términos repulsivos.

Lo que nosotros obtuvimos es una evidencia numérica de la existencia del efecto, como se ve en la Figura 3.9. La misma muestra las curvas de energía, reescaladas, para los cocientes de masas $m_1/m_3 = 10, 198$ y $m_p/m_e = 1836.15$. Las constantes de escala que se obtuvieron para estos estados son $e^{\pi/s_0} \approx \infty, 1.76, 1.45$ y para $m_1/m_3 = 100$ se obtuvo $e^{\pi/s_0} \approx 2.0$. El valor infinito de la constante de escala indica que existe solamente un estado ligado por debajo de cero, por lo tanto $\frac{E_0}{E_1} \rightarrow \infty$. Más aún, el efecto solo aparece si las partículas 1 y 2 son *idénticas*. Si las tres partículas son *distinguibiles* hay tres longitudes de dispersión (a_{ij} $i, j = 1, 2, 3$), que corresponden a los tres subsistemas posibles de dos partículas. Está claramente expresado en [57], que el efecto no aparece si solo una longitud de dispersión diverge. En general, más de una longitud de dispersión debe diverger para observar el efecto.

La longitud de dispersión a_{12} corresponde al subsistema de partículas repulsivas y es por ello irrelevante en nuestro análisis, ya que nunca tendrá un estado ligado. Esto nos deja con dos longitudes relevantes a_{13} y a_{23} , que divergen cuando los correspondientes apantallamientos $\tilde{\sigma}_i = \sigma/\mu_i$; $i = 1, 2$ son ambos iguales a su valor crítico $\tilde{\sigma}_c$. La condición $\mu_1 = 1$ que utilizamos hasta aquí, implica que $\tilde{\sigma}_1 = \sigma$, de modo que a_{13} diverge solo para $\sigma = \tilde{\sigma}_c$. Luego, para que las dos longitudes diverjan, es necesario que μ_2 también sea la unidad.

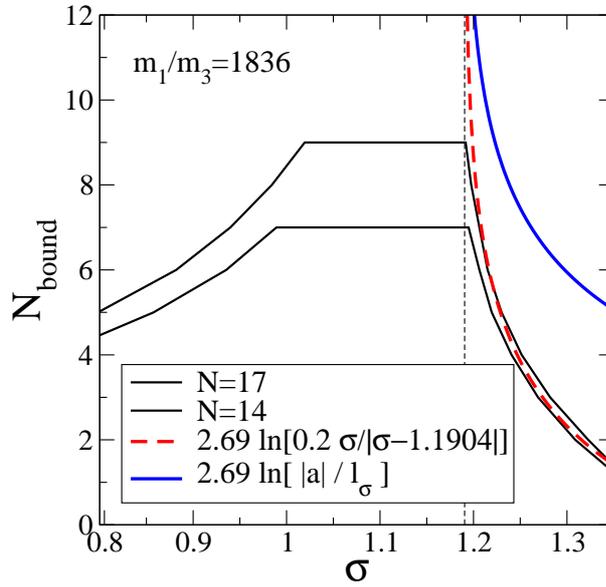


Figura 3.10: Número de estados ligados de H_2^+ , $m_1 = m_2 = m_p$, como función de σ para dos tamaños de base. El número de estados es máximo cerca de $\tilde{\sigma}_c$. También se muestra la función universal número de estados ligados, Ec. (3.30), utilizando los valores $s_0/\pi \approx 2.69$ y $\tilde{\sigma}_c = 1.1904$.

En la Figura 3.10 puede verse el número de estados ligados como función de σ para la molécula de Hidrógeno ionizada H_2^+ , $m_1 = m_2 = m_p$ y $m_3 = m_e$. El número de estados crece notablemente alrededor del valor crítico de apantallamiento, lo que da un fuerte indicio de la existencia del Efecto Efimov en este sistema. En la misma Figura hemos incluido dos curvas que corresponden a la función universal de la Ec. (3.30). En ambas curvas utilizamos el valor de $\frac{s_0}{\pi} = 2.69$ obtenido de las curvas de energía. La línea de trazos es el resultado de suponer que el alcance es $l \propto 1/\sigma$ y la longitud de dispersión como $a \propto 1/(\sigma - \tilde{\sigma}_c)$, además se ajustó a las curvas numéricas incluyendo el factor 0.2 dentro del logaritmo. La necesidad de este factor indica que la proporcionalidad se cumple, pero el valor la constante no tiene significado físico. Con el fin de no ajustar parámetros, calculamos la longitud de dispersión a para el potencial de Yukawa como una función de σ^4 (Figura 3.11). El alcance del potencial de Yukawa es usualmente tomado como $\frac{1}{\sigma}$, sin embargo aquí consideramos otro valor. El valor de r tomado como alcance⁵ es tal que la energía potencial integrada de 0 a r tiene un valor de $\frac{1-e^{-1}}{\sigma^2} \approx \frac{0.61}{\sigma^2}$, que corresponde a un 60 % del total de energía potencial $1/\sigma^2$. Elegimos el factor $1/e$ por la misma razón que se elige el alcance como $1/\sigma$, que es considerar el decaimiento a un tercio del total. Integrando el potencial y resolviendo numéricamente se puede encontrar que el alcance es $l_\sigma \approx \frac{2.14619}{\sigma}$. La curva azul en la Figura 3.10 corresponde a tomar este valor para el alcance. Esta curva no tiene parámetros ajustados y esta en acuerdo con los resultados numéricos, considerando que la aproximación variacional es una cota inferior para el número de estados.

3.6. Comportamiento crítico cerca del umbral

En esta sección analizaremos el comportamiento de la energía del estado fundamental en las cercanías de la línea crítica. Podemos definir un exponente crítico α para la energía [6] de la siguiente forma

$$E_0(\lambda) - E_{th} \sim -e (|\lambda_c - \lambda|)^\alpha, \quad \lambda \rightarrow \lambda_c^- \quad (3.36)$$

en donde λ representa uno de los parámetros del Hamiltoniano (μ_2 , m_3 or σ), E_{th} es la energía del umbral, y $\lambda \rightarrow \lambda_c^-$ significa que el límite se toma desde adentro del dominio estable.

La existencia de un estado ligado en el punto crítico esta directamente relacionado con el exponente de la energía α . Simon [41] mostró que para una clase bastante grande de Hamiltonianos de N partículas el exponente crítico α es igual a uno si y solo si el Hamiltoniano tiene una autofunción normalizable en el umbral. Si el Hamiltoniano no soporta

⁴Para calcular la longitud de dispersión resolvimos la ecuación de Schrödinger a energía cero. Luego, puede probarse que $a = \psi(r)/\psi'(r) - 1$, para $r \rightarrow \infty$.

⁵Si bien este método puede parecer rebuscado, funciona mejor que determinar el alcance como la distancia en que el potencial decae a e^{-1} . De hecho, para un potencial Coulombiano podemos determinar un *alcance* $r = e$, aún cuando el potencial es de largo alcance. Utilizando el método descrito aquí, la integral de energía total diverge para el potencial Coulombiano, dejando en claro que es un potencial de largo alcance.

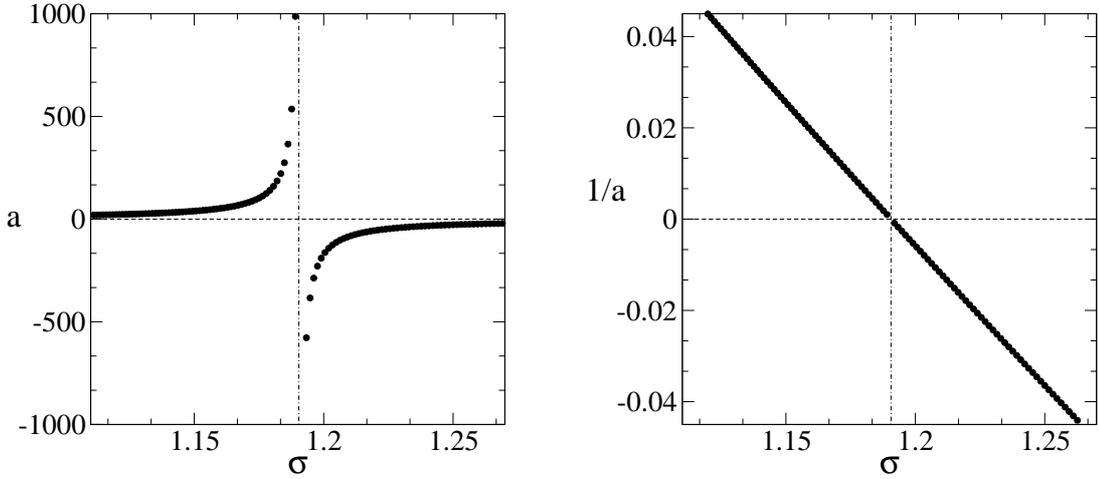


Figura 3.11: Longitud de dispersión de dos partículas para el potencial de Yukawa y su inversa. En un entorno de $\sigma_c \approx 1.1904$ la inversa de longitud de dispersión es lineal con σ .

un estado ligado en el umbral, entonces $\alpha > 1$. La existencia de un estado normalizable (localizado) en el punto crítico caracteriza las propiedades de dispersión con energías cerca del umbral. En este capítulo nos limitaremos a obtener el valor de los exponentes y dejaremos el análisis para el siguiente capítulo, en donde estos resultados sumados a otros nos permitirán formar una visión más completa.

Para calcular el exponente crítico α y el apantallamiento crítico σ_c utilizamos FSS [6]. Este método a sido utilizado con éxito para obtener el exponente de la energía en sistemas de una, dos y tres partículas (ver [6] y referencias); en el cálculo de exponentes críticos para el entrelazamiento cercano al umbral en sistemas de dos electrones [39, 63] y para el estudio de la estabilidad de cuasi moléculas tipo Hidrógeno-AntiHidrógeno [64].

La base de FSS es el ansatz que asume la existencia de una función de escala tal que

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\lambda^{(N)} \approx \langle \mathcal{O} \rangle_\lambda F_{\mathcal{O}}(N|\lambda - \lambda_c|^\nu), \quad (3.37)$$

donde $\langle \mathcal{O} \rangle_\lambda^{(N)}$ es el valor medio de orden N del operador \mathcal{O} evaluado en la base truncada. Se asume además que el exponente de escaleo ν es único para todos los operadores y que existe una función de escala $F_{\mathcal{O}}$ distinta para cada operador. Como aquí queremos estudiar el exponente de la energía, \mathcal{O} será el Hamiltoniano. La metodología para calcular los exponentes está explicada en detalle en [6]. Aquí daremos solamente una breve explicación operacional. Primero calculamos la energía y el valor medio $\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} \rangle$ utilizando dos tamaños de base diferentes N y N' . Luego, definimos la función

$$\Gamma_\alpha(\lambda; N, N') = \frac{\ln(E_\lambda^{(N)}/E_\lambda^{(N')})}{\ln(E_\lambda^{(N)}/E_\lambda^{(N')}) - \ln(\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} \rangle^{(N)} / \langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} \rangle^{(N')})} \quad (3.38)$$

que es independiente de N y N' en $\lambda = \lambda_c$ y su valor es el exponente crítico α ,

$$\Gamma_\alpha(\lambda_c; N, N') = \alpha. \quad (3.39)$$

En el caso de dos partículas idénticas $\mu_2 = 1$ y el parámetro λ se eligió igual a $\frac{1}{m_3}$. En la Ec. (3.7) puede verse que esta es la constante de acople del término de polarización de masas o de Hughes-Eckart. El comportamiento asintótico de la energía, para σ fijo, es entonces

$$E_0(m_3^{-1}, \sigma) - \mathcal{E}_0(\sigma) \sim -e (m_3^{-1} - [m_3^{(c)}(\sigma)]^{-1})^{\alpha(\sigma)}. \quad (3.40)$$

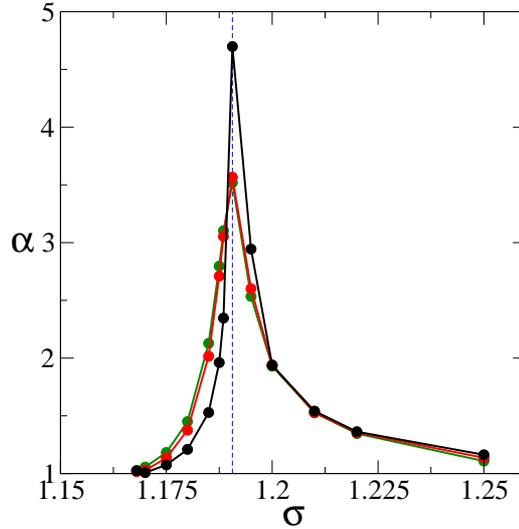


Figura 3.12: El exponente crítico de la energía, α como función del apantallamiento σ para sistemas simétricos obtenido del método de FSS con bases de tamaño $N = 14, 15, 16$. La línea azul es el valor de apantallamiento $\sigma = \tilde{\sigma}_c$ en que la energía de dos cuerpos se anula y divide los estados Borromeos de los no Borromeos.

La Ec. (3.40) muestra que α puede ser una función del apantallamiento. La dependencia con σ es esperable ya que la energía de umbral tiene un punto crítico para $\sigma = \tilde{\sigma}_c$, $\mathcal{E}_0(\sigma) \sim -e(\sigma - \tilde{\sigma}_c)^2$, lo cual modifica el comportamiento cerca del umbral. Para valores $\sigma < \tilde{\sigma}_c$ el umbral es negativo y existe una función de onda normalizable para el sistema de dos partículas. Si el apantallamiento es mayor que $\tilde{\sigma}_c$ la energía de umbral es cero, y no tenemos ningún subsistema estable. Entonces un cambio en el comportamiento crítico del sistema de tres partículas puede ser detectado en el exponente α como una función del apantallamiento σ . El cambio del exponente crítico α como función de σ se muestra en la Figura 3.12. El pico en $\sigma = \tilde{\sigma}_c$ puede ser debido al cambio del estado fundamental al pasar de Borromeo a común.

En el apéndice B.3 se realizó un análisis de los estados y exponentes críticos del potencial atractivo $1/R^2$. Allí se prueba que el exponente de la energía va a infinito $\alpha \rightarrow \infty$, si el acople es justo $-1/8$. Lamentablemente, no se pudo comprobar rigurosamente la

conexión entre esa divergencia y la presentada en la Figura 3.12, pero creemos que existe. Las sospechas están basadas en que $-1/8$ es el valor que separa la región de estados tipo Efimov de la región de estados *normales*. De hecho, para bosones idénticos el potencial efectivo que da origen al efecto Efimov es $-\frac{1/8+1-s_0}{R^2} \approx -\frac{1/8+0.006}{R^2}$, muy cercano al valor en el que $\alpha \rightarrow \infty$.

Si las partículas 1 y 2 son distinguibles $\mu_2 \neq 1$, y el parámetro utilizado en la Ec. (3.38) para este caso fue $\lambda = \mu_2^{-1}$, mientras que el apantallamiento y la masa m_3 se dejaron fijas. La Figura 3.13 muestra el exponente de la energía como función de la masa m_3 para diferentes elecciones del apantallamiento σ . En algunos puntos se muestra el valor de μ_2 sobre la línea crítica. El exponente cambia de 2 a 1 al pasar de configuraciones completamente asimétricas a las casi simétricas $\mu_2 \simeq 1$. Este comportamiento no es extraño ya que el valor $\alpha = 1$ es esperado para $\mu_2 = \mu_1$ [5], y $\alpha > 1$ para otras configuraciones. Una sugerencia sobre esto la hicimos en las conclusiones del capítulo 2. Si las partículas son distinguibles (masas diferentes) una de ellas forma el subsistema con menor energía. En las cercanías de ese umbral menos energético, el sistema de tres partículas comienza naturalmente a tener configuraciones que consisten en el subsistema y la otra partícula mucho más alejada. Justo en el umbral, la segunda partícula se va al infinito (indicando $\alpha > 1$), sin embargo en el origen la densidad de probabilidad tiende a la del subsistema estable.

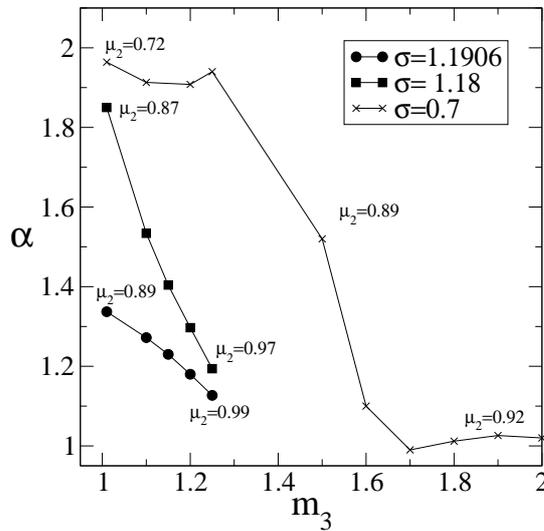


Figura 3.13: El exponente crítico de la energía α como función de la masa m_3 para sistemas asimétricos con diferentes apantallamientos. Se muestran resultados para bases de hasta $N = 14$. Los valores de μ_2 sobre las líneas críticas se muestran en algunos puntos.

3.7. Conclusiones del capítulo

La presencia de estados Borromeos en sistemas con apantallamiento de Yukawa fue comprobada en 2006 [23] para el H_2 y el H_2^+ . A lo largo del capítulo se logró extender estos resultados a una gran cantidad de sistemas de tres partículas mediante el análisis de los diagramas de estabilidad del estado fundamental. Concretamente se comprobó la existencia de estados ligados Borromeos para $pp\mu^-$, $pd\mu^-$, $pt\mu^-$, $dt\mu^-$ y también para los mismos sistemas intercambiando μ^- por un electrón e^- . Encontramos también fuertes evidencias de que el ión de Positronio Ps^- tiene al menos un estado Borromeo. Dado el carácter variacional de los métodos utilizados, la estabilidad del Ps^- implica la existencia de estados Borromeos de todos los sistemas simétricos $(\pm m_1, \pm m_2, \mp m_3)$ con $m_3/m_1 \leq 1$.

El análisis de los estados variacionales obtenidos mostró que existen sistemas simétricos capaces de ligar muchos estados en la región Borromea. Esto nos llevó a intentar analizar la existencia del Efecto Efimov en sistemas simétricos. La divergencia simultánea de las longitudes de dispersión de dos subsistemas es condición necesaria para la existencia de dicho efecto, esto impide que sistemas no simétricos lo presenten. De acuerdo a los resultados obtenidos, consideramos que el efecto está presente para sistemas con $\frac{m_1}{m_3} \geq 100$ y desaparece para $\frac{m_1}{m_3} \leq 10$. Estos resultados tienen buen acuerdo con resultados previos para fermiones idénticos [58] con interacciones resonantes, pero sin potenciales repulsivos. Esencialmente la repulsión entre las partículas idénticas se hace irrelevante si es alcance menor que $1/r^2$. Recordemos aquí la explicación utilizada para la *reentranza* en el capítulo 2. Allí vimos que la cercanía del umbral causa que el sistema sea muy extendido, con lo cual solo los potenciales atractivos de largo alcance tienen influencia en las partículas. Aquí las partículas idénticas también se encuentran extendidas, pero su extensión es regulada por el cociente de masas $\frac{m_1}{m_3}$. Como los potenciales tienen el mismo alcance, necesitamos un cociente de masas suficientemente grande para lograr que el sistema sea extendido y el efecto sea visible. El tamaño finito de la base utilizada en la aproximación variacional es un factor que también debemos tener en cuenta para la detección del fenómeno, ya que nunca observaremos infinitos estados ligados.

El comportamiento crítico de la energía para sistemas simétricos y asimétricos fue analizado a partir de los resultados numéricos. Dejaremos el final de esta discusión para el siguiente capítulo, como ya expresamos anteriormente, y solo discutiremos algunos resultados. Los sistemas simétricos mostraron que el exponente crítico es igual a uno tanto para la región Borromea como para la no Borromea. También notamos un pico en la región de transición, probablemente debido al potencial efectivo $1/r^2$ entre las partículas. Los resultados en sistemas asimétricos, lejos de la zona crítica $\sigma \approx \tilde{\sigma}_c$, mostraron que el exponente está más cerca a 2 cuanto más asimétrico es el sistema. En el caso casi simétrico $\mu_2 \approx 1$ el exponente vale 1. Estos resultados concuerdan con los argumentos esgrimidos en las conclusiones del capítulo 2.

Capítulo 4

Sistemas simétricos de tres partículas cargadas con interacciones apantalladas

En el capítulo 3 analizamos como el apantallamiento en sistemas de tres cargas unitarias causa la aparición del efecto Efimov y estados Borromeanos. En este capítulo estudiaremos como se modifican estos efectos si se consideran dos partículas idénticas con carga diferente a la restante. Haremos una revisión global del comportamiento crítico cerca del umbral relacionándolos con resultados obtenidos anteriormente. Dentro de los sistemas estudiados podemos encontrar He , Li^+ , Be^{++} , etc. y algunos más exóticos como el ión molecular He_2^{3+} . Comprobaremos que en iones moleculares tipo He_2^{3+} puede existir efecto Efimov y que el átomo de Helio muestra indicios de la existencia de un estado Borromeano.

4.1. Hamiltoniano reescalado

El Hamiltoniano de un sistema de tres partículas de carga unitaria que interactúan a través del potencial de Yukawa, escrito en la Ec. (3.7), tiene la forma

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2\mu_1}\nabla_1^2 - \frac{1}{2\mu_2}\nabla_2^2 - \frac{1}{m_3}\nabla_1\cdot\nabla_2 - \frac{e^{-\sigma r_1}}{r_1} - \frac{e^{-\sigma r_2}}{r_2} + \frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}}, \quad (4.1)$$

Las coordenadas elegidas en la Ec. (4.1) se toman relativas a la partícula 3 cuya carga es de signo opuesto a la de 1 y 2. Los sistemas simétricos que consideraremos corresponden a masas reducidas $\mu_1 = \mu_2 = 1$ y además las cargas de las partículas son (q_1, q_2, q_3) . Con estos parámetros el Hamiltoniano toma la forma,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{m_3}\nabla_1\cdot\nabla_2 + q_1q_3\frac{e^{-\sigma r_1}}{r_1} + q_2q_3\frac{e^{-\sigma r_2}}{r_2} + q_1q_2\frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}}, \quad (4.2)$$

en donde los signos de las interacciones están dados por las cargas (q_1, q_2, q_3) . Estudiamos sistemas simétricos con partículas 1 y 2 idénticas de carga $q_1 = q_2 = q$ y una partícula

3 de carga unidad $q_3 = -1$. Para realizar los cálculos se reescaleó el Hamiltoniano de la Ec. 4.2 con $r \rightarrow r\sigma$ y $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}\sigma^2$. Utilizando las cargas indicadas se obtiene

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{m_3}\nabla_1 \cdot \nabla_2 + \tilde{\sigma}^{-1} \left(-\frac{e^{-r_1}}{r_1} - \frac{e^{-r_2}}{r_2} + q\frac{e^{-r_{12}}}{r_{12}} \right). \quad (4.3)$$

en donde $\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{q}$.

Dentro de esta aproximación puede considerarse que la energía del Hamiltoniano es función de tres parámetros : $(\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{q}, q, \alpha_3)$. Utilizamos la definición de α_3 de la Ec. 3.15, que en el caso simétrico es $\alpha_3 = \frac{1}{2\frac{m_3}{m_1}+1}$. Considerados como parámetros independientes se puede estudiar el límite $q \rightarrow 0$ en el cual las partículas idénticas no interactúan. Los parámetros del átomo de Helio He y el ión de Litio Li^+ con apantallamiento σ son $(2\sigma, 1/2, 7 \times 10^{-5})$ y $(3\sigma, 1/3, 4 \times 10^{-5})$, donde se observa que α_3 es muy pequeño.

De la misma manera que en los casos simétricos del capítulo 3, el umbral de energía es la energía de ligadura del subsistema compuesto por una de las cargas idénticas y la carga unidad de signo opuesto. El Hamiltoniano de cada subsistema es

$$h^{(i)}(1, \sigma/q) = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \tilde{\sigma}^{-1}\frac{e^{-r_i}}{r_i}; \quad i = 1, 2. \quad (4.4)$$

La Ec. 4.4 muestra que el umbral no cambia su energía¹ $\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma})$ si el parámetro $\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{q}$ se mantiene constante.

El Hamiltoniano de la Ec. (4.3) depende linealmente de la carga relativa q . La carga q es el acople del término de repulsión que es definido positivo, luego la energía es monotonamente creciente con el valor de q [42]. Entonces, los sistemas con apantallamiento $\tilde{\sigma}$ y parámetro α_3 fijos cumplen

$$E_0(\tilde{\sigma}, \alpha_3, q_1) < E_0(\tilde{\sigma}, \alpha_3, q_2) \quad ; \quad \text{si } q_1 < q_2 \quad (4.5)$$

La monotonía de la energía como función de la carga q implica que si un sistema con carga Q soporta un estado ligado, entonces los sistemas con carga $q < Q$ también soportan estados ligados. En particular, si un sistema con carga Q posee estados Borromeos, los sistemas con $q < Q$ también presentarán ligadura Borromeana. Esta relación entre la estabilidad de sistemas de cargas distintas es válida para todo par de parámetros $(\tilde{\sigma}, \alpha_3)$. La región estable de un sistema con carga q esta siempre incluida en la región estable de sistemas con $Q > q$. Las regiones estables tienen entonces un área inversamente proporcional a la carga q .

4.2. Dos partículas no interactuantes ligadas a un núcleo de masa finita

En el límite $q \rightarrow 0$ la Ec. 4.3 representa el Hamiltoniano de dos partículas idénticas no interactuantes, ligadas a una tercera mediante una interacción atractiva. La atracción

¹Utilizamos la misma notación del capítulo 3 para la energía de una partícula $\mathcal{E}_0(\sigma)$.

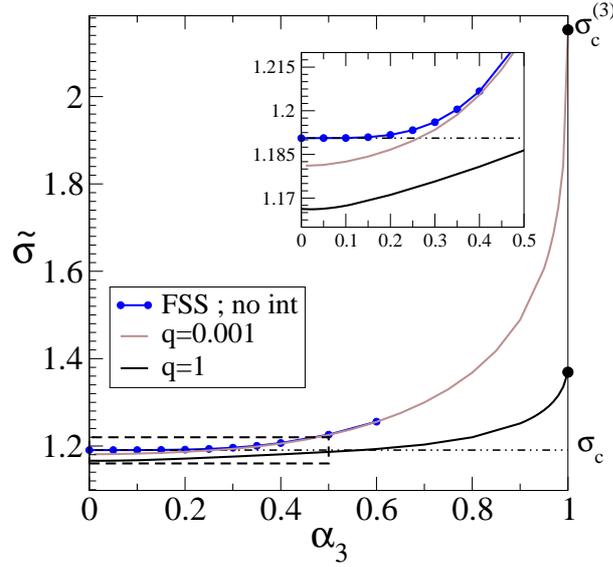


Figura 4.1: Línea crítica los valores de carga $q = 0.001$ y $q = 1$ (equivalente a Figura 3.7) de las partículas iguales (límite no interactuante y tres cargas unitarias respectivamente). La línea de trazos-punto-punto marca el valor de $\tilde{\sigma}$ en el cual el umbral se hace cero. La línea crítica obtenida utilizando FSS (línea azul con círculos) soporta que todos los sistemas tres partículas (no interactuantes) de masa finita presentan enlace Borromeano.

ejercida por la partícula de signo opuesto es responsable de mantener el sistema ligado. Si se considera que tiene masa infinita, el sistema es separable con energía igual a $2\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma})$. En este caso existe un estado ligado con energía menor que la de umbral si el apantallamiento es menor que el crítico de dos partículas $\tilde{\sigma} < \tilde{\sigma}_c \approx 1.1906$. Si la partícula 3 tiene masa finita de, el valor crítico es función del parámetro α_3 .

La Figura 4.1 muestra el diagrama de estabilidad del estado fundamental de sistemas simétricos, donde $\tilde{\sigma}^{(c)}(\alpha_3)$ es la línea crítica. Se muestra también la línea crítica con $q = 1$, tal cual fue obtenida en el capítulo 3 para sistemas de carga unitaria. Comparando las curvas se observa que la región de ligadura aumenta en el caso con $q = 0$. Esto se debe a que la energía potencial entre partículas idénticas es menos repulsiva que en el caso $q = 1$ y confirma que el área es inversamente proporcional a la carga, como se aclaró al final de la sección anterior.

La línea marrón de la Figura 4.1 es la aproximación variacional a la línea crítica. Si $\alpha_3 = 0$ el problema es completamente separable ($m_3 \rightarrow \infty$). La función de onda del estado fundamental de 3 partículas es de la forma, particularmente simple, $\Psi_0 = \psi_0(r_1)\psi_0(r_2)$, donde $\psi_0(r)$ es la función de onda del estado fundamental de dos partículas. La energía del estado es $E_0 = 2\mathcal{E}_0(\lambda)$, por lo tanto el punto ($\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_c, \alpha_3 = 0$) pertenece a la línea crítica $\tilde{\sigma}^{(c)}$ y el exponente crítico de la energía en ese punto es igual al de dos partículas $\alpha = 2$.

Si $\alpha_3 \neq 0$ las partículas idénticas se acoplan a través del término de polarización de masas. La Figura 4.1 muestra que la región de estabilidad aumenta con α_3 . En otras palabras, la masa finita de m_3 hace más estable el sistema. La estabilidad del estado ligado en algunos sistemas se extiende a valores $\tilde{\sigma} > \tilde{\sigma}_c$ por lo tanto poseen estados Borromeos. La aproximación variacional a la línea crítica en $\alpha_3 = 0$, $\tilde{\sigma}_v(\alpha_3 = 0)$, es cota inferior del valor exacto $\tilde{\sigma}^{(c)}(0) = \tilde{\sigma}_c$ denotado con la línea de trazos. La aproximación variacional $\tilde{\sigma}_v(\alpha_3)$ indica que existe un valor $\alpha_3 \approx 0.25$ por arriba del cual los sistemas atómicos presentan estados Borromeos. Las cotas variacionales para la energía son cotas superiores y por lo tanto las regiones de estabilidad variacionales son más pequeñas que la región de estabilidad exacta. Luego, $\tilde{\sigma}_v(\alpha_3)$ siempre encierra una menor área de estabilidad que la exacta. Utilizando el método de FSS los resultados mejoraron considerablemente, como puede verse en la Figura 4.1. La región de estabilidad Borromeana se extiende hasta $\alpha_3 = 0$ e incluye a todos los sistemas ($\alpha_3 \in (0, 1]$) y se aproxima mucho más al valor exacto en $\alpha_3 = 0$. Este análisis sugiere que: *Todos los sistemas de tres partículas de masa finita compuestos por dos cargas idénticas (no interactuantes) ligadas a la tercera a través del potencial de Yukawa, soportan estados ligados para $\tilde{\sigma} < \tilde{\sigma}_c$ y en particular soportan estados ligados Borromeos si $\tilde{\sigma} \approx \tilde{\sigma}_c$.*

El $Ps^- (e^-, e^0, e^0)$, con electrones no interactuantes, tiene un estado ligado Borromeo por arriba de $\tilde{\sigma}_c \approx 1.1906$. La Figura 4.2 muestra la energía variacional del estado fundamental del ión Ps^- , junto con dos sistemas más exóticos. El Ps^- tiene una pequeña región Borromeana que es indistinguible en la figura. El panel derecho de la Figura 4.2 muestra las diferencias del valor medio de V_{12} en sistemas con mayor región Borromeana. Si se consideran sistemas con $q < 0$, 3 partículas atractivas, puede verse que el área de ligadura directamente proporcional a $|q|$. Los sistemas de tres partículas atractivas (con interacción de Yukawa) tienen entonces estados Borromeos en todo el rango de masas. Este resultado no es tan sorprendente, ni novedoso [65]², porque al incluir una partícula atractiva en un sistema de dos atractivas, la estabilidad esta asegurada. No se investigó en esta tesis el caso de interacción entre partículas nucleares, como protones y neutrones, o de átomos en condensados de Bose-Einstein, pero sabemos que las interacciones entre ellas son atractivas en el largo alcance.

Por otro lado, el potencial de Yukawa es también un modelo de potencial para interacciones nucleares. Un ejemplo de núcleo con estados Borromeos es el isótopo de Helio ${}^6He (\alpha, n, n)$, debido a que el 5He es inestable.

4.2.1. Análisis del comportamiento crítico

Analizaremos aquí el exponente crítico de la energía y algunas propiedades del sistema cerca del umbral. Se hace la suposición, al igual que en la sección 3.6, que la energía posee un comportamiento asintótico en un entorno de la línea crítica. La diferencia respecto del análisis realizado en 3.6 es que se estudiaron sistemas a α_3 fijo se obtuvo el exponente dominante de la energía en función del apantallamiento. La energía posee entonces una

²Ver también referencias allí citadas.

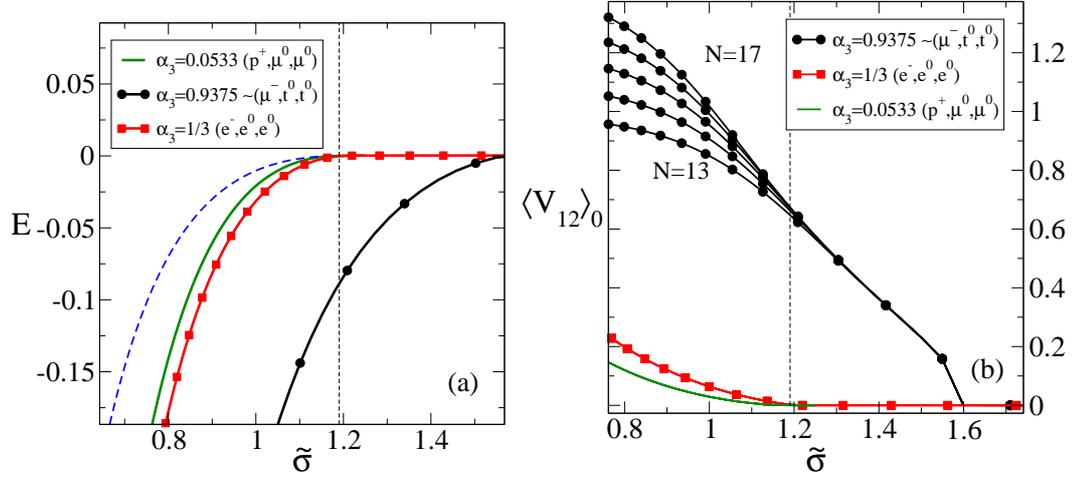


Figura 4.2: (a) Energías de algunos sistemas exóticos. La línea de trazos azul es el umbral de energía correspondiente a un sistema de dos partículas. Notar que las energías de los dos sistemas con $1 \lesssim m_3/m_1 < \infty$ ($\alpha_3 = 0.33, 0.0533$) no son muy sensibles a este cociente. Por otro lado, el sistema con $m_3/m_1 \approx 0.033$ ($\alpha_3 = 0.9357$) sufre un cambio considerable en energía y el valor crítico del apantallamiento es mucho mayor. (b) El valor medio de $V_{12} = \frac{e^{-r_{12}}}{r_{12}}$ calculado en el estado fundamental. El sistema con $m_3/m_1 \approx 0.033$ tiene un salto abrupto en el valor crítico.

forma asintótica

$$E_0(\tilde{\sigma}) - E_{th} \sim -e |\tilde{\sigma} - \tilde{\sigma}^{(c)}(\alpha_3)|^{\alpha(\tilde{\sigma}^{(c)}(\alpha_3))} \quad (4.6)$$

en donde se aclara explícitamente que $\alpha(\tilde{\sigma}_c)$ es, en principio, una función del apantallamiento crítico, el cual a su vez depende del valor³ de α_3 .

El exponente $\alpha(\tilde{\sigma})$ exacto puede obtenerse en el límite $\alpha_3 \rightarrow 0$ ($m_3^{-1} \rightarrow 0$). El sistema es separable y la energía del estado fundamental es $2\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma})$, donde $\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma})$ es la energía del sistema de dos partículas. La energía de ionización de dicho sistema es

$$E_0 - \mathcal{E}_0(\tilde{\sigma}) = \mathcal{E}_0(\tilde{\sigma}) \sim -e (\tilde{\sigma} - \tilde{\sigma}^{(c)})^2, \quad (4.7)$$

en donde e es una constante positiva. La Ec. (4.7) indica que el valor crítico del apantallamiento del sistema de tres partículas es el mismo que para dos partículas, $\tilde{\sigma}^{(c)} = \tilde{\sigma}_c = 1.1906$, y además el exponente α tiene valor 2.

El cálculo del exponente crítico se realizó utilizando FSS como se hizo en la sección 3.6. Utilizando la definición de la función Γ_α dada en la Ec. 3.38, se debe encontrar los valores de $\tilde{\sigma}$ en los cuales

$$\Gamma_\alpha(\tilde{\sigma}^{(N)}; N-2, N) = \Gamma_\alpha(\tilde{\sigma}^{(N)}; N, N+2) = \alpha^{(N)} \quad (4.8)$$

³Ambas parametrizaciones del exponente α , con $\tilde{\sigma}_c$ o α_3 , son útiles. Una de ellas relaciona el exponente con la cercanía del umbral de 2 partículas mientras que la otra lo conecta con el valor de la masa relativa del sistema.

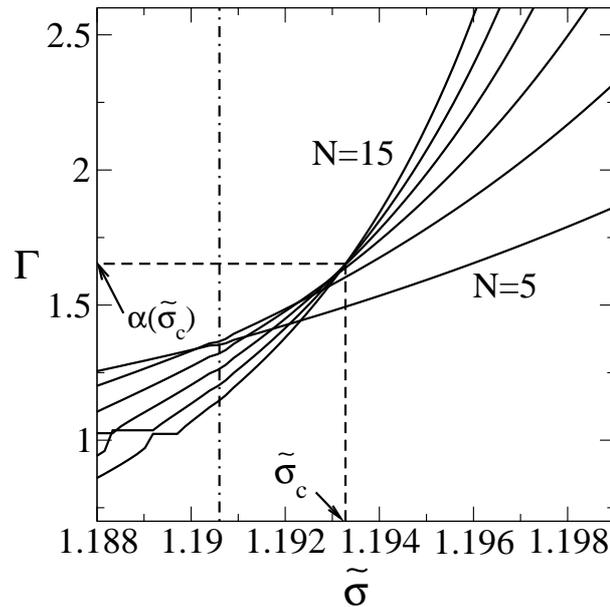


Figura 4.3: Las funciones $\Gamma_\alpha(\tilde{\sigma}, N, N')$ para $N' = N + 2$ y $N = 5, 7, 9, 11, 13, 15$. Las curvas corresponden a un valor de $\alpha_3 = 0.25$. Las líneas de trazos indican las coordenadas del cruce entre las curvas con $N = 15$ y $N = 13$, indicando el valor aproximado del exponente crítico α y el apantallamiento crítico $\tilde{\sigma}_c$. La línea de trazos y puntos indica el apantallamiento crítico $\tilde{\sigma}_c^{(2p)}$ para el sistema de dos partículas.

El método de FSS entrega mejores resultados si las bases elegidas para calcular las funciones $\Gamma_\alpha(\tilde{\sigma}; N, N')$ tienen valores lo más cercanos posible. Por razones de paridad en la base, aquí se tomó $N' = N + 2$.

La Figura 4.3 muestra las funciones Γ_α calculadas con varios pares $(N, N + 2)$ y un valor de $\alpha_3 = 0.25$. El método de FSS permite construir una secuencia de puntos $(\alpha^{(N)}, \tilde{\sigma}^{(N)})$ (los cruces de las curvas Γ_α a diferentes N) a partir de los cuales pueden extrapolarse los valores de $\tilde{\sigma}^{(c)}$ y el exponente crítico α . Aquí se chequeó que los cruces mostraban a convergencia, y se tomó el cruce entre las curvas con mayor N como el par de valores para α y $\tilde{\sigma}_c$. La aproximación variacional para el sistema con $\alpha_3 = 0.25$ mostrado en la Figura 4.3, no predice estados Borromeanos. Las funciones Γ_α muestran una discontinuidad (un *plateau* en la figura) si la energía variacional del sistema es igual al umbral⁴. Las discontinuidades de la Figura 4.3 se encuentran por debajo del valor de apantallamiento crítico de dos partículas $\tilde{\sigma}_c = 1.1906$. Sin embargo, los cruces de las curvas Γ_α ocurren en $\tilde{\sigma}^{(c)} > \tilde{\sigma}_c$, entonces el valor de $\tilde{\sigma}^{(c)}$ es mayor que $\tilde{\sigma}_c$.

La dependencia del exponente crítico con las masas relativas (o con el valor de la línea crítica $\tilde{\sigma}^{(c)}$), se obtiene de gráficos como los mostrados en la Figura 4.3 realizados

⁴La discontinuidad proviene de que el argumento del logaritmo en la Ec. (3.38) es negativo en ciertos puntos y la función no está bien definida.

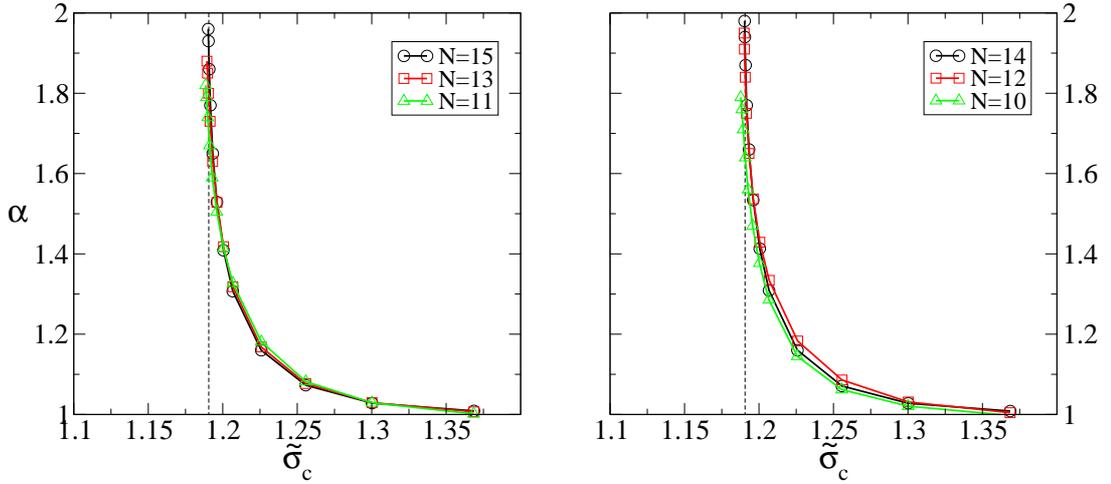


Figura 4.4: Exponente crítico de la energía como función del apantallamiento sobre la línea crítica de la Figura 4.1. Los dos gráficos corresponden a las series crecientes de tamaños de base pares e impares. Vemos que se predice un exponente 2 cuando el apantallamiento es el crítico de dos partículas σ_c , esto corresponde al sistema separable que tiene $\alpha_{exacto} = 2$. Para la zona Borromeana $\sigma > \sigma_c$, el exponente disminuye a uno, indicando otro tipo de transición para ese umbral.

con muchos valores diferentes de α_3 . La Figura 4.4 muestra los valores del exponente α en función del apantallamiento crítico. En un entorno del valor $\tilde{\sigma}_c \approx 1.1906$ los resultados indican fuertemente un exponente 2. Si $\tilde{\sigma}^{(c)}$ toma valores mayores que el valor crítico $\tilde{\sigma}_c$, el exponente crítico disminuye abruptamente a 1.

Este resultado es interesante, porque según un resultado estándar en sistemas cerca del umbral de ionización, si $\alpha = 1$ existe un estado normalizable en el umbral de ionización [41]. El trabajo de Klaus y Simon [3] considera constantes de acople de potenciales de corto alcance para *dos partículas* y aquí estudiamos tres partículas. Los resultados son *altamente dependientes de la dimensión* del espacio del problema. La dimensión de un problema de dos partículas es la dimensión del Laplaciano en coordenadas reducidas, por ejemplo en el problema Coulombiano del átomo de Hidrógeno la dimensión es 3 ($\mathbb{R}^{1 \times 3}$). Los sistemas de dos partículas en dimensiones mayores que tres tienen una relación directa con los problemas en 3 dimensiones. Las ondas s de problemas radiales en dimensión $D = 2l + 3$ tienen un mapeo exacto a ondas de momento angular l en dimensión 3.

Un trabajo posterior de los mismos autores [4], publicado solo meses después de [3], estudia en detalle uno de los tres posibles casos en sistemas de tres partículas. En un sistema de tres partículas pueden considerarse 3 casos del comportamiento cerca del umbral⁵.

La energía del umbral del continuo puede ser

⁵En el capítulo 3 se explicó que el umbral puede ser cero o la energía del subsistema más masivo.

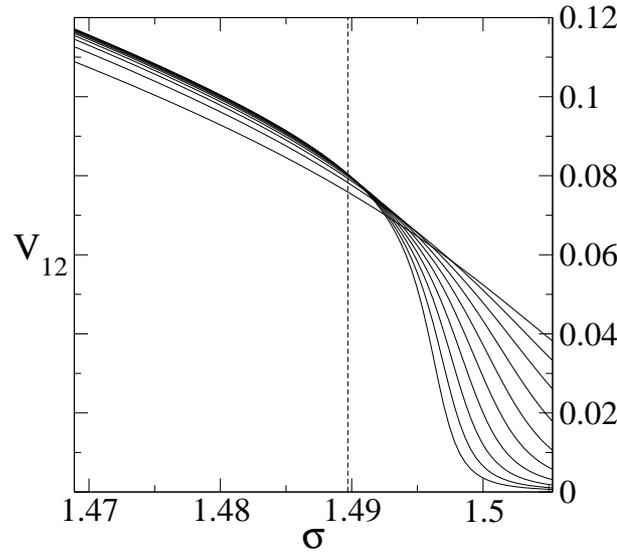


Figura 4.5: El valor medio de la repulsión en el estado fundamental para un sistema en el límite $q = 0$ y con $\alpha_3 = 0.9$. Se muestran las curvas obtenidas variacionalmente con $N = 8, \dots, 17$. El salto abrupto en un entorno del valor crítico (línea de trazos) es un indicio de un exponente igual a 1.

1. Cero. Corresponde a un umbral de 3 partículas salvo que $\tilde{\sigma}^{(c)} \equiv \tilde{\sigma}_c$.
2. La energía del único subsistema posible, en el caso de partículas idénticas. Umbral de 2 partículas *doble*.
3. La energía del subsistema más masivo, en el caso de sistemas asimétricos. Umbral de 2 partículas *simple*.

Los casos investigados en [4] son del tipo 3, en que el umbral de energía corresponde a un *único* sistema de dos partículas. Una hipótesis utilizada en la referencia [4] es que los potenciales de interacción entre partículas son atractivos. Sin embargo, los autores aclaran que la mayoría de los resultados *deberían* mantenerse si alguna interacción es repulsiva. El umbral de energía depende del apantallamiento (ver Ec. 3.23) y puede ser igual a $\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma})$ o a cero. En la referencia [4] se prueba rigurosamente que para el caso 3 el problema se reduce efectivamente a dimensión 3 ($\mathbb{R}^{1 \times 3}$). El exponente de la energía para el estado fundamental se obtiene en forma exacta y vale 2 (al igual que para dos partículas).

En esta Tesis hemos estudiado los 3 casos posibles. En la sección anterior se encontró que el umbral es de tres partículas, porque los sistemas son Borromeanos $\forall \alpha_3$. En el capítulo 3 se analizaron también casos en que el umbral no era único porque había *dos subsistemas* con la misma energía $\mathcal{E}_0(\tilde{\sigma})$, que corresponden a sistemas con partículas idénticas.

Si el umbral es de tres partículas (caso 1), no tenemos conocimiento de resultados rigurosos como los expuestos en [4] en los otros casos. Sin embargo en [4] se hace explícita

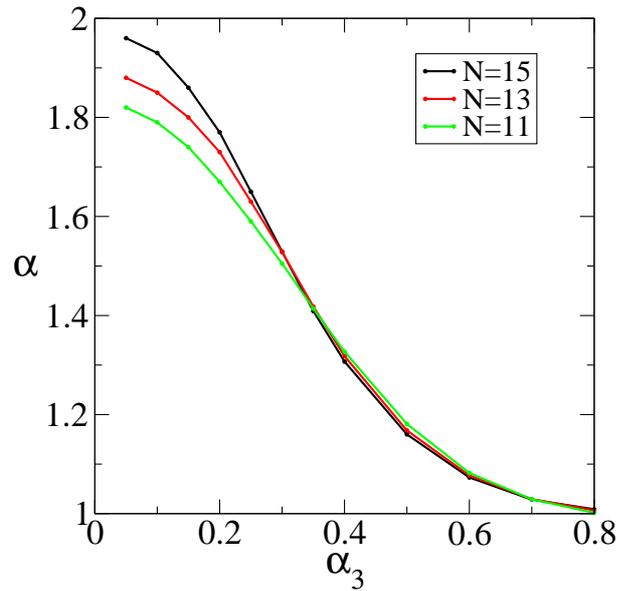


Figura 4.6: Exponente crítico de la energía en función de α_3 para un sistema de dos partículas idénticas no interactuantes. Los sistemas con dos masas muy grandes $\alpha_3 \approx 1$ tiene un exponente igual a 1.

la sospecha que si el umbral es de tres partículas, puede interpretarse que la dimensión reducida del problema es $\mathbb{R}^{2 \times 3}$. Si eso es cierto el término dominante de la energía es siempre $\alpha = 1$ [3]. Los resultados con dos partículas idénticas no interactuantes (Figura 4.4) muestran que el exponente es igual a 1, si el sistema esta lejos del umbral de dos partículas. Al analizar el exponente en función de la variable α_3 (Figura 4.6), se observa que los sistemas con $\alpha \approx 1$ son aquellos con configuraciones tipo molécula ionizada $\alpha_3 \approx 1$ (M^+, M^+, m^-).

Un exponente 1 también puede detectarse con cambios abruptos en los valores medios cuando la energía del sistema alcanza la de umbral. La Figura 4.2 muestra el valor medio del potencial repulsivo en algunos sistemas, que otorga una idea del comportamiento de la distancia entre las partículas idénticas. La Figura 4.5 muestra el comportamiento asintótico de las curvas $\langle V_{12} \rangle_0$ cerca del valor crítico, para varios valores del tamaño de base N .

Los trabajos sobre tres partículas con resultados rigurosos utilizan la hipótesis de potenciales atractivos, con la aclaración de que los resultados tienen *validez* para potenciales con cambios de signo. La repulsión entre las partículas idénticas indica que el problema no cumple con las hipótesis planteadas en [4]. Es posible entonces aportar información cualitativa de los exponentes críticos, al menos desde el punto de vista numérico, cuando existen potenciales repulsivos o, aún más interesante, en casos de umbrales dobles para partículas idénticas. Algunos resultados sobre estos casos fueron expuestos en el capítulo 3 y haremos una conexión con los resultados rigurosos. La Figura 3.12 corresponde a

sistemas simétricos y se observa que a ambos lados del apantallamiento crítico 1.1906, el exponente de la energía es igual a 1. El argumento en favor de este valor se debe a la simetría del Hamiltoniano con partículas idénticas. Si la energía de tres partículas cruza la energía de umbral, una de las partículas idénticas queda localizada formando un estado ligado con la partícula de signo opuesto. Sin embargo, teniendo en cuenta que las partículas son idénticas, en un entorno por debajo de la energía de umbral ninguna de las dos partículas puede encontrarse más localizada que la otra. Esto hace que la densidad electrónica de una partícula⁶ permanezca localizada hasta valores de energía muy cercanas a la de ionización. Si la energía supera la de umbral la densidad electrónica de una partícula presenta dos picos que describen una partícula localizada y la otra alejada del origen, lo que corresponde a un exponente $\alpha = 1$.

La idea presentada en [4] sobre la dimensión reducida de los sistemas de tres partículas, puede también utilizarse para argumentar un exponente $\alpha = 1$ en el caso 2. Si el umbral es *Doble* ($\tilde{\sigma}^{(c)} < 1.1906$), la dimensión reducida que corresponde, según el argumento esgrimido en [4], es 6 y por lo tanto $\alpha = 1$.

Si se rompe la simetría de las partículas idénticas reduciendo la masa de una de ellas, el umbral que corresponde es simple y estamos en el caso 3. La Figura 3.13 muestra el valor del exponente de la energía como función de la masa de la partícula de signo opuesto. Los valores de μ_2 incluidos en el gráfico indican la diferencia de masas entre las partículas con la misma carga ($\mu_2 = 1$ idénticas ; $\mu_2 < 1$ asimétricas). La curva que corresponde a $\tilde{\sigma} = 0.7$, lejos del valor crítico $\tilde{\sigma}_c$, muestra como el sistema cambia su comportamiento. Puede observarse que si $\mu_2 \approx 1$ el exponente es 1, de acuerdo a lo explicado para partículas idénticas. Por otro lado, si $\mu_2 < 1$ el exponente sube a 2 cuando el umbral de energía se hace simple. Los resultados obtenidos no son directamente comparables con los de [4], debido a que los potenciales no son todos atractivos, pero otorgan una idea cualitativa del comportamiento. Las curvas con $\tilde{\sigma}^{(c)} \approx \tilde{\sigma}_c$ en la Figura 3.13 muestran también un comportamiento similar. Sin embargo, la cercanía del apantallamiento al valor crítico $\tilde{\sigma}_c \approx 1.1906$ modifica las condiciones del problema y no es claro cual es la dimensión reducida en ese caso.

El análisis realizado en este capítulo y el anterior puede resumirse en el siguiente cuadro

⁶La densidad electrónica de una partícula es $\rho(r_1) = r_1^2 \int |\Psi(r_1, r_2)|^2 d^3 r_2$.

El exponente crítico de la energía del estado fundamental de los sistemas de tres partículas, interactuando con potenciales de corto alcance, depende en gran medida de cual sea la energía umbral (o fondo del continuo). Sin considerar los casos con energía dos partículas cercana a cero, los resultados obtenidos sugieren que:

1. *Si el umbral es de tres partículas, $\alpha = 1$ (Dimensión equivalente en dos cuerpos \mathbb{R}^6).*
2. *Si el umbral es de dos partículas degenerado (doble), $\alpha = 1$ (\mathbb{R}^6).*
3. *Si el umbral es de dos partículas simple, $\alpha = 2$ (\mathbb{R}^3).*

4.3. Dos partículas idénticas de carga q

Los sistemas de tres partículas cuyo parámetro q (Ec. 4.3) es menor que 1 representan sistemas en los cuales la partícula de signo opuesto (m_3) es la más cargada de las tres. Algunos sistemas simétricos con $q < 1$ son el He , el catión Li^+ , el doble catión Be^{2+} , etc. Si las partículas idénticas tienen una carga mayor, entonces $q > 1$ y algunos ejemplos exóticos son los iones moleculares He_2^{+++} , Li_2^{5+} . Si la carga relativa q es menor que la unidad es difícil encontrar sistemas moleculares con partículas idénticas masivas (tipo H_2^+) menos cargadas que la partícula liviana. La relación entre cantidad de masa y carga en núcleos atómicos se modifica en los diferentes isótopos nucleares, pero normalmente la cantidad de protones es inferior a la de neutrones⁷. Los problemas de interacciones entre iones y átomos seguramente incluyen situaciones en que se contemplen estos casos, sin embargo no es ese el objetivo de la presente Tesis. En el otro extremo, si el parámetro q es mayor que 1 no existen sistemas atómicos con núcleos menos cargados que sus pseudo-electrones. Teniendo en cuenta estas salvedades, la clase de análisis que se realizó en esta tesis sobre la estabilidad de estados fundamentales del Hamiltoniano permite recorrer todo el rango de valores de masas (α_3) y cargas q del diagrama de estabilidad. De modo que los diagramas de estabilidad del estado fundamental de sistemas con carga q se confeccionaron en todo el rango de valores de α_3 .

La Figura 4.7 muestra el diagrama de estabilidad del estado fundamental para sistemas con diferente cantidad de carga. Se observa como el aumento de la carga de las partículas idénticas ($q > 1$) resulta en una disminución del área de estabilidad. A diferencia de los diagramas para cargas $q = 0$ y $q = 1$, aparecen regiones de inestabilidad en zonas de apantallamiento más pequeño. Por ejemplo, las curvas obtenidas para sistema de carga $q = 2$ y parámetro $\alpha_3 \approx 0$ muestran que es inestable cerca de $\tilde{\sigma} = 0$, se estabiliza entre $\tilde{\sigma} \approx 1.10$ y $\tilde{\sigma} \approx 1.153$ y es nuevamente inestable para $\tilde{\sigma} > 1.153$.

Las partículas en un sistema con $\tilde{\sigma} = 0$ interactúan con un potencial Coulombiano. Si además el parámetro $\alpha_3 \equiv 0$, el Hamiltoniano corresponde un ión (tipo H^-) con un

⁷Siendo el 3He una excepción importante.

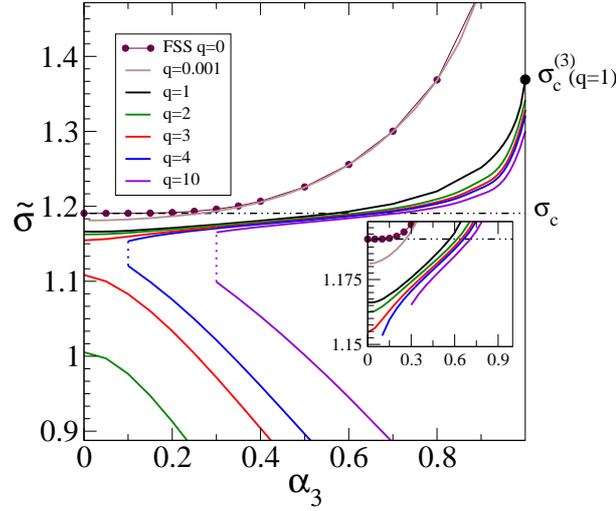


Figura 4.7: Diagrama de estabilidad para el estado fundamental de sistemas con 2 partículas idénticas con cargas $q = 0, 1, 2, 3, 4$ y 10. Por arriba de la línea de trazos-punto-punto el subsistema de dos partículas no es ligado. Los sistemas con cargas $q \geq 2$ presentan dos líneas críticas $\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q)$ y $\tilde{\sigma}_{sup}^{(c)}(q)$. La región de estabilidad es la contenida entre estas dos curvas.

núcleo de masa infinita y carga $1/q$. Este sistema fue estudiado muy en detalle por varios autores [2, 6, 66]⁸ con el fin de determinar el máximo valor crítico de q con que el sistema es capaz de soportar dos electrones. El mismo problema fue investigado también desde un punto de vista analítico utilizando series de potencias en q para expresar la energía del sistema [67]. El radio de convergencia de la serie encontrada coincide con el valor crítico de la carga [68], y el valor más preciso obtenido es $q_{coul} = 1.09766079$ [69].

Los sistemas con apantallamiento $\tilde{\sigma}$ no nulo, también muestran que existe un valor $q_c(\tilde{\sigma})$. Dado que los diagramas de estabilidad estudiados aquí fueron construidos manteniendo la carga q fija, es más natural definir la relación inversa $\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q, \alpha_3)$ y $\tilde{\sigma}_{sup}^{(c)}(q, \alpha_3)$. Los resultados previos obtenidos en el caso Coulombiano indican que $\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q_{coul}, 0) = 0$ y además que $\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q, 0) > 0$ si $q > q_{coul}$. Las líneas críticas variacionales encierran un área de estabilidad menor a la exacta, lo cual puede utilizarse para argumentar que la región de inestabilidad variacional en los diagramas, es debida a una mala aproximación variacional. El análisis riguroso del caso Coulombiano da un fuerte sustento a la existencia de la región de inestabilidad en sistemas apantallados, como la que muestran los diagramas de la Figura 4.7.

La región de estabilidad intermedia puede relacionarse con lo investigado en el capítulo 2. En los sistemas estudiados allí se mostró que el aumento del acople correspondiente al potencial atractivo causa la inestabilidad del sistema. El problema estudiado en este

⁸Ver referencias dentro de [6] también.

Cuadro 4.1: Energías (Hartree $\times 10^{-2}$) del ion Li^+ y el He con apantallamiento $\tilde{\sigma} = 1.11074$.

N	He	Li^+
11	-0.17831	-0.19615
13	-0.178365	-0.196191
15	-0.178377	-0.196197
17	-0.1783789	-0.1961982

capítulo es más complejo, porque $\tilde{\sigma}$ modifica el apantallamiento de ambos potenciales, atractivos y repulsivos. La región de estabilidad intermedia es entonces algo no trivial, ya que no puede deducirse a partir de la forma de los potenciales, que en este caso son ambos de corto alcance.

El análisis realizado en sistemas Coulombianos para encontrar el valor de q_{coul} puede hacerse con interacciones apantalladas en el límite $\alpha_3 = 0$. Los sistemas de carga q y parámetro α_3 fijo, son estables en una región acotada por líneas críticas ($\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q, \alpha_3), \tilde{\sigma}_{sup}^{(c)}(q, \alpha_3)$). El objetivo es establecer una cota inferior del valor de carga q_{yuk} definido implícitamente por

$$\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q_{yuk}, 0) = \tilde{\sigma}_{sup}^{(c)}(q_{yuk}, 0). \quad (4.9)$$

A causa del carácter variacional de los métodos utilizados, se obtuvo una cota para q_{yuk} tal que si $q < q_{yuk}^{(var)}$, existe una región de estabilidad ($\tilde{\sigma}_{inf}^{(c)}(q, \alpha_3), \tilde{\sigma}_{sup}^{(c)}(q, \alpha_3)$). Observando la Figura 4.7 puede deducirse que el valor crítico se encuentra entre $q = 3$ y $q = 4$, con una cota inferior $q_{yuk}^{(var)} = 3$. Al realizar un análisis con más precisión se obtuvo la cota

$$q_{yuk} > q_{yuk}^{(var)} = 3.5. \quad (4.10)$$

4.3.1. Energías y Apantallamientos críticos para Li^+ y He

En esta sección estudiaremos en más detalle las energías calculadas para el He y el ion Li^+ . La Tabla 4.1 muestra las energías calculadas para ambos sistemas con el mismo apantallamiento $\tilde{\sigma}$ cercano al valor crítico. El valor de la energía de umbral en ese punto es $E_{th}(\tilde{\sigma} = 1.11074) = -0.001438064$ por lo que los dos sistemas soportan un estado ligado para ese valor de apantallamiento.

Las energías variacionales obtenidas para los sistemas He y Li^+ indican que los mismos presentan estados Borromeanos. La parte (a) de la Figura 4.8 muestra las energías variacionales del Helio y puede verse que la energía de umbral correspondiente cruza la energía del He en valores negativos. Esto indicaría que el Helio no soporta estados ligados Borromeanos. Sin embargo, utilizando FSS se logró obtener un valor de apantallamiento crítico *mayor* que el apantallamiento crítico de dos partículas $\tilde{\sigma}_c \approx 1.1906$. La parte (b) de la Figura 4.8 muestra las funciones Γ_α calculadas con diferentes tamaños de base y puede observarse que los cruces se dan en puntos por arriba del apantallamiento crítico. En las secciones previas se probó que el diagrama de estabilidad de un sistema con carga

Q siempre se encuentra dentro de la región estable de los diagramas de sistemas con carga $q < Q$. La región de ligadura Borrromeana del Helio está limitada entonces por la línea crítica obtenida en el límite $q \rightarrow 0$ y el valor crítico $\tilde{\sigma}_c$. La Figura 4.1 muestra que esta región es muy reducida, de modo que la existencia de un estado Borrromeano en el He , si existe, resultaría difícil de probar variacionalmente.

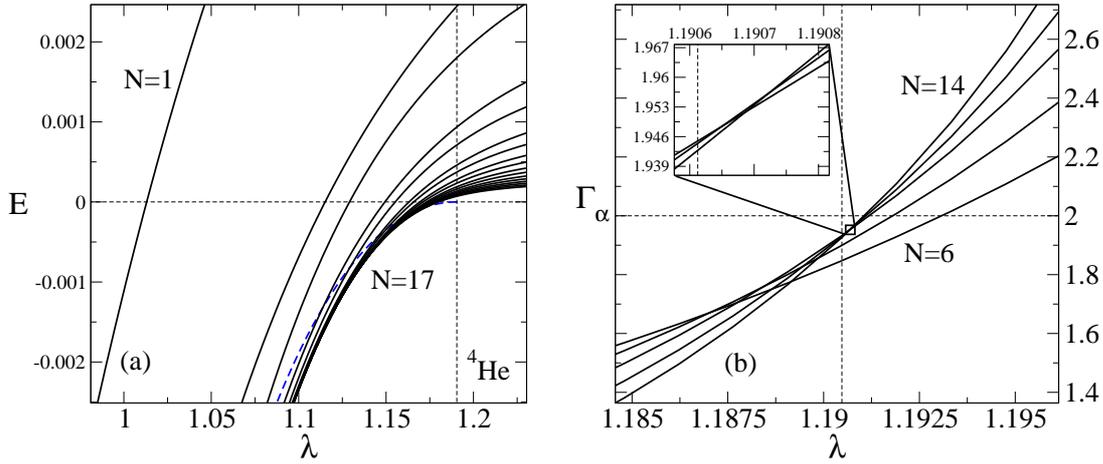


Figura 4.8: (a) Energía del He con interacciones apantalladas para diferentes tamaños de la base. (b) Las funciones Γ_α obtenidas con los mismos parámetros que en la parte (a). El método de FSS sugiere que el He presenta un estado Borrromeano.

4.4. Efecto Efimov

En el capítulo anterior se estudió el efecto Efimov en sistemas apantallados. Las características de los sistemas que presentan efecto Efimov, como se ha explicado en la sección 3.5, son la existencia de un umbral doble (o degenerado) y un cociente de masas suficientemente grande $m_1/m_3 \gtrsim 13.6$ [57]. El umbral es doble en un intervalo finito (no puntual) del apantallamiento solamente si las partículas son idénticas, como en los casos considerados aquí. El cociente entre masas indica que los sistemas candidatos a mostrar el efecto deben ser tipo moléculas ionizadas (H_2^+ , He_2^{3+} , etc.). Con el fin de mostrar la presencia del efecto en sistemas de este tipo, se calcularon las energías variacionales de tres moléculas exóticas: el He_2^{3+} y las moléculas que se obtienen a partir de esta reemplazando el electrón por las partículas entre los paréntesis $He_2^{3+}(\mu^-)$ y $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$.

La Figura 4.9 muestra las energías de los tres iones moleculares indicados anteriormente. La cantidad de estados ligados en los tres iones aumenta en forma directamente proporcional al cociente entre masas de las partículas interactuantes m_α/m_x . El ión $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$ tiene un cociente de masas $m_\alpha/m_x = 3.972599$, que es menor que el valor mínimo necesario para que exista el efecto Efimov. La cantidad de estados ligados del $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$ en la Figura 4.9 es 1, mostrando que no hay efecto Efimov, pero muestra una

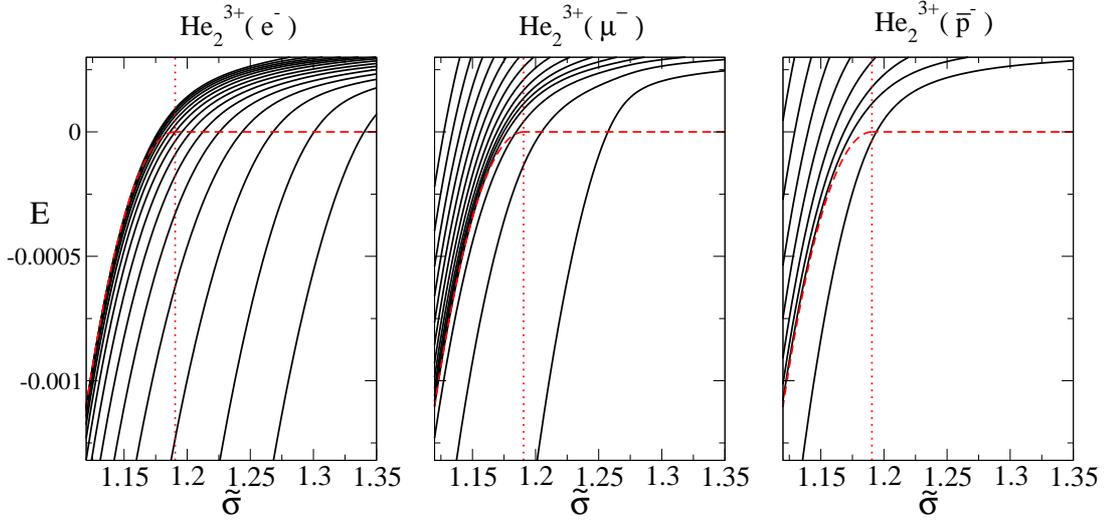


Figura 4.9: Energías variacionales de los sistemas $He_2^{3+}(e^-)$, $He_2^{3+}(\mu^-)$, $He_2^{3+}(p^-)$. La partícula entre paréntesis es la que reemplaza al electrón en los sistemas indicados. El cociente m_α/m_x entre la masa de la partícula α en los núcleos y la partícula liviana disminuye de izquierda a derecha (7294.299, 35.27765, 3.972599). La línea de trazos es el umbral de dos partículas y la línea de puntos vertical indica el valor crítico de dos partículas.

pequeña región Borrromeana. En el otro extremo, el ión He_2^{3+} tiene un cociente de masas $m_\alpha/m_x = 7294.299$ mayor que el mínimo necesario y se observa claramente que soporta muchos estados ligados.

El valor mínimo del cociente de masas para que el efecto tenga lugar indica la aparición del efecto, pero la constante universal que lo caracteriza e^{π/s_0} es una función del cociente de masas. En el límite $m_\alpha/m_x \rightarrow \infty$ se probó que la constante universal tiende a 1 [57]. La constante puede calcularse realizando el cociente de energías entre las energías de los niveles ligados más altos, como se hizo en el capítulo anterior. Aquí se analizaron todos los cocientes entre energías consecutivas como función del apantallamiento y se comprueba que existe un escaleo en los cocientes cuando hay efecto Efimov. La Figura 4.10 muestra el escaleo de las funciones

$$\left(\frac{E_n^{(N)}}{E_{n+1}^{(N)}} \right)^{1/2} \approx e^{\pi/s_0}, \quad (4.11)$$

en donde n indica el nivel variacional. El panel de la izquierda en la Figura 4.10 muestra los cocientes calculados para el He_2^{3+} . El primer cociente, que corresponde a $n = 1$, no parece ser parte del mismo escaleo que los otros cocientes. No realizó un análisis extensivo del escaleo en muchas situaciones, sin embargo esto puede indicar que el nivel fundamental no es un trímero de Efimov. Los siguientes niveles muestran un escaleo hasta $n = 15$ que parece tener un punto crítico en $e^{\pi/s_0} \approx 1.17$. No hay una teoría que sustente la elección

del parámetro de Efimov como el cruce de todas las curvas, pero los indicios apuntan a ello en estos sistemas.

El panel de la derecha en la Figura 4.10 muestra los cocientes para el ión $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$ que no presenta efecto Efimov. La diferencia en el escaleo de las curvas parece indicar la ausencia del efecto en este sistema, en particular no existe un punto en que los cruces de las curvas muestren convergencia.

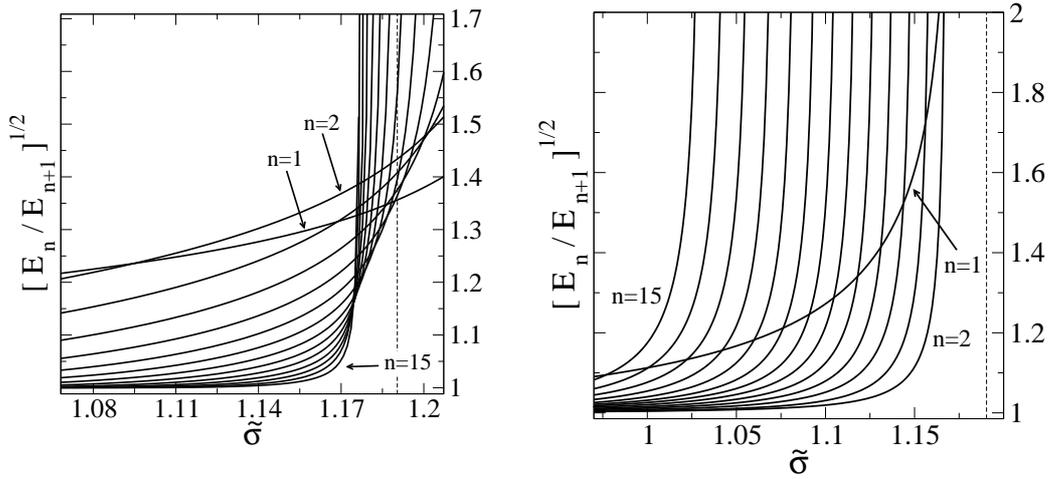


Figura 4.10: Escaleo de las curvas $\left(\frac{E_n^{(N)}}{E_{n+1}^{(N)}}\right)^{1/2}$ como función del apantallamiento. Los dos paneles fueron obtenidos con una base de tamaño $N = 17$. El panel de la izquierda corresponde al ión He_2^{3+} mientras que el de la derecha al ión $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$. El ión He_2^{3+} presenta el efecto Efimov y el escaleo de las curvas es notablemente diferente.

4.5. Conclusiones del capítulo

Este capítulo es una extensión de las investigaciones que se mostraron en el capítulo 3 a sistemas con cargas no unitarias. Dentro de los sistemas estudiados en el capítulo 3 nos limitamos a los simétricos con dos partículas idénticas. Se calcularon diagramas de estabilidad y analizaron las regiones en que existen estados Borromeanos y se mostró que algunos sistemas cargados presentan efecto Efimov.

El análisis del Hamiltoniano su dependencia con los parámetros q y α_3 mostró, tanto en forma numérica como analítica, que el área de estabilidad es inversamente proporcional al valor de la carga relativa $q > 0$. En el caso particular de $q = 0$ el método de FSS indica que para todo el rango de masas existen estados Borromeanos con $\tilde{\sigma} \approx 1.1906$. La prueba variacional puede lograrse optimizando los valores de la base para cada elección de α_3 . Sin embargo, probamos que el punto $(\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_c, \alpha_3 = 0)$ pertenece a la línea crítica, de

modo que aún con una mejor cota variacional los sistemas con $\alpha_3 \approx 0$ tienen una región Borromeana muy reducida. En particular, para sistemas con $q = 1/2$ como el Helio, el método de FSS también predice una región de ligadura Borromeana muy pequeña.

La capacidad de ligadura del ión H^- como función de la carga nuclear fue objeto de muchas investigaciones [2, 6, 66]. Aquí mostramos que en el caso apantallado también existe una carga crítica nuclear q_{yuk} para la cual los sistemas atómicos con $q < q_{yuk}$ soportan un estado ligado en un intervalo de apantallamientos. La cota variacional que se obtuvo para este valor es $q_{yuk} > 3.5$ con un estado ligado en el intervalo $\tilde{\sigma} \in (1.136, 1.145)$.

El comportamiento crítico de los sistemas cargados con $q = 0$ fue explicado en detalle utilizando algunos resultados del capítulo 3. La discusión realizada esta resumida en el cuadro de la sección 4.2.1. Algunos resultados confirman investigaciones anteriores [4], como en el caso de un umbral de energía simple al que corresponde $\alpha = 2$. Los aportes en los otros dos casos posibles sustentan algunas predicciones realizadas [4], si los valores críticos de apantallamiento para los sistemas de dos y tres partículas no son similares. Los sistemas con un umbral doble y apantallamiento crítico distinto del de dos partículas tienen un exponente $\alpha = 1$. Sin embargo, en el caso de dos partículas en un potencial externo estudiado en el capítulo 2, mostramos que el exponente toma el mismo valor que el de dos partículas si los apantallamientos críticos son iguales. Al considerar la masa finita de la tercer partícula los sistemas son diferentes a los del capítulo 2, pero el exponente crítico muestra también un comportamiento anómalo si los apantallamientos son similares. La masa finita sintoniza también la aparición del efecto Efimov y la constante universal e^{π/s_0} . El potencial efectivo de decaimiento cuadrático que ocurre en el efecto Efimov tiene una constante de acople que depende de s_0 , lo que sugiere que el exponente crítico puede depender continuamente del cociente de masas como se muestra en el apéndice B.3. A lo largo del capítulo se hizo notar que los resultados de exponentes críticos son cualitativos y están limitados por razones numéricas, pero permiten obtener un escenario del comportamiento crítico de los sistemas apantallados.

Un resultado interesante que se encontró para el efecto Efimov es el escaleo de las energías variacionales. Un desarrollo más profundo de este aspecto puede ser una herramienta útil en la detección del efecto Efimov en aproximaciones variacionales.

... tenía que cuidarme por miedo al dolor y a las náuseas, pero lo que yo había olvidado era algo que no debía haber olvidado, y ahora me dieron ganas de acabar de una vez. Era que eso brachnos doctores habían dispuesto las cosas de modo que cualquier música que me emocionara tenía que enfermarme, lo mismo que si videara o quisiera recurrir a la violencia, y esto porque todas esas películas de violencia tenía música. Y recordé especialmente la horrible película nazi con la Quinta de Beethoven, último movimiento. Y ahora descubría que el hermoso Mozart se había convertido también en algo horrible.

Anthony Burgess, “La naranja mecánica”.

Capítulo 5

Resonancias en sistemas dos electrones

Las resonancias cuánticas de forma están presentes en muchos sistemas atómicos y moleculares. En este capítulo analizaremos las que aparecen en sistemas dos electrones dentro de un potencial externo. Comenzaremos con una descripción detallada de algunos conceptos de resonancias en sistemas de una partícula. Explicaremos en detalle el método de escaleo complejo utilizado para obtener la energía y la vida media de las resonancias en sistemas de una y dos partículas. A continuación calcularemos las energías de estados ligados y de resonancias de dos electrones en un potencial externo que sirve de modelo para un punto cuántico. Los métodos de cálculo que utilizaremos son el escaleo complejo y el cálculo de la densidad de estados, además la parte real de la energía de las resonancias la calcularemos también con dos nuevos métodos alternativos desarrollados aquí. El entrelazamiento de los electrones en las resonancias será estudiado analizando la entropía de Von Neumann de estados variacionales de Rayleigh-Ritz. Finalmente, propondremos una definición para la entropía de una resonancia haciendo una extensión natural de los conceptos utilizados en escaleo complejo.

5.1. Resonancias en sistemas de una partícula

5.1.1. ¿Qué es una resonancia?

En la introducción de esta Tesis se incluyeron algunas ideas conceptuales sobre una resonancia en un problema de dispersión. La bibliografía sobre resonancias es muy grande y abarca muchas áreas de la física, siendo la dispersión de ondas y partículas una de las más amplias. Dos libros fundamentales sobre resonancias en dispersión de sistemas cuánticos son los de Taylor [26] y Newton [27]. Brevemente, en un experimento de dispersión se se lanzan proyectiles con diferentes energías hacia un blanco, que consideraremos fijo. Las resonancias corresponden a los casos en que la energía del proyectil es tal que este interactúa un tiempo finito τ con el blanco y luego vuelve a alejarse del mismo. El tiempo finito τ es la *vida media de la resonancia*, y la energía del proyectil es la *energía de la resonancia* E_τ .

Las funciones de onda correspondientes a resonancias son esencialmente soluciones de la ecuación de Schrödinger que corresponden a empalmar una solución en un entorno del origen (dependiente del potencial) con otra en la que el proyectil está muy alejado del blanco. En esta Tesis solo trataremos con interacciones de corto alcance, consideraremos por lo tanto que el potencial se anula si el proyectil está muy alejado. Los potenciales proyectil-blanco que presentan resonancias normalmente tienen una forma como la mostrada en la Figura 1.9. Para fijar ideas diremos que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda v(r)$, en donde \mathcal{H}_0 representa un pozo de potencial y $\lambda v(r)$ una barrera de altura variable con el parámetro λ . Las soluciones lejos del origen son de la forma

$$\phi(r \rightarrow \infty) = A(k)e^{-ikr} + B(k)e^{+ikr} \simeq e^{-ikr} + S(k)e^{+ikr} \quad (5.1)$$

en donde r es la separación entre el proyectil y el blanco, y $E = \frac{(\hbar k)^2}{2\mu}$. La solución es una combinación de ondas planas entrantes y salientes, y el cociente entre las amplitudes $S(k)$ es la matriz de dispersión. El problema de dispersión consiste en unir suavemente las soluciones exteriores e interiores en un radio de tamaño característico del sistema y de esta forma establecer la relación entre el corrimiento de fases originado en la dispersión y la energía del proyectil.

La matriz de dispersión puede tener polos en dos casos [26, 27]:

1. Si $B(k)$ tiene un polo. Estos son llamados polos *falsos* y no están relacionados con las resonancias. Además son independientes del potencial y existen aún cuando $\lambda \rightarrow 0$.
2. Si la amplitud $A(k)$ de las ondas entrantes se anula. Si el polo se encuentra en el eje imaginario positivo del plano complejo k , entonces corresponde a un estado ligado y no es relevante para la dinámica. Los polos asociados a las resonancias son aquellos que se encuentran en el cuarto cuadrante del plano complejo ($\text{Re}(k) > 0$; $\text{Im}(k) < 0$). También pueden existir polos en la parte negativa del eje imaginario que corresponden a estados virtuales o *antiligados*, de los cuales no haremos aquí más referencia.

Desde el punto de vista dinámico, las resonancias son estados temporalmente localizados que al cabo de un tiempo se deslocalizan. Un autoestado ϕ_n de un Hamiltoniano independiente del tiempo tiene como evolución temporal la función

$$\psi_n(r, t) = \phi_n(r) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (5.2)$$

en donde E_n es la energía del estado ϕ_n . La densidad de probabilidad para este estado, como función del tiempo tiene la forma

$$|\psi_n(r, t)|^2 = |\phi_n(r)|^2 \quad (5.3)$$

y es constante en el tiempo. Entonces, claramente las resonancias no pueden ser autoestados con energías reales, por que deben deslocalizarse luego de un tiempo. Lo cierto es que las resonancias (o estados de Gamow o Siegert) son estados que cumplen

$$H\phi^{res} = E_{res}\phi^{res}, \quad E_{res} = E_r - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (5.4)$$

es decir son *estados cuánticos* con energía compleja, razón por la cual los polos de $S(k)$ en el plano complejo k están en el cuarto cuadrante. Sin embargo, los autovalores de un operador Hermitiano, como el Hamiltoniano, son reales. La Ec. (5.4) no está en contradicción con esto, sino que debemos tener en cuenta que la Hermiticidad del Hamiltoniano también depende del dominio de aplicación del operador. En el caso unidimensional $\mathcal{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda V$, con V real, podemos escribir que un operador es Hermitiano si cumple

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\hat{\mathcal{H}}g(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\hat{\mathcal{H}}^*g(x)dx \quad (5.5)$$

para todo par de funciones $f(x)$, $g(x)$ en el dominio de aplicación. Haciendo una integración por partes se puede reescribir como

$$g(x) \left| \frac{df(x)}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} - f(x) \left| \frac{dg(x)}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (5.6)$$

La Ec. (5.6) se cumple si las funciones están en el espacio de Hilbert, ya que $f(\pm\infty) = 0$, $g(\pm\infty) = 0$. El Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ es entonces Hermitiano si opera sobre un espacio de Hilbert. En el caso más general, la Ec. (5.6) se cumple si las funciones $f(x)$ y $g(x)$ son acotadas. Un caso común es el de las ondas planas correspondientes al continuo. Si las funciones $f(x)$ y $g(x)$ crecen indefinidamente y no pueden ser acotadas de ningún modo, como el caso de ϕ^{res} (ver Ec. (5.1)), entonces el operador $\hat{\mathcal{H}}$ no es Hermitiano. La Ec. (5.4) tiene ahora un sentido más claro, ya que al ser $\hat{\mathcal{H}}$ un operador no Hermitiano, tiene la posibilidad de tener autovalores complejos.

La evolución temporal de ϕ^{res} se obtiene también de la Ec. (5.2), pero la energía es compleja y la densidad de probabilidad toma la forma

$$|\psi_n(r, t)|^2 = |\phi_n(r)|^2 e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}}. \quad (5.7)$$

La densidad de probabilidad a r fijo decae a cero a tiempos largos. La integral de la densidad normalizada adecuadamente es igual a la cantidad de partículas dentro de la región de integración. La Ec. (5.7) puede interpretarse entonces como un sistema en que la cantidad de partículas dentro de una esfera de radio R disminuye con el tiempo hasta desaparecer. Si deseamos mantener constante la cantidad de partículas dentro de la esfera, el radio debe crecer con el tiempo. Claramente esto induce a relacionar una resonancia con un estado que se *expande* al transcurrir el tiempo.

5.1.2. Resonancias en el espectro variacional de Rayleigh-Ritz

La detección y caracterización de resonancias en mecánica cuántica tiene en su haber una larga lista de métodos computacionales. En su mayoría los métodos para determinar el espectro y las autoenergías se basan en, o utilizan, la Hermiticidad del Hamiltoniano. Como consecuencia se asume que sus autofunciones son normalizables y acotadas, y que sus energías son reales. Al estudiar resonancias el Hamiltoniano puede no ser Hermitiano y

las autofunciones no acotadas. Por otro lado, la parte real de la energía E_r de la resonancia siempre toma valores que se superponen con el espectro continuo del Hamiltoniano, lo que presenta una posible degeneración no contemplada en métodos computacionales.

En esta sección utilizaremos el método variacional de Rayleigh-Ritz, con funciones base en \mathcal{L}^2 , para estudiar el comportamiento del espectro de un problema de una partícula cuyo Hamiltoniano presenta resonancias de forma. El método consiste, como ya hemos explicado en capítulos anteriores, en seleccionar una *base completa para expandir el espacio de Hilbert* y obtener resultados aproximados truncando la base a un tamaño finito. Enfatizamos la frase sobre el espacio de Hilbert por que debemos tener en cuenta que las resonancias no pertenecen a este espacio.

El problema modelo que utilizaremos esta descrito por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{\nabla^2}{2} - V_0 e^{-r} + \lambda e^{-\beta r}, \quad (5.8)$$

en donde los parámetros V_0 y β serán especificados en breve. El potencial (5.8) es similar al ejemplo utilizado en la introducción para modelar la interacción entre un núcleo y una partícula α . La Figura 5.1 muestra el potencial evaluado en algunos valores específicos de los parámetros V_0 , β y λ .

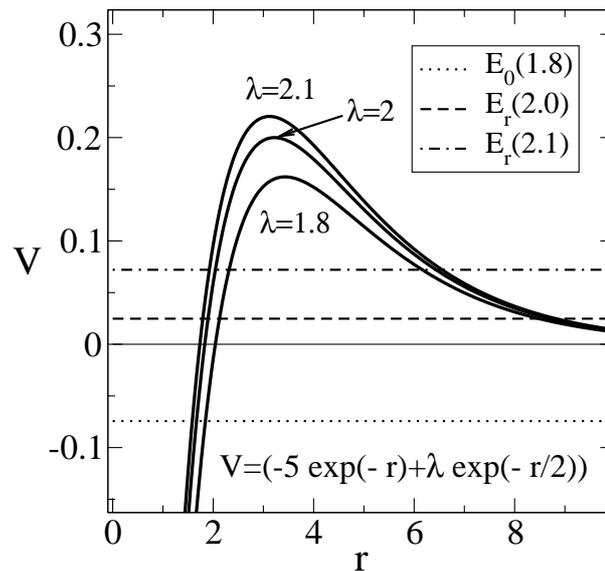


Figura 5.1: El potencial de la Ec. (5.8) graficado para $\beta = 1/2$, $V_0 = 5$ y tres valores de $\lambda = 1.8, 2.0, 2.1$. También se muestra el valor de la energía E_0 para el único estado ligado con $\lambda = 1.8$ (línea de puntos) y los valores de la parte real de la energía de la resonancia E_r para $\lambda = 2.0, 2.1$ (línea de trazos y de trazos-puntos respectivamente). Los valores de energía de la resonancia se obtuvieron con el método de escaleo complejo descrito en la sección 5.1.3.

Los elementos de base que utilizaremos son,

$$\chi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{(n+1)(n+2)}} r e^{-r/2} L_n^{(2)}(r), \quad (5.9)$$

en donde $L_n^{(2)}$ son polinomios asociados de Laguerre de grado n . Las funciones (5.9) están ortonormalizadas. Los elementos de matriz para el potencial exponencial $e^{-\beta r}$ en esta base pueden encontrarse en el apéndice C. Las funciones de la Ec. (5.9) no incluyen la dependencia angular (armónicos esféricos), porque son una base para la ecuación radial reducida del Hamiltoniano. Solo daremos ejemplos con ondas S ($l \equiv 0$) para estudiar la estabilidad del estado fundamental únicamente.

La Figura 5.2 muestra el espectro variacional de Rayleigh-Ritz para un tamaño de base de 70 funciones. Lo que se muestra son los autovalores de la matriz del Hamiltoniano como función del parámetro λ . Claramente la energía es creciente con λ , por que es el acople del término definido positivo $e^{-\beta r}$. Las energías mayores que cero aproximan el continuo de ondas planas modificadas por el potencial. Alrededor de $\lambda \lesssim 1.95$ el sistema tiene un estado ligado por debajo de la energía de umbral. Si $\lambda > 1.95$ la energía del estado ligado parece meterse en el continuo y seguir por arriba de cero. El efecto en el espectro es que aparece una serie de *cruces evitados* (o *avoided crossings*) entre los autovalores que simulan la continuidad de la curva de energía por arriba de cero. Los cruces evitados son los puntos en la Figura 5.2 donde dos energías parecen cruzarse, pero cuando están muy cercanas se *esquivan*, como muestra el detalle de la figura.

La Figura 5.2 muestra indicios de la existencia de una resonancia que pueden utilizarse para cuantificar la energía de la misma. Cederbaum [70], propuso obtener la energía de una resonancia en los λ en que dos energías del espectro muestran un avoided crossing. El esquema utilizado aquí es diferente del ejemplificado en [70] en donde el potencial se encerró dentro de una caja esférica y los cruces evitados ocurren al cambiar el tamaño R de la caja. El procedimiento, sin embargo, es aplicable aquí en los λ 's que presentan cruces evitados. Se define entonces

$$\lambda_{av} \equiv \min_{\lambda} (\Delta E_n), \quad (5.10)$$

en donde $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$. En estos valores específicos de λ la energía de la resonancia esta dada por [70]

$$E_r = \frac{E_{n+1} + E_n}{2} \quad (5.11)$$

$$\Gamma = \frac{1}{2} \pi \rho(E) (\Delta E)^2 \quad (5.12)$$

La Ec. (5.12) se deduce fácilmente de la regla de oro de Fermi, donde los niveles interactuantes son E_n y E_{n+1} . Uno de ellos representa un estado del continuo, mientras que el otro uno metaestable que se deslocaliza en un tiempo $\tau = 1/\Gamma$. El valor de ΔE es idéntico (en un problema de dos niveles) a la interacción entre dos estados debido a un Hamiltoniano de interacción. La densidad de estados en la Ec. (5.12) corresponde al sistema

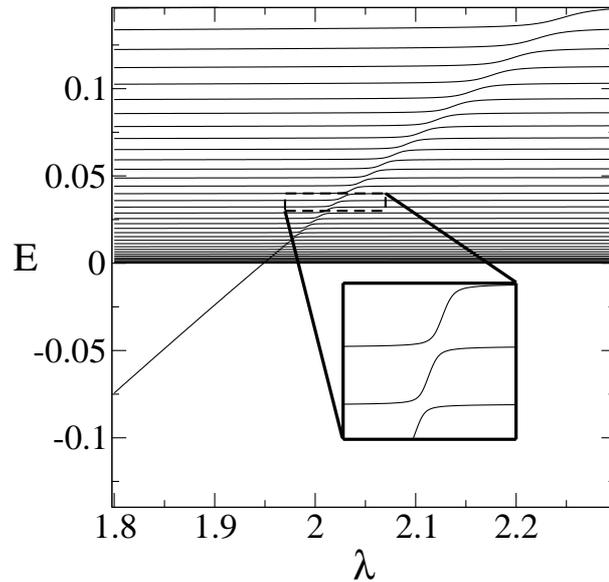


Figura 5.2: Espectro de energías obtenido con el método de Rayleigh y Ritz para un sistema de una partícula descrito por el Hamiltoniano de la Ec. (5.8). El tamaño de la base es $N = 70$ y los parámetros elegidos para el potencial son $V_0 = 5$ y $\beta = 0.5$. El detalle muestra como en algunos valores de λ los niveles se esquivan y muestran cruces evitados (avoided crossings).

sin resonancias, es decir debemos aproximar la densidad subyacente que corresponde al continuo. En [70] se utilizó como densidad $\rho(E) = \frac{2}{E_{n+2} - E_{n-1}}$, que es un valor bastante crudo. En La Tabla 5.1 muestra los valores de la resonancia obtenidos con este método y con el de escaleo complejo (explicado en la sección 5.1.3).

Los valores en la Tabla 5.1 revelan alguna información sobre los dos métodos. El método de la densidad de estados definido por la ecuación (5.12) da mejores resultados mientras menor es el ancho de la resonancia, como se observa comparando el valor dado por la Ec. (5.12) con el correspondiente a $\theta = \pi/10$ con escaleo complejo. El origen de esto es que en el límite $\Delta E \rightarrow 0$ la resonancia nace del umbral y tiene por lo tanto $\Gamma \equiv 0$. El método de escaleo complejo, que analizaremos en detalle en la sección 5.1.3, muestra una mejor convergencia si la resonancia es más ancha.

5.1.3. Escaleo complejo

Como comprobamos en la sección anterior existen métodos que permiten obtener la energía de una resonancia a partir del espectro variacional de Rayleigh-Ritz. Sin embargo, el método variacional fue concebido para aproximar funciones normalizables y determinar el espectro discreto de un operador Hermitiano. En principio, la solución a la Ec. (5.4) no puede encontrarse por estos métodos.

En esta sección estudiaremos el método de escaleo complejo (complex scaling o rota-

Cuadro 5.1: Energías de la resonancia.

λ	E_r (5.11)	$\Gamma/2$ (5.12)	θ	E_r (esc. complejo)	$\Gamma/2$
2.002			$\pi/200$	0.026	-0.00047
2.002			$\pi/100$	0.0257	-0.00067
2.002			$\pi/40$	0.02569511	-0.000518
2.002			$\pi/30$	0.02569515	-0.0005177
2.002			$\pi/20$	0.025695157	-0.0005176859
2.002	0.02568	-0.00042	$\pi/10$	0.025695157	-0.00051768577
1.95348			$\pi/40$	0.0022745	-8.8×10^{-5}
1.95348			$\pi/30$	0.0022768	-7.73×10^{-5}
1.95348			$\pi/20$	0.0022779	-7.288×10^{-5}
1.95348	0.002287	-6.396×10^{-5}	$\pi/10$	0.0022781961	-7.2289×10^{-5}

tion), que permite analizar las resonancias como estados normalizables de un operador no-Hermitiano. La mayor parte de lo que explicaremos fue extraído de [71]. El método consiste en aplicar una transformación de *similaridad*, mediante la cual las autofunciones correspondientes a las resonancias se convierten en funciones \mathcal{L}^2 . Es decir, transformamos la Ec. (5.4) con $\hat{\mathcal{S}}$

$$\hat{\mathcal{S}}\hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{S}}^{-1}\hat{\mathcal{S}}\phi_n^{res} = \left(E_r - i\frac{\Gamma}{2}\right)\hat{\mathcal{S}}\phi_n^{res} \quad (5.13)$$

en donde la transformación $\hat{\mathcal{S}}$ es tal que

$$\hat{\mathcal{S}}\phi_n^{res} \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad r \rightarrow \infty. \quad (5.14)$$

Ligeramente hablando, $\hat{\mathcal{S}}\phi_n^{res}$ pertenece a un espacio de Hilbert. Las transformaciones de similaridad $\hat{\mathcal{S}}$ no son únicas, muchas cumplen con la Ec. (5.14) y pueden ser elegidas de acuerdo a las necesidades del problema [72, 71].

El operador de similaridad utilizado en escaleo clásico esta dado por,

$$\hat{\mathcal{S}} = e^{\gamma r \frac{\partial}{\partial r}}, \quad (5.15)$$

y la acción sobre una función analítica $f(r)$ es

$$\hat{\mathcal{S}}f(r) = f(re^\gamma). \quad (5.16)$$

La acción del operador es *reescalar* las distancias en funciones analíticas y en el Hamiltoniano. El operador utilizado en escaleo complejo es *exactamente igual*, solo que *después* de aplicar la transformación, prolongamos el parámetro γ al plano complejo $\gamma \rightarrow i\theta$, con $\theta > 0; \theta \in \mathbb{R}$. Muchas veces se pasa por alto que primero debe aplicarse la transformación de similaridad con parámetros reales y luego hacer la prolongación analítica. Normalmente se escribe

$$\hat{\mathcal{S}} = e^{i\theta r \frac{\partial}{\partial r}}, \quad (5.17)$$

$$\hat{\mathcal{S}}f(r) = f(re^{i\theta}). \quad (5.18)$$

En muchos casos esto puede hacerse sin mayores complicaciones, aunque es bueno tener presente los pasos matemáticamente correctos para llegar a ello, y evitar futuras complicaciones. La transformación definida en la Ec. (5.17) *no es unitaria* y en particular modifica el espectro del Hamiltoniano. Es más, las modificaciones que ocurren en el espectro en realidad favorecen a nuestros objetivos.

La función correspondiente a una resonancia de una partícula tiene la forma asintótica $\phi^{res}(r \rightarrow \infty) = B(k_n)e^{i k_n r}$. Escribiremos el vector de onda como $k_n = |k_n|e^{-i\varphi_n}$. Aplicando la transformación \hat{S} a esta función se obtiene

$$\hat{S}\phi^{res}(r \rightarrow \infty) = B(k_n)e^{i|k_n|\exp(i(\theta-\varphi_n))r} \quad (5.19)$$

$$= B(k_n)e^{i\alpha_n r} e^{-\beta_n r} \quad (5.20)$$

en donde

$$\alpha_n = a_n(\cos \theta - \tan \varphi_n \sin \theta), \quad (5.21)$$

$$\beta_n = a_n(\sin \theta - \tan \varphi_n \cos \theta), \quad (5.22)$$

$$a_n = \frac{(2\mu)^{1/2}}{\hbar} \left(E_r^2 + \left(\frac{\Gamma_n}{2} \right)^2 \right)^{1/4} \cos \varphi_n \quad (5.23)$$

$$\varphi_n = \arctan \left(\frac{\Gamma}{2 E_r} \right). \quad (5.24)$$

Si $\theta = 0$ observamos en la Ec. (5.22) que $\beta_n = -a_n \frac{\Gamma}{2 E_r} > 0$. Aumentando el valor de θ existe un valor a partir del cual β_n es positivo. En ese caso de la Ec. (5.20), $\hat{S}\phi^{res}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ exponencialmente. El valor crítico θ_c a partir del cual se normaliza la función de la resonancia es

$$\theta_c \equiv \varphi_n = \arctan \frac{\Gamma}{2 E_r} \quad (5.25)$$

De este modo, el escaleo complejo logra que la función correspondiente a una resonancia sea \mathcal{L}^2 .

La acción de la transformación sobre el espectro del Hamiltoniano puede explicarse cualitativamente observando su efecto sobre un Hamiltoniano de una partícula con simetría radial $\mathcal{H} = -\frac{\nabla^2}{2} + V(r)$,

$$\hat{S}\hat{\mathcal{H}} \equiv \mathcal{H}_\theta = -e^{-i2\theta} \frac{\nabla^2}{2} + V_\theta(r) \quad (5.26)$$

en donde $V_\theta \equiv V(re^{-i\theta})$. El potencial debe ser de *dilatación analítico*, es decir que al aplicar el escaleo no aparecen polos o regiones de no-analiticidad que impidan tratar el problema ¹. Si el potencial es homogéneo de grado ν , como el Coulombiano ($\nu = -1$), el potencial escaleado tiene la forma $V_\theta \equiv e^{i\theta\nu} V(r)$. En este caso los cálculos se simplifican considerablemente ya que podemos obtener los elementos de matriz de \mathcal{H}_θ a partir de los de \mathcal{H} multiplicando por los factores complejos.

¹Un ejemplo conocido es $V(r) = \frac{\sin(kr)}{r}$, que no es analítico en r . Este potencial es conocido como Wigner-Von Neumann y se destaca por poseer un *estado ligado embebido en el continuo*

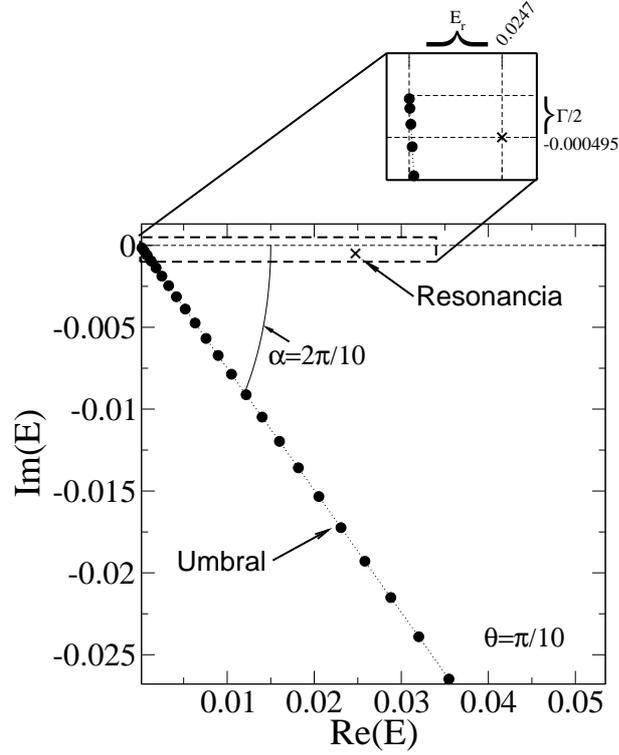


Figura 5.3: El espectro de energías obtenido con el método de Rayleigh-Ritz para el Hamiltoniano reescalado \mathcal{H}_θ (Ec. (5.26)). La figura muestra los cálculos con el potencial de la Ec. (5.8) y $V_0 = 5.0$, $\beta = 0.5$ y $\lambda = 2.0$. El ángulo utilizado para la rotación compleja es $\theta = \pi/10$. El efecto del escaleo complejo sobre el umbral es una rotación en un ángulo $\alpha \approx 2\theta$, de allí el nombre rotación que comúnmente se le da al método. El detalle muestra la resonancia descubierta al rotar el umbral, junto con los valores de E_r y $\Gamma/2$.

La Figura 5.3 muestra el espectro de \mathcal{H}_θ (con \mathcal{H} de la Ec. (5.8)) obtenido con un método variacional utilizando la base de la Ec. (5.9). La modificaciones realizadas al método de Rayleigh-Ritz para aplicarlo al Hamiltoniano escaleado solo se deben a las propiedades de la matriz en la base utilizada. Si la base es real, puede verse que la matriz correspondiente a \mathcal{H}_θ es *simétrica* [71], es decir $H_{nm}(\theta) = H_{mn}(\theta)^2$. Para trabajar con matrices simétricas deben utilizarse algoritmos adecuados, además deben modificarse los programas para permitir trabajar con álgebra compleja.

En la Figura 5.3 se observa que el umbral del continuo es *rotado* en un ángulo aproximadamente igual a 2θ . Esto tiene su origen en la dependencia con θ de la energía cinética

²No entraremos aquí en detalle sobre las propiedades de las matrices simétricas. Sin embargo, en el próximo capítulo haremos uso de algunos resultados sobre sus autovectores, para definir un *producto interno* alternativo para los Hamiltonianos simétricos. Debido a esto el apéndice F discute algunas de dichas propiedades

en la Ec. (5.26). El factor multiplicativo $e^{-i2\theta}$ es lo que hace rotar el valor de todos los autovalores variacionales en ese ángulo. Esta relación también impone un límite superior para el valor de θ , ya que no puede ser mayor que π . Los problemas numéricos comienzan a notarse mucho antes de ese valor, en general para $2\theta = \pi/2$ el espectro de \mathcal{H}_θ deja de representar a \mathcal{H} . Recordemos que la transformación $\hat{\mathcal{S}}$ no es unitaria y modifica el espectro del operador. El teorema de Baslev-Combes [73] asegura que los estados ligados mantienen su energía real luego de aplicar la transformación $\hat{\mathcal{S}}$, siempre que el parámetro θ sea menor que un valor máximo θ_{max} , que depende del potencial. En algunos casos particulares puede encontrarse analíticamente el valor de este ángulo, en la práctica basta con analizar las energías de los estados ligados y observar que la parte imaginaria se anule (dentro del esquema numérico). El teorema asegura en realidad que el espectro discreto, estados ligados y resonancias, son independientes del parámetro θ para $\theta < \theta_{max}$.

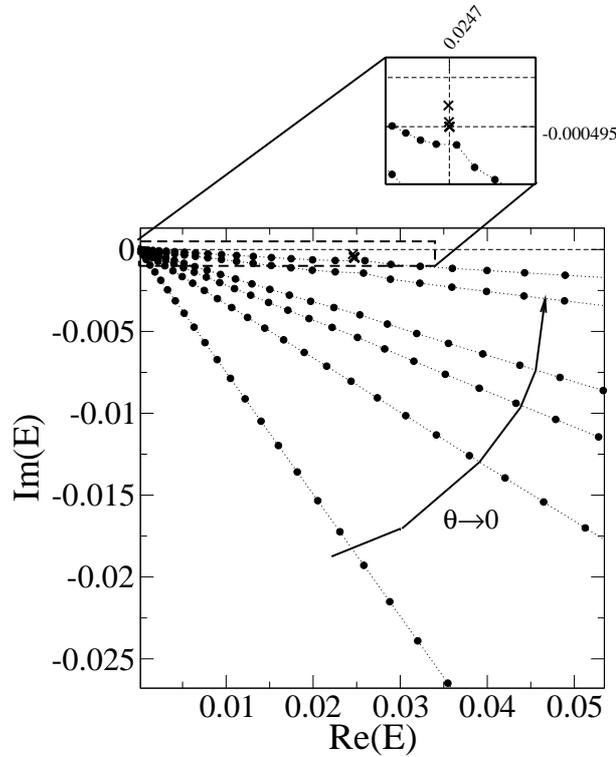


Figura 5.4: El espectro de energías obtenido con el método de Rayleigh-Ritz para el Hamiltoniano reescalado \mathcal{H}_θ (Ec. (5.26)). La figura muestra los cálculos para el potencial de la Ec. (5.8) y $V_0 = 5.0$, $\beta = 0.5$ y $\lambda = 2.0$ y los valores del parámetro $\theta = \pi/10, \pi/20, \pi/30, \pi/40, \pi/100, \pi/200$. Para ángulos cercanos a θ_c , definido en la Ec. (5.25), la resonancia es perturbada y depende de θ . Si θ es suficientemente grande el valor del polo se hace independiente del ángulo.

La independencia de la energía de la resonancia respecto de θ es también notable en la práctica. La Figura 5.4 muestra como el umbral del continuo cambia su ángulo,

mientras que la resonancia es invariante ante los cambios en θ . El ángulo mínimo para que la resonancia se *estabilice* es mayor que el mostrado en la Ec. (5.25). Si estamos muy cerca de θ_c el umbral perturba el valor de la resonancia y se ve desplazada. Por ejemplo, si $\theta = \pi/200$ la resonancia es la cruz que se ve separada respecto de las otras.

En casos en que un operador posea varios umbrales (ej. el H^- tiene uno por cada estado ligado del H), todos los umbrales rotan con la transformación. Supongamos que en ese caso existe una resonancia entre dos umbrales. El primer umbral deja al descubierto la resonancia cuando θ supera θ_c , pero la resonancia puede ser nuevamente cubierta por la rama del segundo umbral si el ángulo es lo suficientemente grande.

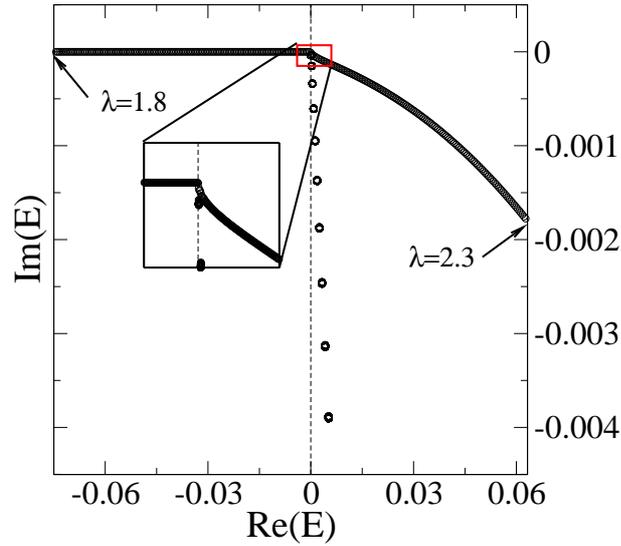


Figura 5.5: El espectro de energías obtenido con el método de Rayleigh-Ritz para el Hamiltoniano rescaleado \mathcal{H}_θ (Ec. (5.26)). La figura muestra los cálculos con los mismos parámetros V_0 y β de la Figura 5.3. El parámetro λ corre de 1.8 a 2.3 al igual que en la Figura 5.2.

La Figura 5.5 muestra el espectro variacional de \mathcal{H}_θ , con los mismos parámetros V_0 y β de la Figura 5.3 pero variando el parámetro λ . El gráfico es equivalente al mostrado en la Figura 5.2 con el Hamiltoniano \mathcal{H} no rotado, solo que λ parametriza los valores de E_r y $\Gamma/2$. La curva descrita por la resonancia en el plano complejo es a veces llamada la *cuerda de la resonancia* [74]. En el detalle se observa que la cuerda de la resonancia se separa en forma *abrupta* del eje imaginario. Esto no es así para todas las resonancias, de hecho en el capítulo 5 notaremos que Γ crece suavemente cuando la energía cruza el umbral. Con el fin de comparar el espectro real del Hamiltoniano \mathcal{H} con el del operador rotado \mathcal{H}_θ , puede graficarse la parte real de la resonancia conjuntamente con el espectro variacional de \mathcal{H} (ver Figura 5.6). La parte real de la resonancia se obtiene e los autovalores de \mathcal{H}_θ eligiendo aquel que no varía con θ .

El detalle muestra claramente como la resonancia atraviesa los niveles variacionales

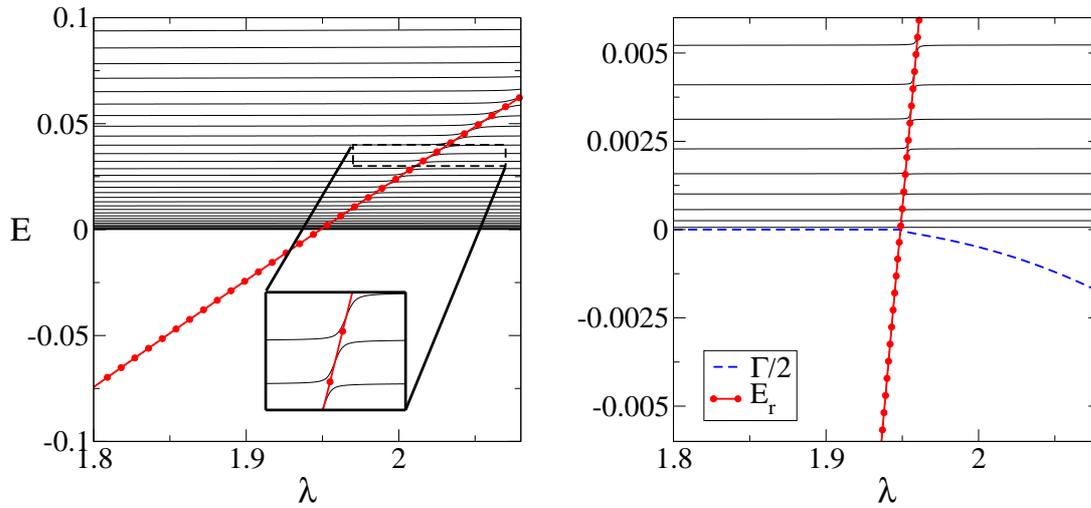


Figura 5.6: El espectro de energías obtenido con el método de Rayleigh y Ritz para el Hamiltoniano \mathcal{H} de la Ec. (5.8) y las partes real (línea roja con puntos) e imaginaria (línea de trazos azules) del autovalor de \mathcal{H}_θ correspondiente a la resonancia. El gráfico muestra los cálculos con los mismos parámetros V_0 y β de la Figura 5.3. El detalle muestra que la parte real de la energía de la resonancia cruza las energías variacionales en un punto entre dos cruces evitados.

y en los cruces evitados toma el valor aproximado $E_r = \frac{E_{n+1} + E_n}{2}$ dado en la Ec. (5.11). Nótese que la energía de la resonancia es *exactamente* igual a cada uno de los autovalores del espectro real en un valor específico de λ que se encuentra entre dos cruces evitados. Esto nos impulsa a investigar que tal vez se pueda desarrollar algún método que pueda indicar cuál ese valor de λ . En las próximas secciones se mostrará que esto no solo es posible, sino que se obtienen muy buenos resultados inclusive en un sistema de dos electrones.

5.2. Entrelazamiento y puntos cuánticos

En los últimos años la aplicación de algunos conceptos de información cuántica a problemas antiguos llevó a una mejor comprensión de ellos [75] y, como consecuencia, a la formulación de nuevos métodos para buscar sus soluciones. La información contenida en un estado cuántico se puede calcular utilizando distintas cantidades como por ejemplo el entrelazamiento de formación [76], la fidelidad [77], varios tipos de entropías y testigos de entrelazamiento. El problema a tratar determina cuál de todas las cantidades es la más adecuada, o accesible, para el cálculo.

La entropía de Von Neumann es una cantidad natural para calcular el entrelazamiento en sistemas atómicos de pocos cuerpos con grados de libertad continuos. Algunos problemas que han sido estudiados incluyen átomos tipo Helio [39, 63], generación de entrelazamiento a través de una dispersión [78] y entrelazamiento en el átomo de Hooke de dos electrones [79].

Los puntos cuánticos son estructuras confeccionadas con materiales semiconductores en las que se puede confinar un número pequeño de electrones dentro de una reducida región espacial [80]. Son también llamados átomos artificiales debido a las similitudes de la estructura electrónica con la de átomos naturales. La mayoría de los estudios realizados en puntos cuánticos utilizan la aproximación de masa efectiva que consiste en localizar electrones dentro de un potencial, el que a su vez se encuentra dentro de un potencial armónico. Las geometrías y dimensiones de los modelos pueden ser muy variadas [81]. Los electrones interactúan entre ellos a través de un potencial Coulombiano. La aproximación de masa efectiva asume que las interacciones entre bandas de un cristal son despreciables y el efecto del potencial periódico del cristal es la reducción de la masa de los electrones. Una diferencia fundamental de los puntos cuánticos respecto de los átomos, es que en los primeros se puede sintonizar las propiedades del confinamiento. Los métodos desarrollados en esta Tesis pueden entonces ser utilizados para investigar las propiedades de los sistemas de dos electrones en puntos cuánticos, en la aproximación de masa efectiva. Los estudios no solo se limitan a estados ligados, sino que también se han analizado resonancias de dos electrones en puntos cuánticos [82, 38].

Los puntos cuánticos también han sido objeto de estudios en información cuántica. La mayoría están apuntados a calcular la cantidad de entrelazamiento de los autoestados [83, 84] o la controlabilidad del sistema [85]. El objetivo de estos dos enfoques es el mismo: lograr utilizar un punto cuántico como un qubit. [86]. Además de las investigaciones sobre información cuántica, hay propuestas de utilizar los puntos cuánticos como fotodetectores [87]. La propuesta se basa en utilizar resonancias debido a las propiedades intrínsecas de estas, como una gran sección eficaz de dispersión.

Recientemente en este grupo de investigación [38] se realizó un estudio sobre el comportamiento de la entropía de Von Neumann de estados \mathcal{L}^2 asociados con resonancias en puntos cuánticos de 2 electrones. Las resonancias estudiadas allí fueron resonancias de forma, como las mostradas en la sección 5.1. Estas ocurren cuando la energía de un estado ligado cruza el umbral de energía al sintonizar un parámetro λ del Hamiltoniano. Desde el punto de vista crítico, el comportamiento de la energía corresponde a un exponente

$\alpha = 1$. En [38] se mostró que la entropía de los estados variacionales provee un método para encontrar la parte real de la energía de la resonancia. El método, al igual que algunos de los que presentaremos aquí, solo provee la energía de la resonancia para ciertos puntos λ_i determinados *a posteriori*. Más allá de esto, Ferrón *et al* [38] conjeturaron que existe una función $S(E_r)$, la entropía de Von Neumann de la resonancia, cuyo valor está definido para toda energía de la resonancia. Aquí encontramos una posible definición de la función $S(E_r)$, utilizando los resultados del escaleo complejo aplicado a las resonancias en los puntos cuánticos de dos electrones.

5.3. Modelo para un Punto Cuántico

En los últimos años se han desarrollado muchos modelos de puntos cuánticos, los cuales incluyen diferentes tipos de simetrías e interacciones [38, 81, 82]. En este capítulo consideraremos un modelo esféricamente simétrico, con dos electrones interactuando a través del potencial Coulombiano. El potencial que simula el punto cuántico es uno de corto alcance, aunque la forma particular del mismo no debería afectar el comportamiento general del sistema. En el capítulo 2 se ha explicado en detalle los argumentos que sustentan este hecho. Se probó en algunos casos particulares que el alcance (y no la *forma*) de los potenciales involucrados en un sistema, determinan el comportamiento crítico cerca del umbral (exponentes críticos de la energía y otros observables). Para modelar el punto cuántico utilizamos un potencial en el que sea factible realizar un escaleo complejo. Teniendo en cuenta estas consideraciones propusimos el siguiente Hamiltoniano para el sistema

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}_2}^2 + V(r_1) + V(r_2) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}, \quad (5.27)$$

en donde $V(r) = -\frac{V_0}{r_0}\exp(-r/r_0)$, y \mathbf{r}_i es el operador posición del electrón $i = 1, 2$, $V_0 > 0$, y r_0 es el alcance del potencial del punto cuántico. El Hamiltoniano de la Ec. 5.27 expresado de una manera más compacta si se realiza el escaleo $r \rightarrow r/r_0$, y se utilizan unidades atómicas,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_2}^2 - V_0e^{-r_1} - V_0e^{-r_2} + \frac{\lambda}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}, \quad (5.28)$$

en donde $\lambda = r_0$. Para obtener la Ec. 5.28 también se realizó la transformación del Hamiltoniano $\mathcal{H} \rightarrow \frac{\mathcal{H}}{r_0^2}$.

El potencial exponencial tiene varias ventajas desde el punto de vista analítico. Es suave y las energías de las resonancias pueden calcularse mediante escaleo complejo. El potencial permite entonces obtener las energías de las resonancias de forma independiente al método que desarrollaremos aquí. La energía del umbral del Hamiltoniano Ec. (5.28), que denotaremos ε , es la energía del estado fundamental de una partícula en el potencial exponencial. Las energías de ondas S del potencial exponencial pueden ser calculadas en forma exacta [88] resolviendo la ecuación

$$J_{2\sqrt{2\varepsilon}}\left(\sqrt{2V_0}\right) = 0, \quad (5.29)$$

en donde $J_\nu(x)$ es la función de Bessel. Los valores críticos de V_0 son dados por los ceros de $J_0(x)$.

El espectro discreto y las resonancias del modelo correspondiente a la Ec. (5.28) pueden aproximarse utilizando funciones variacionales del tipo \mathcal{L}^2 [82], [89]. Si $|\psi_j(1, 2)\rangle$ son las autofunciones exactas, aquí las aproximaremos con

$$|\psi_j(1, 2)\rangle \simeq |\Psi_j(1, 2)\rangle = \sum_{i=1}^M c_i^{(j)} |\Phi_i\rangle, \quad c_i^{(j)} = (\mathbf{c}^{(j)})_i; \quad j = 1, \dots, M. \quad (5.30)$$

en donde $|\Phi_i\rangle$ son las funciones de una base \mathcal{L}^2 del espacio de Hilbert y M es la cantidad de elementos de la base que utilizamos en la expansión.

Para estudiar el comportamiento cerca del umbral de ionización del estado fundamental, utilizaremos como base los singletes de onda S dados por

$$|\Phi_i\rangle \equiv |n_1, n_2; l\rangle = (\phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2))_s \mathcal{Y}_{0,0}^l(\Omega_1, \Omega_2) \chi_s, \quad (5.31)$$

en donde $n_2 \leq n_1$, $l \leq n_2$, χ_s es el espinor singlete, y los $\mathcal{Y}_{0,0}^l(\Omega_1, \Omega_2)$ están dados por

$$\mathcal{Y}_{0,0}^l(\Omega_1, \Omega_2) = \frac{(-1)^l}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m=-l}^l (-1)^m Y_{lm}(\Omega_1) Y_{l-m}(\Omega_2), \quad (5.32)$$

es decir, son autofunciones del momento angular total con autovalor igual a cero. Las funciones $Y_{lm}(\Omega)$ son los armónicos esféricos. Notar que las $\mathcal{Y}_{0,0}^l(\Omega_1, \Omega_2)$ son funciones *reales*, porque son simétricas en el índice de las partículas. El término radial $(\phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2))_s$ también tiene la simetría apropiada para un estado singlete,

$$(\phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2))_s = \frac{\phi_{n_1}(r_1) \phi_{n_2}(r_2) + \phi_{n_1}(r_2) \phi_{n_2}(r_1)}{[2(1 + \langle n_1 | n_2 \rangle^2)]^{1/2}} \quad (5.33)$$

en donde

$$\langle n_1 | n_2 \rangle = \int_0^\infty r^2 \phi_{n_1}(r) \phi_{n_2}(r) dr, \quad (5.34)$$

y los ϕ_n fueron elegidos de forma tal que satisfagan $\langle n | n \rangle = 1$. Los resultados numéricos de este capítulo fueron obtenidos utilizando orbitales de tipo Slater

$$\phi_n^{(\alpha)}(r) = \left[\frac{\alpha^{2n+3}}{(2n+2)!} \right]^{1/2} r^n e^{-\alpha r/2}. \quad (5.35)$$

en donde α es un parámetro no lineal de la base. En términos de las funciones definidas en la Ec. (5.31), las autofunciones variacionales pueden expresarse como

$$|\Psi_i^{(\alpha)}(1, 2)\rangle = \sum_{n_1 n_2 l} c_{n_1 n_2 l}^{(i), (\alpha)} |n_1, n_2; l; \alpha\rangle, \quad (5.36)$$

en donde $n_1 \geq n_2 \geq l \geq 0$, entonces el tamaño de la base es

$$M = \sum_{n_1=0}^N \sum_{n_2=0}^{n_1} \sum_{l=0}^{n_2} 1 = \frac{1}{6}(N+1)(N+2)(N+3). \quad (5.37)$$

La Ec. (5.36) muestra α como un índice de la base para indicar que la autofunción variacional es α -dependiente. Los elementos de matriz de la energía cinética, la repulsión Coulombiana entre los electrones y otro detalles matemáticos de las funciones $|n_1, n_2; l; \alpha\rangle$ están en el apéndice D y alternativamente en [90], [91].

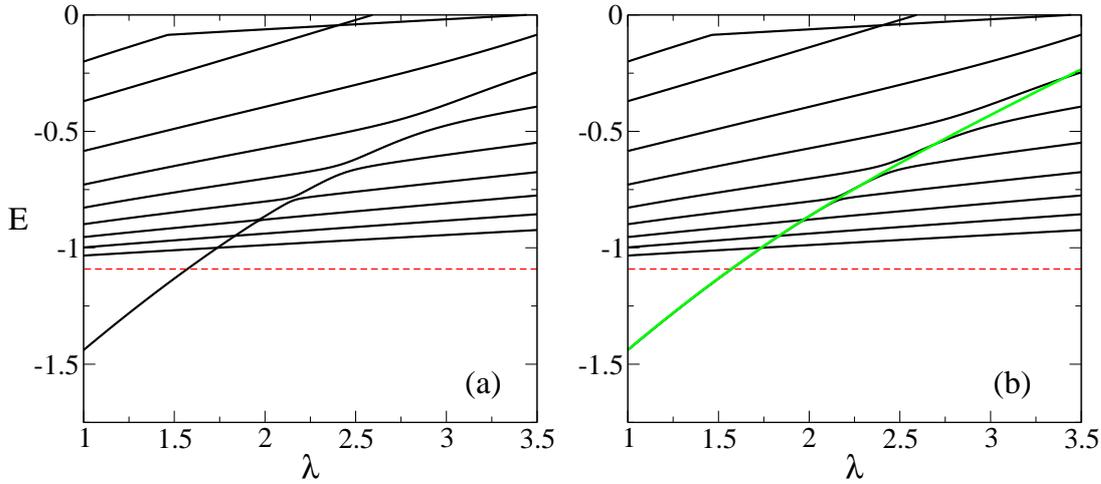


Figura 5.7: (a) La figura muestra el comportamiento de los autovalores variacionales $E_j^{(\alpha)}(\lambda)$ (líneas negras) para $N = 14$ y un valor $\alpha = 2$ del parámetro no lineal. La línea de trazos roja corresponde al umbral de energía $\varepsilon \simeq -1.091$. Notar que los avoided crossings (o cruces evitados) entre los niveles variacionales prácticamente no se ven cerca del umbral. (b) La figura muestra los mismos niveles variacionales que en (a) (líneas negras) y la energía calculada utilizando escaleo complejo (línea verde) para un valor del parámetro de $\phi = \pi/10$.

Las propiedades del espectro variacional y la relación con la energía de resonancias fueron explicadas en detalle en la sección 5.1. Resumimos aquí las principales características. Los estados de resonancia tienen autovalores complejos aislados $E_{res} = E_r - i\Gamma/2$, con $\Gamma > 0$. Las autofunciones correspondientes no son de cuadrado integrable y son considerados estados cuasi-ligados de energía E_r y tiempo de vida media Γ . Las energías de las resonancias del Hamiltoniano de la Ec. (5.28) pertenecen al intervalo $(\varepsilon, 0)$ [92], en donde ε es la energía del estado fundamental del Hamiltoniano de 1 partícula. Los estados pueden analizarse utilizando el espectro obtenido con una base de funciones \mathcal{L}^2 (ver [38] y referencias allí citadas). Los niveles con energía mayor que la de umbral tienen varios cruces evitados o *avoided crossings* que “rodean” la parte real de la energía de la resonancia. La presencia de una resonancia se hace evidente solamente mirando a los autovalores

obtenidos en forma numérica. La Figura 5.7 muestra un espectro típico obtenido con el método variacional, en donde se observa el comportamiento de autovalores variacionales $E_j^{(\alpha)}$ en función del parámetro λ . Los resultados se obtuvieron con una base de tamaño $N = 14$ y parámetro $\alpha = 2.0$. El valor de α se escogió de forma tal que la energía del estado ligado, en las regiones de λ donde existe, sea estable ante los cambios de este parámetro no lineal. En la figura se observa que para $\lambda < \lambda_{th} \simeq 1.54$ solo hay un estado ligado. Arriba del umbral la aproximación variacional provee un número finito de soluciones con energía menor que cero. En esta región de energías no existe un criterio *a priori* de estimar cuál valor de α es mejor que otro. De todas formas, es posible obtener la energía de la resonancia $E_r(\lambda)$ calculando $E_j^{(\alpha)}$ con muchos valores del parámetro variacional (ver Kar y Ho [93]).

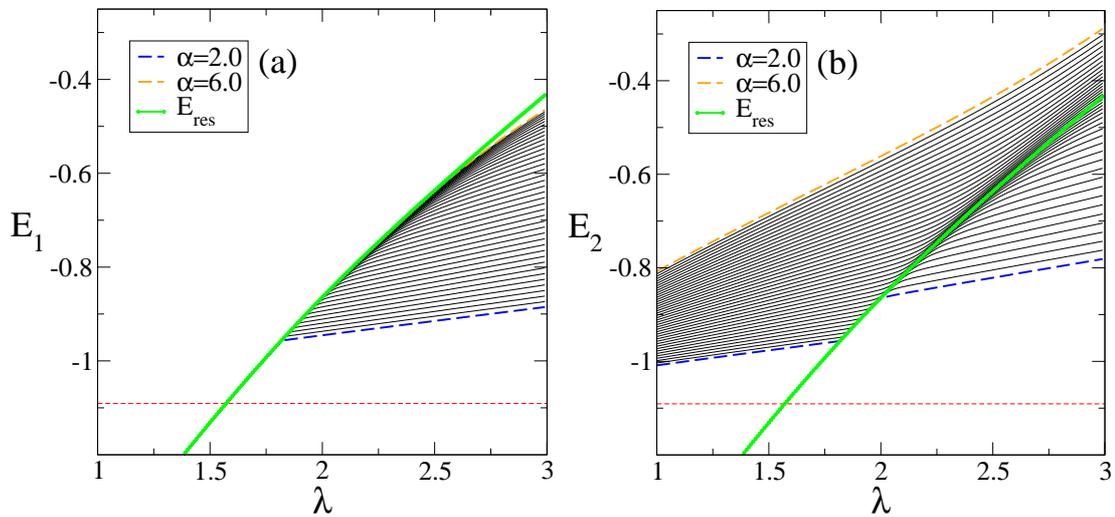


Figura 5.8: (a) Energía del primer estado variacional vs λ , para diferentes valores del parámetro variacional α . De abajo hacia arriba α aumenta desde $\alpha = 2$ (línea de trazos azul) a $\alpha = 6$ (línea de trazos naranja). También se muestra la parte real de la energía de resonancia (línea verde). (b) Lo mismo que en (a) pero para la energía del segundo estado. calculada utilizando escaleo complejo

Las Figuras 5.8 (a) y (b) muestran los resultados numéricos obtenidos para el primer y segundo autovalor respectivamente, con diferentes valores del parámetro variacional α . También se muestra la energía del estado fundamental (por debajo del umbral) y la parte real de la energía de la resonancia calculada utilizando escaleo complejo (por arriba del umbral), esta curva será utilizada como referencia. El comportamiento del menor autovalor variacional $E_1^{(\alpha)}(\lambda)$ es bastante claro. Debajo del umbral $E_1^{(\alpha)}(\lambda)$ es insensible a los cambios en α , las diferencias entre $E_1^{(\alpha=2)}(\lambda)$ y $E_1^{(\alpha=6)}(\lambda)$ son indistinguibles en la escala de la figura. Arriba del umbral el comportamiento es diferente, una curva con α fijo tiene dos regiones bien definidas separadas por un cambio abrupto en la tangente de la curva. El cambio abrupto ocurre en valores alrededor de $E_r(\lambda)$.

El segundo nivel de energía $E_2^{(\alpha)}(\lambda)$, muestra tres regiones. Cada región esta separada por un cambio abrupto en la derivada de la energía, y $E_2^{(\alpha)}(\lambda)$ es aproximadamente una línea recta con pendiente diferente en cada región. Observando la Figura 5.8 (b), puede notarse que para un valor de λ fijo la densidad de niveles por unidad de energía no es uniforme. La comparación es válida teniendo en cuenta que las curvas $E_j^{(\alpha_i)}(\lambda)$ fueron graficadas con valores de α_i equiespaciados entre 2 y 6. Esto hecho fue notado con anterioridad por otros autores pero fue Mandelshtam *et. al.* en 1993 [94] los que lograron plasmar esto en una expresión para la densidad de estados. El mecanismo por el cual se puede obtener la densidad de estados lo desarrollaremos en la siguiente sección.

5.4. Densidad de Estados en un entorno de una resonancia

Introduciremos la idea de estabilización a través de un problema de una partícula para simplificar la explicación. Nuestro problema consiste entonces en un potencial de una partícula que tiene una resonancia. El potencial consiste en un pozo con profundidad V_0 (debajo del cero de energía) en el origen y una barrera de alto λ ubicada a una distancia R_0 del origen, como el ejemplo de la Ec. (5.8)

Para estudiar el sistema se utilizan N autofunciones de onda plana, correspondientes a una caja esférica de radio R ,

$$\phi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) \quad r \leq R. \quad (5.38)$$

Las condiciones de contorno en la caja requieren que más allá de R la función se anule. Si se grafica la energía de N de estas funciones en función del tamaño de la caja R , se observa que las energías son monótonamente decrecientes con R . Es más, estas se adensan en el cero de energía porque es un punto de acumulación para $R \rightarrow \infty$.

El mismo procedimiento de aumentar el radio de la caja puede hacerse con un potencial con pozo y barrera dentro de ella. Utilizando la matriz correspondiente al Hamiltoniano de 1 partícula en la base de ondas planas, puede obtenerse un espectro variacional. La Figura 5.9 muestra un gráfico de estabilización típico (un ejemplo publicado se encuentra en [70]). La energía correspondiente a cada estado es decreciente con R , pero no monótonamente. Existe una región de energía estable en la cual cambia muy lentamente con R . Ese valor de energía es la de la resonancia. La estabilización ocurre debido a que la resonancia es un estado más localizado que las ondas planas, aproximadamente de tamaño R_0 . Si $R \gg R_0$ la resonancia prácticamente no es afectada por la presencia de la caja y su energía es *estable* con R .

En el problema de dos electrones en punto cuántico ocurre algo similar, aunque de manera mas sutil. El parámetro α es la inversa de la longitud característica de la base Ec. (5.35), y por lo tanto cumple el rol del tamaño R . Las funciones radiales tienen su máximo en $r_0 = \frac{2n}{\alpha}$, de modo que una base con $\alpha = 0.1 \Rightarrow r_0 = 20n$, la aproximación de

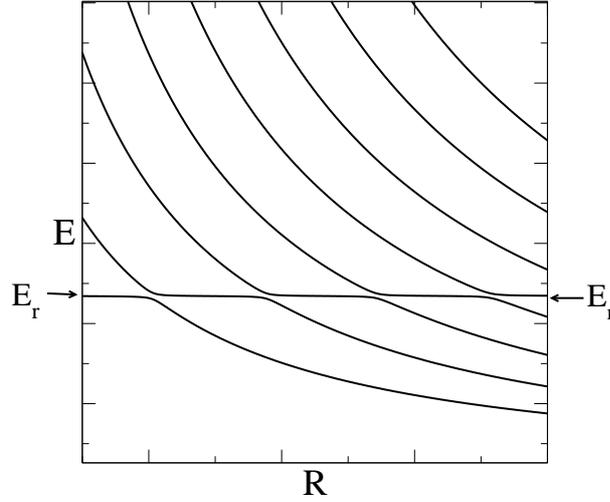


Figura 5.9: Diagrama de estabilización típico para un potencial dentro de una caja de tamaño R con una resonancia alrededor de la energía marcada con las flechas.

estados localizados en un radio $r < 20$, no es muy buena en esta base. La única función con derivada no nula en el origen es la correspondiente a $n = 1$, el máximo de ésta es entonces muy relevante para obtener una buena aproximación.

El problema que analizamos tiene dos escalas, la localizada correspondiente a la resonancia y los estados ligados, y la escala de los estados del continuo. De esta forma, se define una densidad de estados bipartita

$$\rho_R(E) = \rho_R^Q(E) + \rho_R^P(E) \quad (5.39)$$

en donde los superíndices Q y P indican las regiones localizada y extendida respectivamente.

La densidad de estados presenta un pico Lorentziano en las cercanías de una resonancia,

$$\rho_R^Q \cong \frac{A}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E_r - E)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (5.40)$$

La forma funcional puede obtenerse a partir del análisis de ρ en los alrededores de un polo de la matriz de dispersión, una breve explicación sin muchos detalles se encuentra en [71] pág. 220. Por completitud también incluimos la misma en el apéndice G.

La densidad de estados de un sistema dentro de una caja de tamaño R puede escribirse como

$$\rho_R(E) = \sum_j \delta(E_j^{(R)} - E) \quad (5.41)$$

Esta es la densidad *exacta*, ya que la presencia de la caja discretiza el espectro. La fórmula no es útil para trabajar, porque no es una función, sino una densidad (en el sentido matemático de la palabra) y es más compleja de manejar. De acuerdo con lo

explicado, si $R \gg Q$ (región localizada) entonces $\rho_R^Q(E)$ no cambia mucho si variamos R . Siguiendo lo desarrollado en la referencia [94],

$$\langle \rho_R(E) \rangle \cong \frac{1}{\Delta R} \int_{R-\frac{\Delta R}{2}}^{R+\frac{\Delta R}{2}} \rho_R(E) dR \quad (5.42)$$

y utilizando que³ $\int \delta(f - f(x))dx = \left| \frac{df}{dx} \right|_{f(x)=f}^{-1}$, se obtiene

$$\langle \rho_R(E) \rangle = \frac{1}{\Delta R} \sum_j \left| \frac{dE_j^{(R')}}{dR'} \right|_{E_j^{(R')}=E}^{-1} \quad (5.43)$$

en donde la suma corresponde a las $E_j^{(R')}$ que intersectan a la energía E en el intervalo ΔR centrado en R ,

$$E_j^{(R')} = E; R' \in \left(R - \frac{\Delta R}{2}, R + \frac{\Delta R}{2} \right) \quad (5.44)$$

El parámetro R es equivalente a α en el sentido que modifica el alcance de las funciones base y representa una pared *suave*. Un desarrollo más completo en esta relación puede verse en [93], aunque el único punto clave es que la resonancia sea estable respecto del parámetro de integración. La aproximación que se realiza para la densidad es

$$\rho^Q(E) \cong \langle \rho_\alpha(E) \rangle \quad (5.45)$$

El método propuesto en [93], utilizado con éxito en varios sistemas atómicos y moleculares, propone calcular la densidad en un entorno de la resonancia calculando la derivada de alguna de las $E_j^{(\alpha)}$ en la Ec. 5.43 y ajustar la Lorentziana a esta curva. La aproximación para la densidad de estados es entonces

$$\langle \rho_\alpha^Q(E) \rangle = \left| \frac{\partial E_j^{(\alpha)}}{\partial \alpha} \right|^{-1} \quad (5.46)$$

En el problema numérico, se calcula la Ec. 5.46 en la forma

$$\rho(E_j^{(\alpha_i)}(\lambda)) = \left| \frac{E_j^{(\alpha_{i+1})}(\lambda) - E_j^{(\alpha_{i-1})}(\lambda)}{\alpha_{i+1} - \alpha_{i-1}} \right|^{-1}. \quad (5.47)$$

La Figura 5.10 muestra un comportamiento típico de $\rho_j(E) \equiv \rho(E_j^{(\alpha_i)}(\lambda))$ con varias autoenergías j y $\lambda = 2.25$. Las partes real $E_r(\lambda)$ e imaginaria Γ de la energía de la resonancia pueden obtenerse haciendo un ajuste no lineal con la función de la Ec. 5.40. Este método permite obtener en forma alternativa al escaleo complejo, la energía E_{res} .

Un problema del método es que otorga varios valores de $\rho_j(E)$ para cada λ (uno para cada nivel variacional) y cada uno provee un valor para $E_r^j(\lambda)$ and $\Gamma^j(\lambda)$. En [93]

³Esta ecuación es válida si $f - f(x)$ tiene solo un cero en la región de integración y además $f'(x_0) \neq 0$.

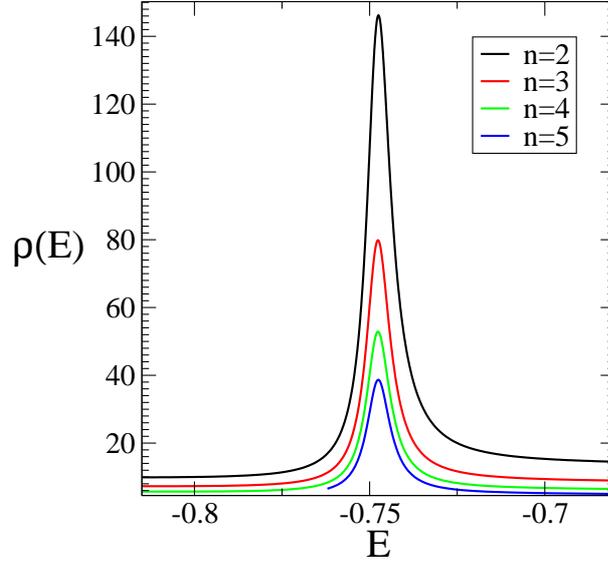


Figura 5.10: Densidad de estados $\rho(E)$ para $\lambda = 2.25$ y tamaño de base $N = 14$. Los resultados fueron obtenidos utilizando Ec. (5.46) y corresponden, de arriba a abajo, al segundo (línea negra), tercero (roja), cuarto (verde) y quinto (azul) nivel respectivamente.

resolvieron este problema tomando como valor de la resonancia el de la densidad que mejor ajusta la Lorentziana (menor χ^2). Aquí conservamos los valores de los diferentes niveles para compararlos entre ellos. Los resultados obtenidos con escaleo complejo y la densidad de estados son coherentes y, dentro de las limitaciones de los métodos utilizados, dan resultados equivalentes para la resonancia (ver Tabla 5.2).

5.4.1. Densidad y tamaño de la base

El método para obtener la densidad de estados descrito, es un método que obtiene las energías en forma variacional. En el capítulo 4 se mostraron gráficos típicos de las curvas de energía de un sistema variacional para diferentes tamaños de la base (ver Figura 4.8). El escaleo mostrado por las curvas permite utilizar el método de escaleo finito para extrapolar y mejorar los resultados obtenidos. A nuestro conocimiento, no hay trabajos hasta el presente en que se investigue las curvas de densidad de estados en función del tamaño de la base [95]. Los estudios de convergencia existentes se realizan sobre los parámetros obtenidos del ajuste no lineal a la Ec. 5.40.

La forma funcional de una distribución Lorentziana (Ec. 5.40) indica que el pico de la densidad se ubica en $E = E_r$ y la altura del pico es inversamente proporcional al ancho de la resonancia

$$\rho^{max} \equiv \rho(E_r) \propto \frac{1}{\Gamma}. \quad (5.48)$$

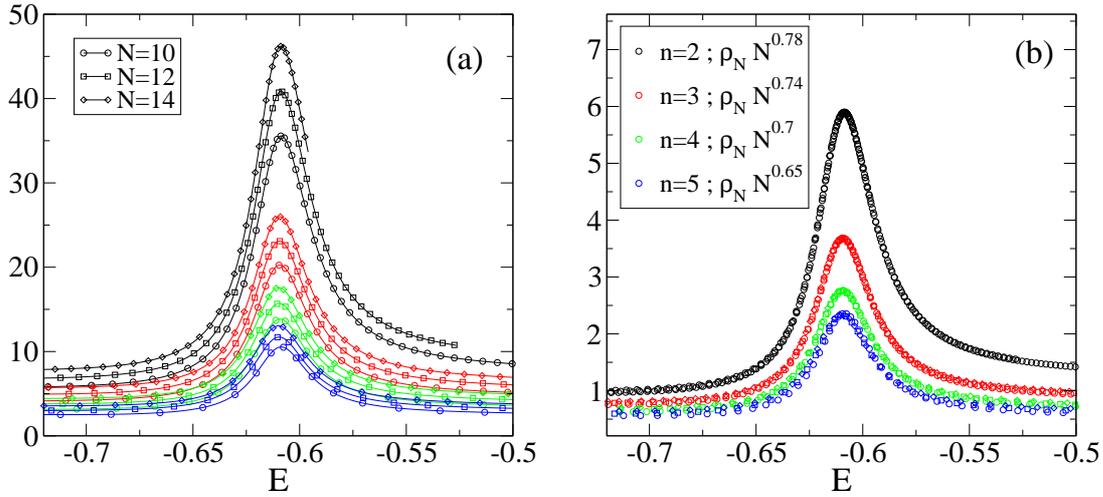


Figura 5.11: (a) Densidad de estados calculada para una resonancia con $\lambda = 2.5625$. Se utilizó un método de estabilización con tres tamaños de Base $N = 10, 12, 14$ (círculos, cuadrados y diamantes respectivamente) y con cuatro niveles variacionales $n = 2, 3, 4, 5$ (negro, rojo, verde y azul respectivamente). (b) Las mismas curvas de (a) reescaladas (colapso de datos o data collapse) con el tamaño de base, como se indica en la leyenda. El colapso de las curvas en el pico de la distribución es muy bueno.

La Ec. 5.48 sugiere que los picos de la densidad de estados con diferentes tamaños de base N pueden presentar escaleo. Cada tamaño de base otorga varios niveles variacionales y la densidad puede calcularse con cada uno de ellos. La Figura 5.11 muestra las densidades de estados calculadas para varios niveles y el escaleo en la altura del pico. La leyenda del gráfico muestra el escaleo propuesto con el tamaño de la base N

$$\rho_{(N,n)}^{max} \propto a_n N^{\gamma_n} \quad (5.49)$$

en donde n corresponde al nivel variacional y γ_n es el exponente que depende del nivel utilizado. Para obtener los exponentes para cada nivel, se grafican las inversas de $\rho_{(N,n)}^{max}$ como función del tamaño de base en escala logarítmica. Tomando logaritmos a ambos lados de 5.49 puede verse que

$$\ln [\rho_{(N,n)}^{max}] = \ln a_n + \gamma_n \ln N \quad (5.50)$$

La Figura 5.11 indica en la leyenda los valores ajustados de γ_n para cada nivel variacional. En el caso particular del tercer nivel variacional la Figura 5.12 muestra un ejemplo del ajuste a la relación de la Ec. 5.50 y el valor de energía E_r para cada tamaño de base. Se observa que la variación en la energía es muy pequeña ≈ 0.003 , si se compara con el cambio en la altura de la densidad.

El objetivo de realizar un escaleo con el tamaño de la base es extraer información sobre el sistema, que no sea dependiente de N . Para el caso particular del pico de la densidad

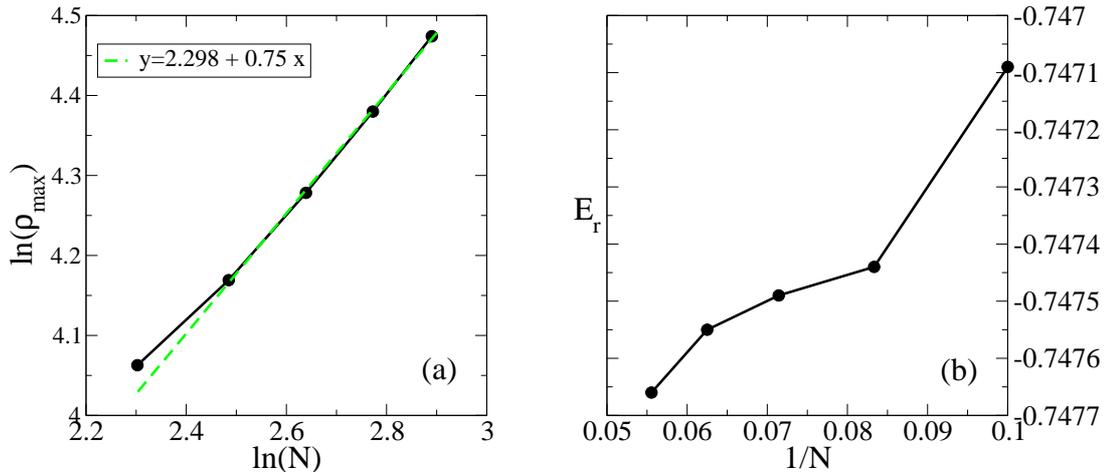


Figura 5.12: (a) Ajuste realizado al pico de la densidad en función del tamaño de la base utilizando la relación propuesta en la Ec. 5.50. (b) E_r del máximo de la densidad de estados para cada tamaño de base N como función de la inversa $1/N$. Los cálculos corresponden a un parámetro $\lambda = 2.25$ y se utilizaron bases de $N = 10, 12, 14, 16, 18$.

de estados, la Ec. 5.48 sugiere que el valor escaleado debe ser proporcional a la inversa de Γ . Utilizando conjuntamente la energía E_r en la que se centra el pico y la altura escaleada del mismo puede obtenerse la energía compleja de la resonancia $E = E_r - \Gamma/2$. No fue posible obtener el factor de proporcionalidad a partir del escaleo solamente. En su lugar se compararon las energías de las resonancias obtenidas de la forma explicada aquí, con las obtenidas por escaleo complejo. Realizando esto para muchos valores del parámetro λ se logra construir una cuerda de la resonancia, como las mostradas en la sección 5.1.3. La comparación entre las cuerdas permite obtener un solo factor de proporcionalidad para corregir la cuerda calculada con un nivel variacional.

La Figura 5.13 muestra como las cuerdas de la resonancia obtenidas con escaleo del tamaño de base y con escaleo complejo coinciden muy bien. El panel de la derecha en la figura muestra la diferencia entre las energías calculadas a través de los dos métodos. El error relativo en el rango calculado de energías es menor del %10.

Este método que utiliza el tamaño finito de la base para obtener información de la resonancia provee un comienzo para intentar obtener la energía compleja sin realizar ajustes no lineales. También utiliza en forma conjunta la información de varios tamaños de base N y no solo el mayor. El paso siguiente en este ámbito es intentar remover la degeneración de la densidad de estados con los niveles variacionales. El objetivo es lograr, de la misma manera que aquí, un escaleo con los diferentes niveles variacionales y obtener un único valor para el pico de la densidad.

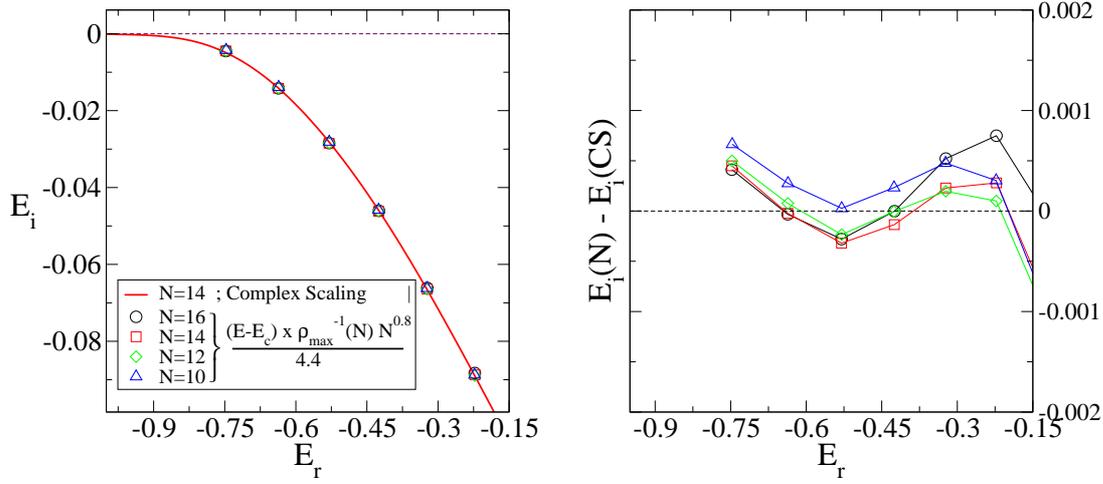


Figura 5.13: Cuerda de la resonancia calculada utilizando los métodos de escaleo complejo y escaleo con el tamaño de la base. El exponente utilizado es un promedio del que se obtiene para cada valor de $E_r(\lambda)$. El panel de la derecha muestra la diferencia entre las energías calculadas a través de los dos métodos con un error relativo menor al %10 en todo el rango calculado. El nivel utilizado fue $n = 3$.

5.5. Fidelidad y Doble Ortogonalidad

Desde los trabajos de Zanardi *et al.* [77, 96] ha habido un creciente interés por el estudio de la fidelidad como un medio para estudiar las transiciones de fase cuánticas [77], la geometría diferencial de teoría de la información [96] o el modelo XY cuántico desordenado [97]. En todos estos casos la fidelidad ha sido utilizada para detectar cambios en el comportamiento de estados en sistemas cuánticos. Por ejemplo, si λ es el parámetro externo que lleva un sistema a un transición de fase cuántica, la fidelidad esta definida como la superposición

$$\mathcal{F} = \langle \Psi(\lambda - \delta\lambda), \Psi(\lambda + \delta\lambda) \rangle, \quad (5.51)$$

en donde $\Psi(\lambda)$ es el estado fundamental del Hamiltoniano con parámetro λ . La función \mathcal{F} es una herramienta útil en la detección de comportamiento crítico en sistemas ordenados [77] y desordenados [97].

En esta sección probaremos que los niveles de energía calculados con la aproximación variacional muestran comportamiento crítico en un entorno de la energía de la resonancia. El resultado es que la curva de la resonancia $E_r(\lambda)$ puede obtenerse a partir de la fidelidad. Con el fin de obtener una mejor representación de los datos definimos la función \mathcal{G}_n como

$$\mathcal{G}_n = 1 - F_n \quad \text{con} \quad F_n = |\langle \Psi_n(\lambda), \Psi_n(\lambda + \delta\lambda) \rangle|^2, \quad (5.52)$$

en donde Ψ_n es el n -ésimo autoestado obtenido con la aproximación variacional. La función \mathcal{G}_n tiene sus ventajas para poder presentar los resultados en escala logarítmica, pero posee además un sentido geométrico explicado en el apéndice E.

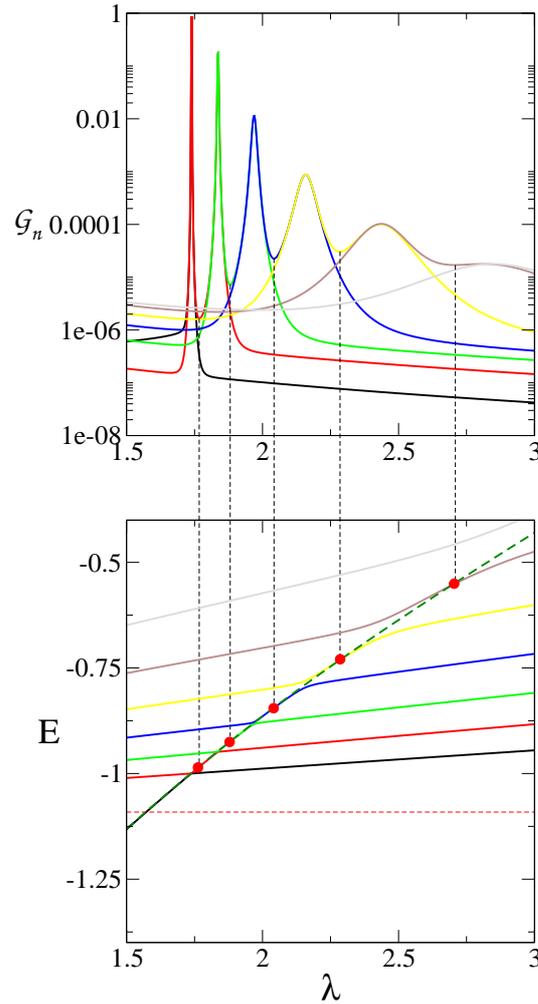


Figura 5.14: La figura superior muestra el comportamiento de \mathcal{G}_n , para $n = 1, \dots, 7$ (línea negra, roja, verde, azul, amarilla, marrón y gris, respectivamente). Cada función \mathcal{G}_n tiene dos picos, excepto para $n = 1$. Como uno de los picos de \mathcal{G}_n coincide con uno de los de \mathcal{G}_{n+1} , solo uno de los picos de cada nivel n es visible. La figura inferior muestra los autovalores variacionales $n = 1, \dots, 7$ (con la misma convención de color utilizada en la figura superior), y $E_r(\lambda)$ (línea de trazos verde). Las líneas de trazos negras conectan las figuras y muestran los valores de λ en donde se ubican los mínimos λ_n^f de cada \mathcal{G}_n . Los puntos rojos en el panel inferior corresponden a $E_n(\lambda_n^f)$.

La Figura 5.14 muestra el comportamiento de \mathcal{G} . El valor muy pequeño, excepto cerca de los cruces evitados, donde el valor de \mathcal{G} se incrementa rápidamente (al menos para n pequeño). Esto se debe a que en un entorno de un cruce evitado la superposición $|\langle \Psi_n(\lambda), \Psi_n(\lambda + \delta\lambda) \rangle|^2 \rightarrow 0$. En realidad, $|\langle \Psi_n(\lambda), \Psi_n(\lambda + \delta\lambda) \rangle|^2 \rightarrow 0$ en los puntos en que $E_n^{(\alpha)}(\lambda)$ tiene un comportamiento no analítico. La fidelidad es un buen detector de

transiciones de fase cuánticas [77, 96, 97] por esta razón. En una transición de primer orden la energía del estado fundamental es no analítica, y en una de segundo orden el espacio entre el estado fundamental y el primer excitado va a cero en el límite termodinámico.

El argumento expuesto indica que \mathcal{G}_1 tiene un solo pico, mientras que todas las otras funciones \mathcal{G}_n tienen dos picos, porque el número de picos es el número de cruces evitados de cada nivel. Sabemos que la energía de la resonancia $E_r(\lambda)$ intersecta a cada nivel $E_n^{(\alpha)}(\lambda)$ en algún punto λ_n^f entre los cruces evitados de cada nivel. Es natural entonces investigar si la fidelidad muestra alguna característica funcional entre los cruces evitados que capture esto. Lo que se observa es que λ_n^f es el valor de λ en el cual \mathcal{G}_n tiene un mínimo local. La Figura 5.14 muestra los puntos $E_n(\lambda_n^f)$. La Tabla 5.2 muestra la parte real de la energía calculada utilizando escaleo complejo, fidelidad y Densidad de Estados (DOS), para cinco valores de λ_n^f mostrados en la Figura 5.14. Los valores numéricos obtenidos utilizando la fidelidad y el método de la Densidad de Estados (explicado en la sección 5.4) son idénticos hasta cinco cifras significativas. El error relativo entre las energías obtenidas es menos del 0.25 %.

La idea de detectar la energía de la resonancia con funciones construídas a base de productos internos la llevamos un paso más allá y consideramos las funciones

$$DO_n(\lambda) = |\langle \Psi_n(\lambda_L), \Psi_n(\lambda) \rangle|^2 + |\langle \Psi_n(\lambda_R), \Psi_n(\lambda) \rangle|^2, \text{ con } \lambda_L < \lambda < \lambda_R \quad (5.53)$$

en donde λ_L y λ_R son valores de la constante de acople, uno a la izquierda (L) y otro a la derecha (R) de la resonancia. Un estado Ψ_n posee los cruces evitados localizados aproximadamente en λ_L^{av} y λ_R^{av} , donde L (R) significa el cruce evitado de más a la izquierda (derecha). Se elige entonces λ_L y λ_R de forma que $\lambda_L < \lambda_L^{av} < \lambda_R^{av} < \lambda_R$. Para un dado n , $DO_n(\lambda)$ mide cuanto difiere $\Psi_n(\lambda)$ de los estados extendidos $\Psi_n(\lambda_R)$ y $\Psi_n(\lambda_L)$.

Los estados con DO_n mínimo, de la misma manera que con la fidelidad, son aquellos en que $E_r(\lambda_{DO}^n) \simeq E_n(\lambda_{DO}^n)$, donde λ_{DO}^n esta definido por $DO_n(\lambda_{DO}^n) = \min_{\lambda} DO_n(\lambda)$. La Figura 5.15 muestra el comportamiento de DO_n obtenido con los mismos parámetros que la Figura 5.14. Comparamos también los valores de energía $E_n(\lambda_{DO}^n)$ con los obtenidos por escaleo complejo en la Tabla 5.2. Las curvas en la Figura 5.15 muestran que fuera de la región (λ_L, λ_R) los estados Ψ_n cambian muy poco con λ y $DO_n \simeq 1$. Dentro de la región de resonancia, $(\lambda_L^{av}, \lambda_R^{av})$, las funciones DO_n cambian abruptamente.

Las funciones DO_n son practicamente independientes de la elección de λ_L y λ_R , y la localización del mínimo lo es más aún. La Figura 5.16 muestra la DO calculada para un nivel de energía y varias elecciones de λ_R y λ_L . Se observa que la localización del mínimo es muy poco variable, salvo con la elección $\lambda_L \approx \lambda_L^{av}$ y $\lambda_R \approx \lambda_R^{av}$.

Observando la Tabla 5.2 y la Figura 5.15 es claro que la fidelidad y la DO proveen valores de $E_r(\lambda)$ con distintos acoples λ , sin embargo todos ellos pertenecen a la misma curva. Los dos métodos otorgan los mismos resultados cuando $|\lambda_R^{av} - \lambda_L^{av}| \rightarrow 0$. Con N finito la fidelidad mide cuan rápido cambia el estado si $\lambda \rightarrow \lambda + \Delta\lambda$ (ver apéndice E). La DO mide cuanto difiere un estado de los estados extendidos localizados a ambos lados de la región de resonancia.

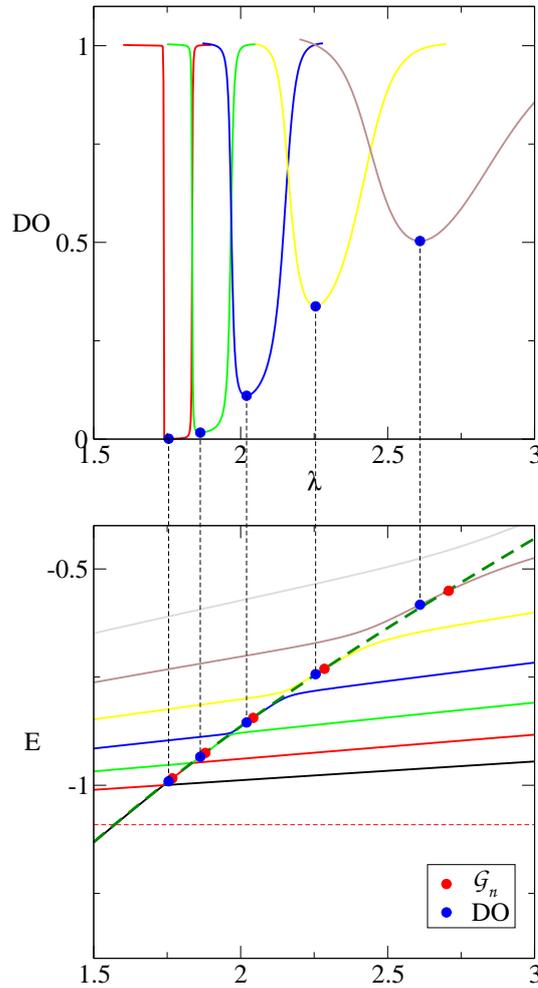


Figura 5.15: El panel inferior muestra los niveles de energía $E_n(\lambda)$ para $n = 1, \dots, 7$ (línea negra, roja, verde, azul, amarilla, marrón y gris, respectivamente); $E_r(\lambda)$ (línea de trazos verde oscuro); $E_n(\lambda_{DO}^n)$ (puntos azules) y $E_n(\lambda_n^f)$ (puntos rojos). El panel superior muestra el comportamiento de DO_n vs λ para $n = 2, \dots, 7$. La convención de color para las E_n es la misma que la usada en el panel superior. Las líneas verticales de trazos negros muestran la posición de los puntos λ_{DO}^n .

5.6. Entropía de una resonancia

Si $\hat{\rho}^{red}$ es el operador densidad reducida de un electrón [38], entonces la entropía de Von Neumann \mathcal{S} esta dada por

$$\mathcal{S} = -\text{tr}(\hat{\rho}^{red} \log_2 \hat{\rho}^{red}), \quad (5.54)$$

y la entropía lineal \mathcal{S}_{lin} por [83]

$$\mathcal{S}_{lin} = 1 - \text{tr}[(\hat{\rho}^{red})^2], \quad (5.55)$$

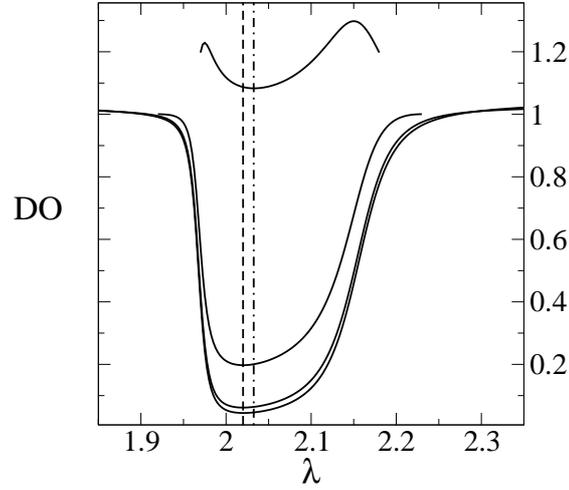


Figura 5.16: La DO_n vs. λ calculada para $n = 4$ y varias elecciones de los puntos (λ_R, λ_L) . El nivel $n = 4$ presenta cruces evitados en $\lambda_L^{av} = 1.97$ y $\lambda_R^{av} = 2.15$. De arriba hacia abajo las curvas corresponden a las elecciones de los puntos $(1.97, 2.18)$, $(1.92, 2.23)$, $(1.77, 2.38)$ y $(1.67, 2.48)$. La línea de trazos vertical indica la posición del mínimo de las tres curvas inferiores (indistinguibles tomando un espaciado $\Delta\lambda \approx 0.0025$), la línea de trazos y puntos el mínimo de la superior.

en donde el operador densidad reducida se define como

$$\hat{\rho}^{\text{red}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \text{tr}_2 |\Psi\rangle \langle \Psi| , \quad (5.56)$$

aquí la traza es tomada sobre un electrón, y $|\Psi\rangle$ es la función de onda total de dos electrones. Las dos entropías, Ec.(5.54) y (5.55), pueden utilizarse para analizar la cantidad de entrelazamiento que posee un estado cuántico. La elección de una u otra entropía se toma de acuerdo a la conveniencia particular del problema. La Figura 5.17 muestra las dos entropías calculadas para el punto cuántico y puede verse que el comportamiento cualitativo es el mismo.

En este capítulo utilizaremos la entropía lineal. Una discusión más detallada sobre las similitudes de ambas se encuentra en [83] y referencias allí citadas.

La función de onda de dos electrones no puede obtenerse en forma exacta, en su lugar utilizaremos la aproximación variacional de la Ec. (5.36). En el caso de dos partículas la función Ψ puede factorizarse en componentes espacial y de espín, por lo que ambas contribuciones a la entropía son separables (ver [39] y referencias allí citadas). El análisis del comportamiento de la entropía se reduce entonces al de la parte espacial S , porque la contribución de espín es constante.

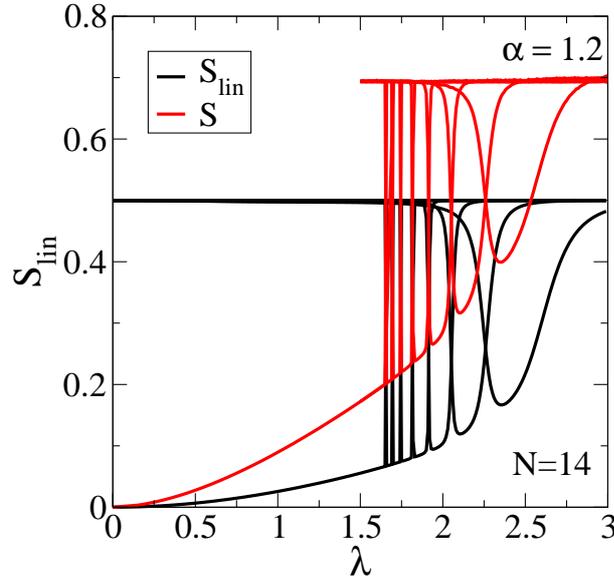


Figura 5.17: Las entropías lineal (negra) y de Von Neumann (roja) vs. la repulsión electrónica en un punto cuántico con dos electrones. Cualitativamente las dos entropías muestran un comportamiento similar por encima del umbral. Los mínimos están localizados en los mismos valores de λ .

Si $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es la función de onda espacial de dos electrones y $\rho^{red}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)$ es

$$\rho^{red}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \int \varphi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2, \quad (5.57)$$

entonces la entropía lineal S_{lin} puede calcularse como

$$S_{\text{lin}} = 1 - \sum_i \lambda_i^2, \quad (5.58)$$

en donde los λ_i son los autovalores de ρ^{red} . Los autovalores se obtienen de la ecuación

$$\int \rho^{red}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \phi_i(\mathbf{r}'_1) d\mathbf{r}'_1 = \lambda_i \phi_i(\mathbf{r}_1). \quad (5.59)$$

Para resolver la ecuación Ec. (5.59) se hizo una expansión de las autofunciones $\phi_i(\mathbf{r})$ en la base de una partícula⁴ de la Ec. (5.35). Al igual que para encontrar los autovalores del Hamiltoniano de la Ec. (5.28). Para realizar el cálculo se necesita la matriz correspondiente para ρ^{red} en la base de una partícula. Utilizando las autofunciones del Hamiltoniano obtenidas anteriormente, se puede calcular la matriz de la densidad reducida a partir de la Ec. (5.57). Más detalles acerca de la forma particular de la expansión se encuentran en la referencia [90].

⁴Esta es solo la parte radial, la parte angular corresponde a un armónico esférico.

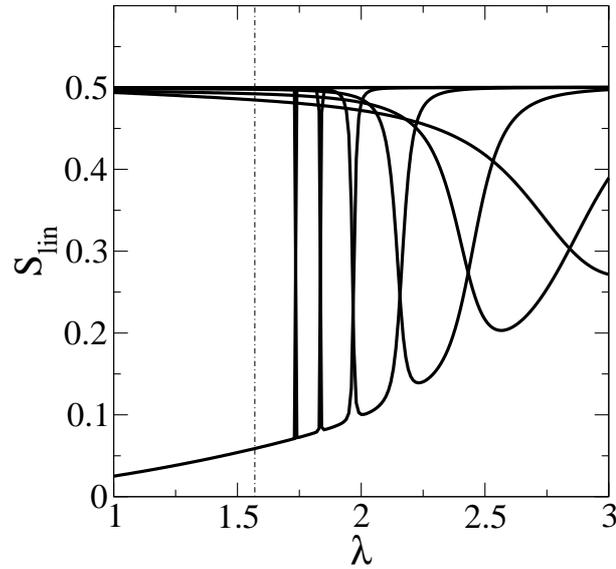


Figura 5.18: Comportamiento de $S_{\text{lin}}(\Psi_j^{(\alpha)})$, en donde $\Psi_j^{(\alpha)}$ son los autoestados variacionales que corresponden a los primeros siete niveles de energía mostrados en la Figura 5.7 para $N = 14$ y $\alpha = 2.0$. Todas las curvas $S_{\text{lin}}(\Psi_j^{(\alpha)})$, excepto por las correspondientes a $S_{\text{lin}}(\Psi_1^{(\alpha)})$, poseen un solo mínimo ubicado en λ_j^S , i.e. $S_{\text{lin}}(\Psi_j^{(\alpha)}(\lambda_j^S)) = \min_{\lambda} S_{\text{lin}}(\Psi_j^{(\alpha)}(\lambda))$. Si $i < j$ entonces $\lambda_i^S < \lambda_j^S$.

La Figura 5.18 muestra el comportamiento de la entropía lineal de varios niveles variacionales. El significado de cada curva fue extensamente discutido por Ferrón *et al.* [38], y en lo que sigue incluimos una breve discusión sobre los resultados.

Sintonizando el valor de λ se logra que la energía del estado fundamental cruce el umbral y el punto cuántico pierde un electrón. El estado fundamental del sistema por arriba del umbral puede describirse como un electrón ligado al punto cuántico y uno libre *infinitamente lejos*. La función de onda se escribe entonces como un producto simetrizado de funciones de un electrón y por lo tanto $S_{\text{lin}} = S_c = 1/2$. Entonces, si solo se consideran estados ligados y del continuo, la entropía muestra una discontinuidad cuando la energía cruza el valor umbral. El escenario cambia considerablemente si se incluyen las resonancias en el análisis. Las resonancias pueden mantener los dos electrones *localizados* por un tiempo finito aún con energías por encima del umbral. El *tiempo de vida* de una resonancia es la mitad de la inversa de la parte imaginaria de la energía. Ferrón *et al.* [38] sugirieron que es posible construir una función suave $S(E_r(\lambda))$ que *interpole* los mínimos de las funciones $S(\Psi_j)$ mostradas en la Figura 5.18. Esta asunción se basa en argumentos similares a los presentados aquí, i.e. si λ_n^S es valor de λ en donde $S(\Psi_n)$ posee un mínimo, entonces $E_n(\lambda_n^S)$ es aproximadamente igual a la curva $E_r(\lambda)$. En [38] se utilizaron bases con un solo valor del parámetro variacional α , por lo que la elección de los mínimos de $S(\Psi_n)$ como signo de la presencia de resonancia resultó algo natural.

La parte real de la energía $E_r(\lambda)$ puede aproximarse por autovalores variacionales en un entorno de λ . Los autovalores que aproximan la energía $E_r(\lambda)$ pueden corresponder a diferentes valores del parámetro variacional $E_r(\lambda) \simeq E_n^{(\alpha)}(\lambda) \simeq E_{n'}^{(\alpha')}(\lambda)$ (donde el superíndice α indica que corresponden a diferentes valores de α y α'). Un autovalor exacto puede aproximarse con diferentes autovalores variacionales. Sin embargo, la aproximación de la entropía (y otros observables) puede presentar inconvenientes con autovalores diferentes. En general $S(\Psi_n^{(\alpha)}(\lambda))$ no tiene un valor similar a $S(\Psi_{n'}^{(\alpha')}(\lambda))$. Esto ya fue destacado en [98], en donde se muestra que un método numérico puede dar buenos resultados para calcular el espectro de un sistema cuántico, pero ser completamente impreciso para calcular entrelazamiento. Los sistemas de pocos cuerpos muestran evidencia de una fuerte correlación entre el entrelazamiento y la repulsión Coulombiana entre componentes del sistema [39, 79, 83, 90]. A causa de esta correlación investigamos cuidadosamente el comportamiento de la repulsión Coulombiana entre los electrones.

Si $\psi \in \mathcal{L}^2$ es un autovector del Hamiltoniano de la Ec. (5.28) con autovalor E , el teorema de Hellman-Feynman indica que

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \psi | \frac{1}{r_{12}} | \psi \rangle. \quad (5.60)$$

Utilizaremos ambos lados de la Ec. (5.60) con el fin de analizar la aproximación variacional para valores medios de observables diferentes al Hamiltoniano. La parte derecha de la Ec. (5.60) está bien definida si utilizamos funciones \mathcal{L}^2 como autofunciones variacionales.

Para evaluar la parte izquierda de la Ec. (5.60) utilizaremos la parte real de la energía obtenida, en forma independiente, con escaleo complejo. La Figura 5.19 muestra el comportamiento de $\frac{dE_r}{d\lambda}$ y la repulsión Coulombiana entre los electrones, $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle_n$, donde $\langle \bullet \rangle_n$ significa que el valor medio fue calculado con $\Psi_n^{(\alpha)}$. El valor medio $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle_n$ tiene un máximo donde la entropía lineal de $\Psi_n^{(\alpha)}$ tiene un mínimo. Este comportamiento inverso de la entropía y la repulsión Coulombiana ha sido observado previamente [83, 90].

Si α esta fijo y observamos un curva con n pequeño, $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle_n$ notamos que el máximo se encuentra muy cerca de la curva $\frac{dE_r}{d\lambda}$. Además, la forma de las dos curvas en un entorno del máximo de $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle_n$ es muy similar, en este sentido el método variacional provee una buena aproximación de la energía $E_r(\lambda)$ y su derivada cerca del umbral.

Las curvas con mayor n muestran que el máximo de $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle_n$ se separa de la derivada $\frac{dE_r}{d\lambda}$, y la forma de las curvas en un entorno de este máximo es muy diferente. Se intentó mejorar esto cambiando el parámetro α observando que sucede con las curvas. Se obtuvo una buena aproximación de $\frac{dE_r}{d\lambda}$ hasta cierto valor que denotaremos por λ_{ap} . Puede decirse que con valores de λ menores que λ_{ap} , existe un par n, α tal que $\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle_{n, \alpha}$ es localmente una buena aproximación de $\frac{dE_r}{d\lambda}$ y la pendiente de las dos curvas es la misma (salvando errores numéricos), ver Figura 5.20.

Aparentemente, no puede obtenerse una mejor aproximación que la mostrada en la Figura 5.20 a partir de métodos variacionales, por lo menos utilizando la misma familia

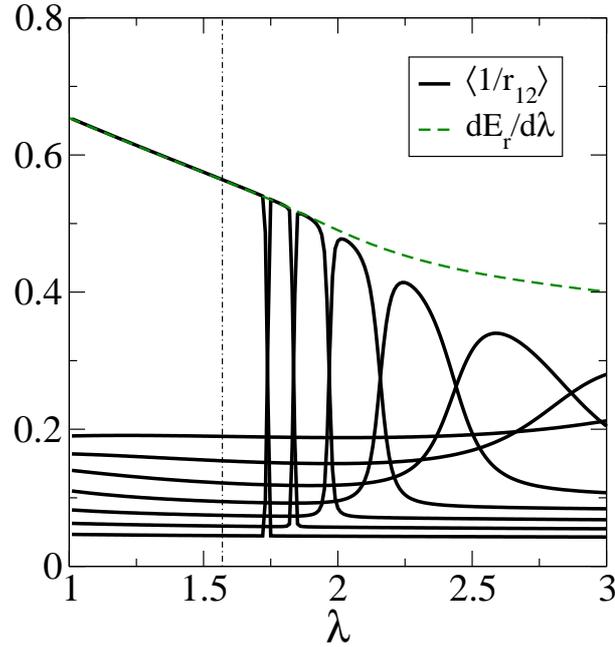


Figura 5.19: Valores medios de la repulsión Coulombiana para los estados variacionales $\Psi_n^{(\alpha)}$, $n = 1, \dots, 8$ con $N = 14$ y $\alpha = 2,0$. También se muestra la curva $\frac{\partial E_r}{\partial \lambda}$ obtenida de la energía compleja con el método de escaleo complejo.

monoparamétrica de bases. La dificultad es intrínseca del problema, y no una limitación del método utilizado. Esto puede aclararse utilizando el método de escaleo complejo.

Sea ϕ^θ un autovector tal que

$$H(\theta)\phi^\theta = E_{res}\phi^\theta, \quad (5.61)$$

en donde $H(\theta)$ es el Hamiltoniano obtenido de la transformación de escala compleja descrita en la sección 5.1, y θ es el ángulo de *rotación compleja*. El autovector ϕ^θ depende de θ , pero si θ es suficientemente grande el autovalor E_{res} no depende de θ .

En la sección 5.1 no se hizo mención de como se calcula el valor medio de un operador con autovectores *rotados* ϕ^θ . La definición utilizada para el producto interno debe modificarse para los operadores $H(\theta)$, que son simétricos y no Hermitianos (ver apéndice F). En su lugar se utiliza la siguiente definición: *Solo deben conjugarse los términos de los bra, o vectores a izquierda, que son complejos aún antes de hacer la transformación de escala compleja. Los términos que se hacen complejos a causa de la transformación no deben conjugarse.* Si las autofunciones ϕ^θ se expanden en una base de funciones reales, como hemos hecho aquí, no deben conjugarse las funciones a izquierda en el producto interno ya que todo el aporte complejo proviene de la transformación. La ortogonalidad de las autofunciones de $H(\theta)$ se expresa entonces como

$$\langle (\phi_m^\theta)^* | \phi_n^\theta \rangle = \delta_{n,m} \quad (5.62)$$

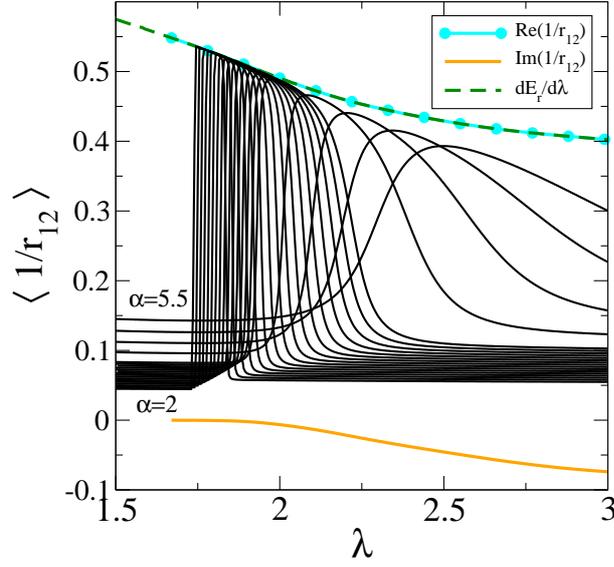


Figura 5.20: Valor medio $\langle 1/r_{12} \rangle_2^{(\alpha)}$ vs. λ con un tamaño de base $N = 14$ y $\alpha = 2, \dots, 3.5$ en pasos de 0,1 y para $\alpha = 4, \dots, 5.5$ en pasos de 0.5 (líneas negras). También se muestran las partes real (cían punteada) e imaginaria (línea naranja) de $\langle 1/r_{12} \rangle_\theta$ y la derivada de la parte real de la energía obtenida con escaleo complejo.

La ecuación (5.62) se cumple con casi todos los valores de θ salvo en puntos discretos y aislados en los cuales el producto interno se anula si $n = m$ (ver [71] pág. 258). Numéricamente es difícil utilizar accidentalmente esos valores de θ , salvo que el objetivo sea encontrarlos. El valor medio de un operador se define como

$$\mathcal{O}^\theta = \langle (\phi^\theta)^\star | \mathcal{O}(\theta) | \phi^\theta \rangle. \quad (5.63)$$

De acuerdo a lo remarcado por Moiseyev [71], la parte real del valor medio (5.63) es la cantidad físicamente medible, mientras que la parte imaginaria es la incerteza de medir la parte real. La cantidad físicamente medible debe ser independiente de θ , porque este es un parámetro del método y no tiene un significado físico. Un ejemplo de esto es E_{res} .

El autovector ϕ^θ puede normalizarse como⁵

$$\langle (\phi^\theta)^\star | \phi^\theta \rangle = 1. \quad (5.64)$$

Si ϕ^θ está normalizado, se obtiene que

$$\frac{\partial E_{res}}{\partial \lambda} = \langle (\phi^\theta)^\star | \frac{e^{-i\theta}}{r_{12}} | \phi^\theta \rangle = \left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle_\theta, \quad (5.65)$$

⁵El avisado lector habrá notado que el producto ímplicitamente definido en la Ec. 5.64, no cumple las propiedades de un producto escalar. Esto trae aparejado algunas complicaciones, por ejemplo el producto de la Ec. 5.64 puede anularse para un vector no nulo. Esta y otras derivaciones del *producto interno generalizado* se tratan con detalle en [71] pág. 250. Un indicio del origen de la definición, puede verse en el apéndice F.

en donde se utilizó que la transformación de escala compleja de la repulsión es

$$\frac{1}{r_{12}} \rightarrow \frac{e^{-i\theta}}{r_{12}}, \quad (5.66)$$

y se definió la cantidad $\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle_{\theta}$. Este *teorema generalizado* de Hellman-Feynman es válido para estados de Gamow [99], que describen a las resonancias.

La Figura 5.20 muestra el comportamiento del valor medio $\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle_{\theta}$ como función de λ . La parte real del valor medio $\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle_{\theta}$ coincide exactamente con $\frac{\partial E_r}{\partial \lambda}$. La parte imaginaria de $\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle_{\theta}$ es distinguible de cero cuando el parámetro λ alcanza valores por arriba del valor crítico, aproximadamente en el valor λ_{rep} . Esto nos llevó a concluir que no es posible aproximar adecuadamente la repulsión Coulombiana de una resonancia, o su entropía, solamente trabajando con funciones variacionales reales \mathcal{L}^2 , más allá de los buenos resultados que se obtuvieron para el espectro.

Definimos aquí el *operador densidad complejo* de la resonancia como

$$\rho^{\theta} = |\phi^{\theta}\rangle \langle (\phi^{\theta})^*|, \quad (5.67)$$

y la *entropía lineal compleja*

$$S^{\theta} = 1 - \text{tr}(\rho_{red}^{\theta})^2, \quad (5.68)$$

en donde

$$\rho_{red}^{\theta} = \text{tr}_2 \rho^{\theta}, \quad (5.69)$$

y ϕ^{θ} es el autovector de la Ec. (5.61). La definición fue motivada por el hecho de que el operador densidad es un proyector sobre el espacio expandido por $|\phi^{\theta}\rangle$. La normalización utilizada (Ec. (5.64)) implica que el *bra* debe conjugarse, entonces ρ^{θ} es el proyector adecuado.

La normalización de la Ec. (5.64) también indica que $\text{tr} \rho^{\theta} = \text{tr} \rho_{red}^{\theta} = 1$ *aún teniendo en cuenta que ambos operadores tienen autovalores complejos*.

La Figura 5.21 muestra que la parte real de S^{θ} se mantiene cerca de la envolvente que contiene los mínimos de las funciones $S(\Psi_n)$ hasta cierto valor de λ . La entropía S^{θ} **no depende de θ** si θ es suficientemente grande. Si λ toma valores lejos del umbral, el escaleo requiere ángulos más grandes para descubrir la energía resonancia y el método se vuelve inestable con ángulos $\theta \approx \pi/4$. La evidencia numérica muestra que la entropía calculada por Ferrón *et al.* es correcta en un entorno del umbral, pero si el parámetro λ es muy grande el entrelazamiento de la resonancia debe caracterizarse con S^{θ} y no con las $S(\Psi_n)$.

5.7. Conclusiones del capítulo

Los electrones dentro de puntos cuánticos pueden modelarse mediante la aproximación de masa efectiva. La misma consiste en describir el punto cuántico con un potencial de

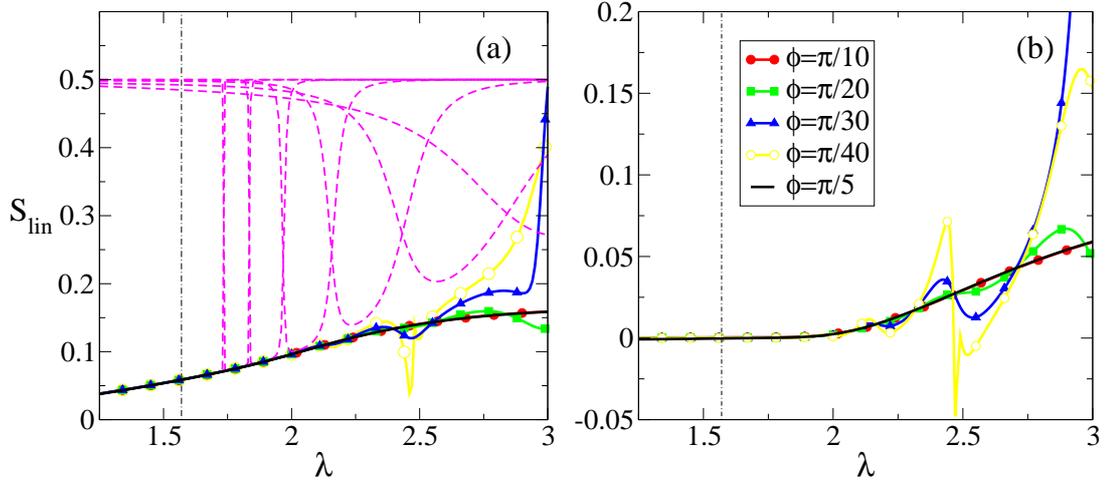


Figura 5.21: (a) La entropía lineal para los mismos valores de la Figura. 5.18 (líneas de trazos magenta). También se muestra la parte real de la entropía compleja con varios valores del ángulo de rotación $\phi = \frac{\pi}{5}, \frac{\pi}{10}, \frac{\pi}{20}, \frac{\pi}{30}, \frac{\pi}{40}$ (negra llena, puntos rojos, cuadrados verdes, triángulos azules, puntos amarillos vacíos). (b) Parte imaginaria de la entropía compleja con los mismos valores que en (a).

corto alcance en el cual los electrones poseen una masa reducida. En este capítulo realizamos cálculos numéricos para caracterizar estados ligados y resonancias de dos electrones en un punto cuántico, dentro de la aproximación de masa efectiva.

El espectro variacional de estados ligados no muestra cambios apreciables si modificamos la base utilizada o los parámetros no lineales de la misma. La región correspondiente al continuo es, en contraste, muy dependiente de estos factores. Si el Hamiltoniano tiene resonancias de forma en el espectro continuo, el método variacional permite detectarlas analizando el espectro. El análisis del espectro se realizó utilizando la fidelidad y la doble ortogonalidad. La fidelidad ha sido utilizada extensivamente en la detección de transiciones de fase cuánticas y esta es la primera vez que se utiliza en la detección de resonancias y caracterización del espectro variacional. La doble ortogonalidad $DO_n(\lambda)$ es una cantidad que hemos definido por primera vez en esta Tesis, aportando una nueva herramienta para analizar el espectro variacional. Los resultados numéricos mostraron que puede obtenerse $E_r(\lambda)$ con gran precisión, para algunos valores selectos de λ , sin emplear ningún método de estabilización. La función doble ortogonalidad $DO_n(\lambda)$ logra detectar los cambios en los estados variacionales e identifica la energía de la resonancia con la misma precisión que la fidelidad. Los dos métodos utilizados para calcular $E_r(\lambda)$ no dependen de la elección particular del modelo ni del método variacional utilizado, sino que se basan en la capacidad de los autoestados de detectar los cambios no analíticos en el espectro. En particular, los métodos pueden utilizarse en sistemas de todo tipo de dimensionalidad porque están basados en normas de los autoestados. La fidelidad y la DO proveen la parte real de la energía de la resonancia utilizando funciones variacionales reales *sin* parámetros libres,

como en los métodos de estabilización usuales[22, 21, 20]. La Tabla 5.2 muestra que la fidelidad y la doble ortogonalidad dan valores de $E_r(\lambda)$ en forma tan precisa como el método de la densidad de estados, con menos esfuerzo numérico.

La entropía de Von Neumann en sistemas atómicos esta estrechamente relacionada con el entrelazamiento entre los electrones. Se mostró que la misma también esta ligada a la distancia entre electrones del punto cuántico. Los estados ligados del Hamiltoniano tienen una entropía continua hasta la energía de umbral, en donde muestran una discontinuidad. Si se consideran las resonancias en un entorno del umbral, la entropía puede calcularse con los primeros estados variacionales por encima del mismo. En las regiones más alejadas del umbral se propuso una definición de la entropía de un resonancia basada en la extensión compleja de la definición usual para estados ligados. La extensión implica que el operador densidad reducida no es Hermitiano y tiene autovalores complejos, resultando una entropía compleja. Se comprobó que las partes real e imaginaria de la entropía compleja son independientes de θ , como lo debe ser el valor medio de un observable [71]. La independencia de θ soporta la interpretación de la parte real de la entropía compleja como una medida de la cantidad de entrelazamiento de un resonancia.

Cuando se iba, doctor, cuando mi viejo se iba, en la puerta, porque lo acompañe hasta la puerta, me abrazó de nuevo y me dijo otra vez al oído: “Me equivoqué, Marquitos. Vos no le erraste de carrera. Vos no le erraste”. Porque todos los de acá, que se acercaron a apoyarlo, a reconfortarlo, a apuntalarlo, lo hicieron y creo que no me equivoco, doctor, porque era mi viejo, y porque me quieren. Porque que me quieren a mí. ¿ Me entiende ? ¿ O no ? ¿ O no, doctor ? Y esta noche por ahí vuelve de nuevo mi viejo, con la Lolita. Y hasta en una de esas los hago bailar y todo. Si el tango se puede bailar hasta cualquier edad. No es el breakdance ¿ O no ? ¿ O no, doctor ? No es el breakdance.

Roberto Fontanarrosa, “ El Rey de la Milonga ”.

Cuadro 5.2: *Energía de la Resonancia obtenida por cuatro métodos diferentes. El tamaño de base es $N=14$*

λ		DO	Complex Scaling	Fidelidad y Densidad de Estados				
				$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$	$n = 6$
1.755	E	-0.99075	-0.99098	-0.99011	—	—	—	—
	α	2.0	2.0	1.560	—	—	—	—
1.8625	E	-0.93427	-0.93452	-0.93434	-0.93383	-0.93303	—	—
	α	2.0	2.0	2.448	1.787	1.414	—	—
2.02	E	-0.85498	-0.85556	-0.85581	-0.85564	-0.85531	-0.85486	—
	α	2.0	2.0	3.339	2.435	1.906	1.519	—
2.255	E	-0.74329	-0.74538	-0.74518	-0.74527	-0.74519	-0.74521	-0.74514
	α	2.0	2.0	4.262	3.098	2.414	1.936	1.574
2.61	E	-0.58276	-0.59077	-0.58825	-0.58910	-0.58942	-0.58965	-0.58979
	α	2.0	2.0	5.248	3.799	3.799	2.373	1.936

Capítulo 6

Conclusiones y Perspectivas

Las investigaciones realizadas en esta Tesis son un intento por describir varios fenómenos que ocurren en sistemas cuánticos de pocos cuerpos. La gran mayoría estos ocurren debido a que la energía del estado fundamental de un sistema cuántico tiene una energía próxima a la energía de umbral donde comienza el espectro continuo.

A lo largo de la Tesis se trabajó con sistemas de tres partículas tanto el la aproximación de masa infinita como con masas finitas, con cargas unitarias y no unitarias de interacciones apantalladas y se estudiaron las resonancias en un modelo de punto cuántico.

El capítulo 2 es útil para comprender la complejidad del comportamiento crítico de sistemas cuánticos cerca del umbral. Se intentó establecer los conceptos e ideas globales del área mediante la presentación de resultados originales para sistemas compuestos por dos partículas idénticas en un campo externo. El trabajo publicado [5] sobre los resultados presentados allí intenta descifrar cuales son los posibles escenarios para los diagramas de estabilidad del estado fundamental en función de las particularidades de las interacciones. Un diagrama de estabilidad es un esquema (normalmente bidimensional) en cual se puede ubicar todos los posibles sistemas representados por un Hamiltoniano, que se divide en regiones donde los sistemas soportan o no soportan estados ligados. Las divisiones en los diagramas son las denominadas líneas críticas.

Los Hamiltonianos utilizados en el capítulo 2 para representar partículas idénticas en potenciales externos poseen dos parámetros positivos¹. Uno de ellos regula la *atracción* ejercida por el potencial externo y el otro la *repulsión* entre las partículas. Los parámetros del Hamiltoniano modifican la magnitud de la atracción o la repulsión, pero *no modifican el alcance* de ninguna de las interacciones. Esto es clave, ya que se probó en el capítulo 2 que existen tres tipos de diagramas de estabilidad (ver Figura 2.1) y la ocurrencia de uno u otro tipo depende del alcance de las interacciones.

Algunos resultados del capítulo 2 son dignos de remarcar en estas conclusiones finales.

- Los sistemas con potenciales Coulombianos atractivos son capaces de presentar los 3 tipos de diagramas de estabilidad según sea el alcance del potencial repulsivo.

¹En realidad los Hamiltonianos analizados en todos los capítulos constan de dos o más parámetros que regulan la magnitud de las interacciones.

- La reentranza de los diagramas tipo 3. En toda investigación en curso se busca probar resultados que la intuición física indica como plausibles y otros resultados surgen de las investigaciones, que muchas veces parecen ir a contracorriente de lo cotidiano o estándar. Este último caso describe los diagramas de tipo 3. La razón de esto es que los sistemas con diagramas tipo 3 poseen regiones en que *el aumento del acople atractivo causa la inestabilidad del sistema*. La explicación cualitativa, dentro de una renovada intuición física, es que hay regiones del diagrama en que la atracción de largo alcance es tan débil que la distancia media de las dos partículas idénticas es muy grande. En esta situación, una repulsión de corto alcance no aporta suficiente energía para romper la ligadura y el sistema se mantiene estable. El hecho de aumentar la magnitud de la atracción requiere que las partículas disminuyan su distancia media, lo que aumenta la energía de repulsión. En este esquema de interacciones competitivas, un aumento suficiente de la atracción hace que la energía de repulsión supere la de ligadura y el sistema se vuelva inestable. Por supuesto, la vieja intuición no estaba del todo equivocada, si se continúa aumentando la magnitud de la atracción, el sistema eventualmente vuelve a ser estable.

- El exponente crítico de la energía en una línea crítica $2 - 0$ de doble ionización es siempre mayor que 1. La importancia de este resultado yace en que los exponentes críticos obtenidos en los capítulos 3 y 4 muestran comportamientos anómalos en puntos en que las líneas $2 - 0$ se convierten en líneas $2 - 1$.

Los nuevos interrogantes que genera una investigación son ciertamente muchas más que las que responde. Una pregunta muy interesante, que proviene del análisis de los resultados del capítulo 2 y los posteriores en los capítulos 3 y 4, es si existe alguna relación entre los diagramas de tipo 3 y el Efecto Efimov en sistemas con masas finitas. La pregunta surge de la divergencia de la línea crítica en los diagramas tipo 3 y en el hecho que los estados de Efimov también *nacen* del umbral de energía en un entorno del valor de acople crítico (de una partícula). Otra interrogante es que ocurre en la región de inestabilidad en los diagramas tipo 3. Los sistemas solo soportan 1 partícula ligada pero pueden presentar resonancias de dos partículas que no han sido estudiadas como se hizo en el capítulo 5.

Los sistemas analizados en el capítulo 2 pueden interpretarse como átomos con un núcleo de masa infinita. En casos en que el alcance de los potenciales involucrados es el mismo, los resultados de este capítulo no otorgan mucha información. El problema es más complejo aún si consideramos sistemas de tres partículas con masas finitas. Los capítulos 3 y 4 consisten en un compendio de resultados numéricos, y unos pocos exactos, sobre sistemas de tres partículas interactuando a través de un mismo potencial de corto alcance. La motivación del estudio de sistemas apantallados con el potencial de Yukawa surgió de un trabajo publicado en 2006 [23], donde se logró demostrar que el H_2 y el ión molecular H_2^+ con interacciones apantalladas soportan estados Borromeos. Los estados Borromeos son estados ligados de N partículas en regiones del diagrama de estabilidad en las que todos los posibles subsistemas son inestables. En el capítulo 3 se realizó un estudio en detalle de sistemas de tres cargas unitarias con interacciones apantalladas, con el fin de extender el resultado obtenido para el ión molecular H_2^+ a sistemas con diferentes configuraciones de masas. En particular se logró probar la existencia de estados Borromeos en los iones moleculares $pp\mu^-$, $pd\mu^-$, $pt\mu^-$, $dt\mu^-$ y también para los mismos

sistemas intercambiando μ^- por un electrón e^- . Utilizando el método escaleo de tamaño finito FSS (Finite Size Scaling) se encontraron fuertes evidencias que indican la existencia de un estado Borromeano también para el catión de Positronio Ps^- . Un esfuerzo numérico extra, sin duda llegará a comprobar este resultado en forma rigurosa mediante cotas variacionales en un futuro próximo. Este resultado es útil porque, de comprobarse, implicaría la existencia de estados Borromeanos para todos los sistemas simétricos $(\pm m_1, \pm m_1, \mp m_3)$ con $m_3/m_1 \leq 1$.

Utilizando las cotas variacionales se logró obtener una desigualdad para testear la existencia de estados ligados Borromeanos en sistemas asimétricos,

$$\frac{m_3}{m_1} \left(\frac{m_1}{m_2} + 1 \right) < 0.136.$$

Si las masas de un sistema con cargas unitarias $(\pm 1, \pm 1, \mp 1)$ cumplen la desigualdad entonces soportan al menos un estado ligado Borromeano para el valor de apantallamiento crítico del potencial de Yukawa (1.1906).

En el capítulo 4 se calcularon diagramas de estabilidad para el estado fundamental de sistemas cargados. El área estable en los diagramas de estos sistemas es inversamente proporcional a la carga de las partículas idénticas. Esto se probó analizando el Hamiltoniano y comprobó numericamente con el método variacional. Los sistemas cargados también presentan estados Borromeanos debido a esta propiedad, ya que todos los sistemas de cargas unitarias con estados Borromeanos los siguen manteniendo para cargas menores que uno. Desde un análisis espectral esto tiene un interés intrínseco muy importante, sin embargo encontrar sistemas físicos reales con estados Borromeanos es muy diferente. Se investigó la existencia de estados Borromeanos en iones moleculares y se probó que los sistemas He_2^{3+} , $He_2^{3+}(\mu^-)$ y $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$ tienen estados Borromeanos. Utilizando el método de FSS se encontró que el átomo de Helio también puede llegar a tener un estado Borromeano. Lamentablemente, el método de FSS no provee una cota variacional, por lo que para probar esta afirmación debemos optimizar los cálculos para este sistema en particular. Los intentos para probar esta afirmación no han dado aún resultados positivos. La región de ligadura Borromeana para el Helio, si existe, es muy pequeña debido a que esta acotada por el valor crítico de dos partículas $\tilde{\sigma}_c \approx 1.1906$ y la línea crítica obtenida para el límite $q = 0$.

La capacidad de ligadura del ión H^- como función de la carga nuclear en sistemas Coulombianos fue objeto de muchas investigaciones [2, 6, 66]. En el capítulo 4 se realizó un análisis similar para el caso apantallado. De acuerdo con los resultados, también existe una carga crítica nuclear q_{yuk} para la cual los sistemas atómicos con $q < q_{yuk}$ soportan un estado ligado en algún intervalo de apantallamientos. La cota variacional obtenida para este valor es $q_{yuk} > 3.5$ con un estado ligado en el intervalo $\tilde{\sigma} \in (1.136, 1.145)$. Si la carga toma el valor crítico q_{yuk} , el intervalo se reduce a un único valor de apantallamiento, como se mostró en el desarrollo del capítulo 4.

El efecto Efimov es una característica que presentan los sistemas de tres partículas con interacciones de corto alcance. El proceso físico que le da origen es, en cierto aspecto, similar a lo que ocurre en los sistemas con diagramas tipo 3 del capítulo 2. En 1970

Efimov[31] publicó un trabajo sobre la existencia infinitos estados ligados en sistemas de tres partículas atractivas, que en estos días es calificado como una *predicción bizarra*[35]. Actualmente el efecto se mide en condensados de átomos fríos utilizando campos magnéticos para sintonizar los parámetros de las interacciones. La base de los experimentos es lograr sintonizar la energía de una resonancia de Feshbach lo suficientemente cerca del umbral del continuo en un canal abierto para obtener una longitud de dispersión muy grande.

El efecto ocurre en sistemas con al menos dos partículas idénticas, por lo que se estudiaron los sistemas simétricos. Los resultados publicados [100] sobre Efecto Efimov resultaron los primeros en utilizar métodos variacionales para detectarlo. Se comprobó que el efecto puede detectarse con cocientes de masas $\frac{m_1}{m_3} \geq 100$ y deja de ser notable para $\frac{m_1}{m_3} \leq 10$. Estos resultados concuerdan con resultados obtenidos a través de aproximaciones analíticas de campo efectivo para fermiones idénticos [58]. En el capítulo 4 se estudió el efecto en los iones moleculares He_2^{3+} , $He_2^{3+}(\mu^-)$ y $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$. El efecto Efimov es muy notorio en He_2^{3+} mientras que esta ausente en el $He_2^{3+}(\bar{p}^-)$. El en el caso del ión $He_2^{3+}(\mu^-)$ se prueba que soporta 2 estados ligados aunque no se puede determinar si los estados corresponden o no a trímeros de Efimov. El análisis de los cocientes de energías de los diferentes niveles variacionales muestra que es posible detectar la presencia del efecto a través del escaleo de las curvas. Evidentemente se necesita desarrollar una metodología que sustente los resultados, pero los indicios apuntan a que el análisis de ese escaleo puede permitir la detección del efecto en aproximaciones variacionales.

El comportamiento crítico cerca del umbral en sistemas de pocas (1, 2 y 3) partículas con interacciones de corto alcance es un tema de investigación que se ha estudiado desde dos frentes. Los primeros trabajos sobre exponentes y parámetros críticos se realizaron desde la física matemática, mientras que el aporte numérico comenzó solo con estimaciones de parámetros críticos. El método de escaleo finito en mecánica cuántica para el cálculo numérico de exponentes críticos (Finite Size Scaling, FSS) recién fue desarrollado en 1997 [101]. Este método se utilizó en los capítulos 3 y 4 para estimar los exponentes y parámetros críticos en sistemas de tres partículas con interacciones apantalladas (en unos pocos casos se pudo deducir exactamente el valor de los exponentes). Los resultados obtenidos mostraron un acuerdo muy bueno con los trabajos rigurosos preexistentes [3, 4]. Se encontraron inclusive algunos resultados para casos no investigados en profundidad, que aportan información para un estudio detallado de estos sistemas. Un resumen de los resultados de encuentra en el cuadro de la sección 4.2.1.

Los resultados se dividen de acuerdo al umbral de energía que corresponde a un dado sistema. En casos en que el umbral es simple, un solo subsistema con la energía de umbral, el exponente $\alpha \approx 2$ obtenido concuerda con el exacto [3, 4]. La concordancia es mejor en regiones del diagrama alejadas de los cambios de umbral donde la línea crítica pasa de $2-1$ a $2-0$ (con el significado dado en el capítulo 2). Pequeñas diferencias del exponente $\alpha = 2$ en estas regiones pueden deberse a la aproximaciones numéricas de tamaño finito. Sin embargo, en puntos del diagrama donde ocurren los cambios de umbral, el comportamiento crítico no ha sido investigado con mucha profundidad y los comportamientos anómalos encontrados aquí pueden ayudar a comprenderlo. Los puntos en los que el umbral simple se

transforma en cero (tres partículas libres) son *multicríticos* ya que, como se comprobó en los capítulos 3 y 4, el exponente de un umbral cero es $\alpha = 1$.

Los sistemas con partículas idénticas tienen umbrales dobles a los que corresponde un exponente $\alpha = 1$. Este resultado implica que existe un estado ligado en el umbral que caracteriza la forma en que el sistema ioniza. Brevemente puede decirse que la indistinguibilidad de las partículas causa que ambas se mantengan localizadas para energías muy cercanas y hasta iguales a la de umbral. Superando la energía de umbral, el sistema se ioniza en forma abrupta y solo mantiene una de sus partículas localizadas. El diagrama para partículas idénticas también presenta comportamientos anómalos en el exponente crítico. Esto ocurren en un entorno de los puntos donde el umbral doble se transforma en cero. A ambos lados del punto, el exponente es uno, pero en un entorno del mismo el exponente muestra un comportamiento anómalo en el análisis numérico. Estos puntos, guardan cierta semejanza con el punto multicrítico de los diagramas tipo 2 ($\lambda_1^{(c)}, \lambda_2^{(mc)}$) del capítulo 2. La línea 2 – 0 definida en dicho capítulo también se relaciona con este caso, porque coincide con el valor crítico de 1 partícula en los sistemas estudiados.

El trabajo que queda por hacer respecto a exponentes críticos es considerable. A lo largo de esta Tesis se sugirieron varias conexiones entre uno y otro caso de diferentes sistemas, e incluso con el efecto Efimov. Un punto particularmente interesante es determinar las regiones en que los exponentes cambian de 2 a 1. Este cambio en sistemas con potenciales de decaimiento cuadrático ocurre en forma *continua*, e incluso el exponente crece hasta infinito dando lugar al efecto Efimov. Los resultados en sistemas apantallados muestran que los exponentes toman valores en completo acuerdo con las interpretaciones físicas, salvo en regiones donde ocurren cambios fundamentales del sistema. Es válido preguntarse entonces si las variaciones de los exponentes ocurren en forma continua o discreta. Anticipar un resultado de este tipo es más factible desde la física matemática, dado el carácter discreto que puede ocurrir en el cambio.

Los sistemas con exponentes críticos igual a la unidad tienen estados ligados normalizables con la misma energía que el umbral. Superando el umbral estos sistemas se ionizan, pero pueden existir estados embebidos en el continuo que modifican la dinámica de la ionización. Las resonancias son fenómenos tan interesantes como complejos de analizar, que ocurren en muchas áreas de la física. Las investigadas en esta Tesis son las denominadas así en la teoría de dispersión cuántica no relativista. Dentro de éstas, nos limitamos a estudiar las resonancias de forma que ocurren en sistemas con dos electrones en un potencial externo que sirve de modelo para un punto cuántico. Los electrones dentro de puntos cuánticos pueden modelarse mediante la aproximación de masa efectiva, que consiste en describir el punto cuántico como un potencial de corto alcance en el cual los electrones poseen una masa reducida. En el capítulo 5 se caracterizaron los estados ligados y resonancias de dos electrones en un punto cuántico, dentro de la aproximación de masa efectiva.

El Hamiltoniano de un sistema con resonancias de forma en el espectro continuo tiene un espectro variacional muy particular que muestra cruces evitados, indicando la presencia de las resonancias. El análisis del espectro se realizó mediante la fidelidad y la doble ortogonalidad [102]. La fidelidad ha sido utilizada extensivamente en la detección

de transiciones de fase cuánticas y esta es la primera vez que se utiliza en la detección de resonancias y caracterización del espectro variacional. La doble ortogonalidad $DO_n(\lambda)$ es una cantidad especialmente definida en esta Tesis, aportando una nueva herramienta para analizar el espectro variacional. Los resultados numéricos muestran que puede obtenerse $E_r(\lambda)$ con gran precisión. La función doble ortogonalidad $DO_n(\lambda)$ se construyó para detectar los cambios en los estados variacionales e identificar la energía de la resonancia. Los dos métodos utilizados para calcular $E_r(\lambda)$, no dependen de la elección particular del modelo ni del método variacional utilizado, sino que se basan en la capacidad de los autoestados en detectar cambios no analíticos en el espectro.

Una ventaja de los métodos es que pueden utilizarse en problemas con otra dimensionalidad porque están basados en la norma de los autoestados. En este sentido el trabajo futuro incluye comprobar la utilidad de las dos aproximaciones, La fidelidad y la DO , en sistemas con otras características. Un punto clave que resta por investigar, por el momento, es la posibilidad de establecer una relación entre la vida media y las características de la DO y la fidelidad.

Los otros métodos utilizados para computar las energías de las resonancias, tanto la parte real como la imaginaria, fueron el de estabilización y de escaleo complejo. El método de estabilización permite calcular la densidad de estados en un entorno de una resonancia a partir del espectro variacional. El trabajo aportado por esta Tesis para el desarrollo del método es el escaleo que presentan las curvas de densidad de estados obtenidas con los diferentes tamaños de base. Utilizando esta información creemos que se puede obtener el ancho de la resonancia *sin realizar ajustes no lineales*. Los indicios mostrados en el capítulo 5 de este hecho, indican que esta puede ser una herramienta muy útil para extraer toda la información de una resonancia [95].

El último tema que se investigó en esta Tesis es la entropía de Von Neumann en sistemas atómicos. La entropía está estrechamente relacionada con el entrelazamiento entre los electrones y se comprobó que la misma también está ligada a la distancia entre electrones en un punto cuántico. Los estados ligados del Hamiltoniano tienen una entropía suave que muestra una discontinuidad en el umbral del continuo. La entropía de una resonancia que nace de un estado ligado absorbido por el continuo, puede calcularse con los primeros estados variacionales con energías sobre el umbral. En las regiones más alejadas del umbral se propuso una definición de la entropía de una resonancia basada en la extensión compleja de la definición usual para estados ligados. La extensión implica que el operador densidad reducida no es Hermitiano y tiene autovalores complejos, resultando una entropía compleja. Las partes real e imaginaria de la entropía compleja son independientes de θ , lo que soporta la interpretación de la parte real de la entropía compleja como una medida de la cantidad de entrelazamiento de una resonancia.

La definición propuesta para la entropía de una resonancia es producto de la teoría desarrollada para cantidades observables en rotaciones complejas [71]. En la Tesis se hizo una extrapolación natural de los conceptos manejados para observables al caso de resonancias. El mayor sustento de los resultados numéricos es el acuerdo con las definiciones propuestas en [38] para una entropía continua en la región continua del espectro. La teoría y los resultados obtenidos numericamente para la entropía de una resonancia deben ser

analizados y aplicados en otros problemas con el fin de comprobar su utilidad como una medida de entrelazamiento. Un análisis matemático profundo, en lo que se refiere a definiciones rigurosas de la entropía compleja, es una meta para un futuro próximo también.

Este descubrimiento me asombró al principio; pero acabé por acostumbrarme a tales cambios periódicos. Sin embargo, llegó un día en que empecé a avergonzarme de ser el único hombre sin alas, viéndome obligado a guardar yo solo la ciudad con las mujeres y los niños. Y por mucho que pregunté a los habitantes sobre el medio de que habría de valerme para que me saliesen alas en los hombros, nadie pudo ni quiso contestarme. Y me mortificó bastante no ser más que Sindbad el Marino y no poder añadir a mi sobrenombre la condición de aéreo.

Anónimo , “ Las mil y una noches”.

Apéndice A

Elementos de matriz con potencial de Yukawa en base tipo Hylleraas

Damos aquí los elementos de matriz utilizados para el Hamiltoniano de tres partículas,

$$\mathcal{H} = -\frac{\nabla_1^2}{2\mu_1} - \frac{\nabla_2^2}{2\mu_2} - \frac{1}{m_3}\nabla_1 \cdot \nabla_2 + q_1 q_3 \frac{e^{-\sigma r_1}}{r_1} + q_2 q_3 \frac{e^{-\sigma r_2}}{r_2} + q_1 q_2 \frac{e^{-\sigma r_{12}}}{r_{12}} \quad (\text{A.1})$$

que utilizamos en dos capítulos de esta Tesis. Un reescalo del Hamiltoniano en la forma $r \rightarrow \sigma r$ y $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}/\sigma^2$ nos permite escribirlo como

$$\mathcal{H} = -\frac{\nabla_1^2}{2\mu_1} - \frac{\nabla_2^2}{2\mu_2} - \frac{1}{m_3}\nabla_1 \cdot \nabla_2 + q_1 q_3 \frac{e^{-r_1}}{r_1} + q_2 q_3 \frac{e^{-r_2}}{r_2} + q_1 q_2 \frac{e^{-r_{12}}}{r_{12}} \quad (\text{A.2})$$

en donde vemos que solo necesitamos calcular los elementos de matriz para ∇_i^2 , para $\frac{e^r}{r_i}$ y para $\frac{e^{r_{12}}}{r_{12}}$.

Trabajaremos con una base tipo Hylleraas de la forma,

$$\psi(i, j, k, \gamma, \delta) = r_1^i r_2^j r_{12}^k e^{-\gamma r_1 - \delta r_2} \quad (\text{A.3})$$

En el caso en que dos partículas sean idénticas debemos simetrizar la base, se toman entonces como elementos de la misma las funciones simétricas

$$\Phi(i, j, k, \gamma, \delta) = \psi(i, j, k, \gamma, \delta) + \psi(j, i, k, \delta, \gamma). \quad (\text{A.4})$$

Observemos algunas propiedades simples de las ψ , como por ejemplo,

$$\psi(i', j', k', \gamma', \delta') \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = \psi(i' + i, j' + j, k' + k, \gamma' + \gamma, \delta' + \delta). \quad (\text{A.5})$$

Pueden también obtenerse reglas similares respecto de la diferenciación de las ψ ,

$$\frac{\partial}{\partial r_1} \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = i\psi(i-1, j, k, \gamma, \delta) - \gamma\psi(i, j, k, \gamma, \delta) \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial r_{12}} \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = k\psi(i, j, k-1, \gamma, \delta) \quad (\text{A.7})$$

y pueden obtenerse de esta forma el resultado de operar con los elementos del Hamiltoniano. Expresaremos todos los términos del Hamiltoniano como combinación de las funciones de la base. Las integrales correspondientes a las funciones base se encuentran en la sección A.1. Los elementos de matriz de la energía cinética en el caso simétrico son

$$\begin{aligned} \Phi(i', j', k', \gamma', \delta') [\nabla_1^2] \Phi(i, j, k, \gamma, \delta) = \\ = F(i', j', k', \gamma', \delta', i, j, k, \gamma, \delta) + F(i', j', k', \gamma', \delta', j, i, k, \delta, \gamma) + \\ F(j', i', k', \delta', \gamma', i, j, k, \gamma, \delta) + F(j', i', k', \delta', \gamma', j, i, k, \delta, \gamma), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

en donde las funciones F están definidas por,

$$\begin{aligned} F(i', j', k', \gamma', \delta', i, j, k, \gamma, \delta) = & i(i+k+1)\psi(i'+i-2, j'+j, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \\ & -\gamma[2(i+1)+k]\psi(i'+i-1, j'+j, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \\ & +\gamma^2\psi(i'+i, j'+j, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \\ & +k(k+i+1)\psi(i'+i, j'+j, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \\ & -\gamma k\psi(i'+i+1, j'+j, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \\ & -ki\psi(i'+i-2, j'+j+2, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \\ & +\gamma k\psi(i'+i-1, j'+j+2, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Para el término cruzado $\nabla_1 \cdot \nabla_2$, en el caso simétrico tenemos algo de similar complejidad,

$$\Phi(i', j', k', \gamma', \delta') [\nabla_1 \cdot \nabla_2] \Phi(i, j, k, \gamma, \delta) = \quad (\text{A.10})$$

$$= F2(i', j', k', \gamma', \delta', i, j, k, \gamma, \delta) + F2(i', j', k', \gamma', \delta', j, i, k, \delta, \gamma) + \quad (\text{A.11})$$

$$F2(j', i', k', \delta', \gamma', i, j, k, \gamma, \delta) + F2(j', i', k', \delta', \gamma', j, i, k, \delta, \gamma), \quad (\text{A.12})$$

con la definición para $F2$

$$\begin{aligned}
F2(i', j', k', \gamma', \delta', i, j, k, \gamma, \delta) = & \\
= -k[(i+j)/2 + (k+1)]\psi(i'+i, j'+j, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+k\gamma/2\psi(i'+i+1, j'+j, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+k\delta/2\psi(i'+i, j'+j+1, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+j(i-k)/2\psi(i'+i, j'+j-2, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+i(j-k)/2\psi(i'+i-2, j'+j, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+\delta(k-i)/2\psi(i'+i, j'+j-1, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+\gamma(k-j)/2\psi(i'+i-1, j'+j, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
-j\gamma/2\psi(i'+i+1, j'+j-2, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
-i\delta/2\psi(i'+i-2, j'+j+1, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+\gamma\delta/2\psi(i'+i+1, j'+j-1, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+\gamma\delta/2\psi(i'+i-1, j'+j+1, k'+k, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+kj/2\psi(i'+i+2, j'+j-2, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+ki/2\psi(i'+i-2, j'+j+2, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
-k\delta/2\psi(i'+i+2, j'+j-1, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
-k\gamma/2\psi(i'+i-1, j'+j+2, k'+k-2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
-ij/2\psi(i'+i-2, j'+j-2, k'+k+2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+i\delta/2\psi(i'+i-2, j'+j-1, k'+k+2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+j\gamma/2\psi(i'+i-1, j'+j-2, k'+k+2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
-\gamma\delta/2\psi(i'+i-1, j'+j-1, k'+k+2, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta). & \tag{A.13}
\end{aligned}$$

La interacción de las partículas distinguibles $\frac{e^{-r_1}}{r_1}$ en el caso simétrico puede escribirse

$$\begin{aligned}
\Phi(i', j', k', \gamma', \delta') [V_1] \Phi(i, j, k, \gamma, \delta) = & \\
= \psi(i'+i-1, j'+j, k'+k, \gamma'+\gamma+1, \delta'+\delta) & \\
+\psi(i'+j-1, j'+i, k'+k, \gamma'+\delta+1, \delta'+\gamma) & \\
+\psi(j'+i-1, i'+j, k'+k, \delta'+\gamma+1, \gamma'+\delta) & \\
+\psi(j'+j-1, i'+i, k'+k, \delta'+\delta+1, \gamma'+\gamma). & \tag{A.14}
\end{aligned}$$

La interacción entre partículas idénticas toma la forma

$$\begin{aligned}
\Phi(i', j', k', \gamma', \delta') [V_{12}] \Phi(i, j, k, \gamma, \delta) = & \\
= [\psi(i'+i, j'+j, k'+k-1, \gamma'+\gamma, \delta'+\delta) & \\
+\psi(i'+j, j'+i, k'+k-1, \gamma'+\delta, \delta'+\gamma) & \\
+\psi(j'+i, i'+j, k'+k-1, \delta'+\gamma, \gamma'+\delta) & \\
+\psi(j'+j, i'+i, k'+k-, \delta'+\delta, \gamma'+\gamma)]e^{-r_{12}}. & \tag{A.15}
\end{aligned}$$

En el caso no simétrico, en que las tres partículas son distinguibles entre sí, no se simetriza la función de onda. Utilizamos las ψ como funciones de base y obtenemos para la energía cinética

$$\psi(i', j', k', \gamma', \delta') [\nabla_1^2] \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = F(i', j', k', \gamma', \delta', i, j, k, \gamma, \delta) \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \psi(i', j', k', \gamma', \delta') [\nabla_2^2] \psi(i, j, k, \gamma, \delta) &= \psi(i', j', k', \gamma', \delta') [\nabla_1^2] \psi(j, i, k, \delta, \gamma) \\ &= F(i', j', k', \gamma', \delta', j, i, k, \delta, \gamma). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Para la interacción de Yukawa se tiene

$$\psi(i', j', k', \gamma', \delta') \left[\frac{e^{-r_1}}{r_1} \right] \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = \psi(i' + i - 1, j' + j, k' + k, \gamma' + \gamma + 1, \delta' + \delta)$$

$$\psi(i', j', k', \gamma', \delta') \left[\frac{e^{-r_2}}{r_2} \right] \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = \psi(i' + i, j' + j - 1, k' + k, \gamma' + \gamma, \delta' + \delta + 1)$$

$$\psi(i', j', k', \gamma', \delta') \left[\frac{e^{-r_{12}}}{r_{12}} \right] \psi(i, j, k, \gamma, \delta) = \psi(i' + i, j' + j, k' + k - 1, \gamma' + \gamma, \delta' + \delta) e^{-r_{12}}$$

A.1. Integrales de funciones tipo Hylleraas

Analizaremos aquí algunas propiedades de integrales de las funciones de base ψ en el espacio de dos partículas

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi(i, j, k, \gamma, \delta) e^{-\chi r_{12}} \quad (\text{A.18})$$

$$= \int d^3r_1 \int d^3r_2 e^{-(\gamma r_1 + \delta r_2 + \chi r_{12})} r_1^i r_2^j r_{12}^k. \quad (\text{A.19})$$

Reescribiendo la integral anterior, como una integral triple en las variables r_1, r_2, r_{12} , se tiene

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = 8\pi^2 \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} e^{-(\gamma r_1 + \delta r_2 + \chi r_{12})} r_1^{i+1} r_2^{j+1} r_{12}^{k+1}. \quad (\text{A.20})$$

Las integrales de la Ec. (A.20) pueden obtenerse partir de una sola integral base y de sus derivadas. La integral en cuestión es

$$I_{-1,-1}^{-1}(\gamma, \delta, \chi) = 8\pi^2 \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} e^{-(\gamma r_1 + \delta r_2 + \chi r_{12})} \quad (\text{A.21})$$

$$= \frac{(4\pi)^2}{(\delta + \gamma)(\gamma + \chi)(\chi + \delta)} \quad (\text{A.22})$$

La forma de obtener las demás integrales es muy simple. Al derivar respecto a γ, δ o χ se logra que aumente el índice de r_1, r_2 o r_{12} respectivamente. La relación que encontramos entre la integral de la Ec. (A.21) y las demás es

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = (-1)^{i+j+k+1} \partial_\gamma^{i+1} \partial_\delta^{j+1} \partial_\chi^{k+1} I_{-1,-1}^{-1}(\gamma, \delta, \chi). \quad (\text{A.23})$$

Para evitar cálculos de integrales innecesariamente largos, puede hacerse un pequeño truco. Si en (A.20) se realizan los cambios de variables $r_1 \rightarrow \gamma r_1, r_2 \rightarrow \gamma r_2$ y $r_{12} \rightarrow \gamma r_{12}$, se obtiene la siguiente relación

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \frac{1}{\gamma^{i+j+k+6}} I_{i,j}^k(1, \eta, \zeta), \quad (\text{A.24})$$

en donde $\eta = \delta/\gamma$ y $\zeta = \chi/\gamma$. Con lo cual podemos obtener $I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi)$ a partir de $I_{i,j}^k(\bar{\gamma}, \bar{\delta}, \bar{\chi})$, en donde $\eta = \delta/\gamma = \bar{\delta}/\bar{\gamma}$ y $\zeta = \chi/\gamma = \bar{\chi}/\bar{\gamma}$. Podemos movernos en el espacio de los parámetros a η y ζ constantes, ya que según (A.24) la relación que se obtiene es

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \left(\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\right)^{i+j+k+6} I_{i,j}^k(\bar{\gamma}, \bar{\delta}, \bar{\chi}). \quad (\text{A.25})$$

Otras relaciones útiles que pueden obtenerse son

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi)(i+j+k+6) = \gamma I_{i+1,j}^k(\gamma, \delta, \chi) + \delta I_{i,j+1}^k(\gamma, \delta, \chi) + \chi I_{i,j}^{k+1}(\gamma, \delta, \chi) \quad (\text{A.26})$$

Esta misma ecuación puede escribirse en forma diferencial utilizando (A.23), de los que se obtiene

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi)(i + j + k + 6) = - \left(\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} + \delta \frac{\partial}{\partial \delta} + \chi \frac{\partial}{\partial \chi} \right) I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi), \quad (\text{A.27})$$

la cual tiene solución haciendo separación de variables. Se tiene

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \sum_{C_\alpha, C_\beta, C_\zeta} \alpha^{-C_\alpha} \beta^{-C_\beta} \zeta^{-C_\zeta} B_{ijk}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta) \quad (\text{A.28})$$

en donde $\alpha = (\gamma + \delta)$, $\beta = (\gamma + \chi)$, $\zeta = (\delta + \chi)$. También se debe cumplir la condición $C_\alpha + C_\beta + C_\zeta = i + j + k + 6$. En breve se verá que los coeficientes $B_{ijk}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta)$ son enteros. Para encontrar la solución, o sea los coeficientes, hicimos uso de (A.23), según la cual

$$\partial_\gamma I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = -I_{i+1,j}^k(\gamma, \delta, \chi), \quad (\text{A.29})$$

y utilizando (A.28) pueden obtenerse las relaciones de recurrencia para los coeficientes

$$\begin{aligned} B_{i+1,j,k}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta) &= (C_\alpha - 1)B_{ijk}(C_\alpha - 1, C_\beta, C_\zeta) + (C_\beta - 1)B_{ijk}(C_\alpha, C_\beta - 1, C_\zeta) \\ B_{i,j+1,k}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta) &= (C_\alpha - 1)B_{ijk}(C_\alpha - 1, C_\beta, C_\zeta) + (C_\zeta - 1)B_{ijk}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta - 1) \\ B_{i,j,k+1}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta) &= (C_\beta - 1)B_{ijk}(C_\alpha, C_\beta - 1, C_\zeta) + (C_\zeta - 1)B_{ijk}(C_\alpha, C_\beta, C_\zeta - 1) \end{aligned}$$

Esta forma de expresar las integrales como relaciones de recurrencia en algunas ocasiones da mejores resultados y convergencia que el cálculo directo de las integrales (si ese que se puede realizar el cálculo directo). Para esta Tesis sin embargo resultó más práctico utilizar la forma exacta de los coeficientes que se puede obtener si caemos en la cuenta de que,

$$\partial_\gamma I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \partial_\alpha I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) + \partial_\beta I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi), \quad (\text{A.30})$$

luego, reescribiendo la Ec. (A.23) se obtiene

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = (-1)^{i+j+k+1} \sum_{l=0}^{i+1} \sum_{m=0}^{j+1} \sum_{n=0}^{k+1} \binom{i+1}{l} \binom{j+1}{m} \binom{k+1}{n} \times \\ \partial_\alpha^{j+1+l-m} \partial_\beta^{i+1+n-l} \partial_\zeta^{k+1+m-n} I_{-1,-1}^{-1}(\gamma, \delta, \chi)$$

pero por otro lado $I_{-1,-1}^{-1}(\gamma, \delta, \chi) = \frac{1}{\alpha\beta\zeta}$, y notando que $\partial_\alpha^n (1/\alpha) = \frac{n!(-1)^n}{\alpha^{n+1}}$ se obtiene el resultado

$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \sum_{l=0}^{i+1} \sum_{m=0}^{j+1} \sum_{n=0}^{k+1} \binom{i+1}{l} \binom{j+1}{m} \binom{k+1}{n} \times \\ \frac{(j+1+l-m)!(i+1+n-l)!(k+1+m-n)!}{\alpha^{j+2+l-m} \beta^{i+2+n-l} \zeta^{k+2+m-n}}$$

Otra forma de escribir lo anterior es sacar fuera de los signos de sumatoria a los factores que no dependen de ellos. De esta forma, se evita calcular productos innecesariamente.

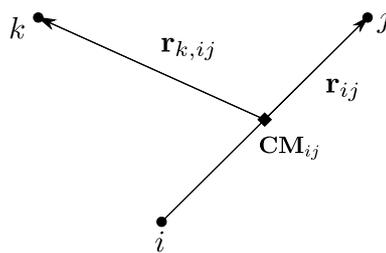
$$I_{i,j}^k(\gamma, \delta, \chi) = \frac{1}{\alpha^{j+2}\beta^{i+2}\zeta^{k+2}} \sum_{l=0}^{i+1} \binom{i+1}{l} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^l \sum_{m=0}^{j+1} \binom{j+1}{m} (j+1+l-m)! \left(\frac{\alpha}{\zeta}\right)^m \times \\ \sum_{n=0}^{k+1} \binom{k+1}{n} (i+1+n-l)!(k+1+m-n)! \left(\frac{\zeta}{\beta}\right)^n$$

Apéndice B

Ecuaciones de Fadeev y el Efecto Efimov

En este apéndice nos abocaremos a la derivación analítica por medio de la cual se puede llegar a explicar la aparición del Efecto Efimov en sistemas de tres partículas. Para lograrlo necesitaremos varias herramientas como las coordenadas hiperesféricas, las ecuaciones de Fadeev y el análisis del espectro energético de una partícula en potenciales con decaimiento cuadrático ($\frac{1}{r^2}$). Las dos primeras secciones están dedicadas a las coordenadas hiperesféricas y la ecuación de Fadeev de baja energía y fueron obtenidas casi en su totalidad de [57]. La última sección sobre potenciales con decaimiento cuadrático es en parte un extracto de [1] y contiene también contribuciones originales, sobre todo en el caso atractivo que es el de más interés para el efecto Efimov.

B.1. Coordenadas Hiperesféricas



$$r_{ij} = \sqrt{2}R \sin \alpha_k ; r_{k,ij} = \sqrt{3/2}R \cos \alpha_k$$

$$R = \frac{1}{2}r_{ij}^2 + \frac{2}{3}r_{k,ij}^2$$

Figura B.1: Coordenadas Hiperesféricas.

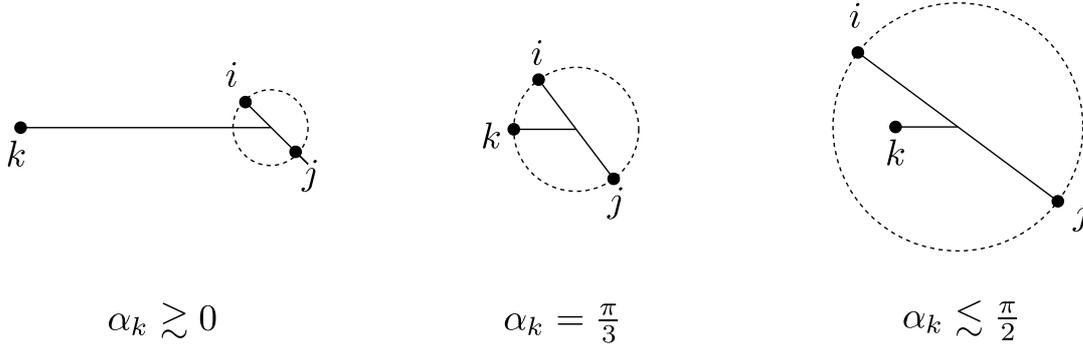


Figura B.2: Relación entre las distancias y los hiper-ángulos α_i .

B.2. Ecuaciones de Fadeev

Las ecuaciones de Fadeev se utilizan en física nuclear para sacar ventaja de algunas simplificaciones que aparecen en sistemas de tres cuerpos. Aquí haremos un *Tour de force* para llevar al lector desde las ecuaciones de Fadeev hasta la interacción efectiva $\frac{1}{R^2}$ que da origen al Efecto Efimov. Seguiremos muy de cerca el trabajo de Fedorov *et. al.* [37]. Como suposición ligeramente restrictiva usaremos que

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = V(r_{12}) + V(r_{23}) + V(r_{31}). \quad (\text{B.1})$$

Las ecuaciones de Fadeev son un conjunto de ecuaciones que generan soluciones para la ecuación de Schrödinger de 3 cuerpos de la forma [37]

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \psi^{(1)}(\mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{1,23}) + \psi^{(2)}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{2,31}) + \psi^{(3)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{3,12}). \quad (\text{B.2})$$

Las ecuaciones de Fadeev son

$$\left(T_R + T_{\alpha_1} + \frac{\Lambda_{1,23}^2}{2m R^2} \right) \psi^{(1)} + V(r_{23})(\psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \psi^{(3)}) = E\psi^{(1)} \quad (\text{B.3})$$

junto con las obtenidas permutando cíclicamente los índices. Los operadores $T_R + T_{\alpha_1}$ y $\frac{\Lambda_{1,23}^2}{2m R^2}$ corresponden a la energía cinética y el momento angular generalizado en coordenadas hiperesféricas (ver [57]). La suma de las tres ecuaciones es claramente la ecuación de Schrödinger original. Si además ocurre que $\psi^{(2)} = \psi^{(3)} = 0$ y tomamos a $\psi^{(1)}$ como una función solo de r_{12} , entonces la ecuación (B.3) es la de dos partículas para 1 y 2. Esto muestra que las ecuaciones de Fadeev son capaces tener en cuenta las correlaciones de dos partículas en los casos en que 1 y 2 se encuentran ambas juntas y lejos de 3.

Para resolver las ecuaciones planteamos la descomposición en armónicos esféricos, pero para simplificar las cuentas solo tendremos en cuenta los términos con $l = 0$. Con esta suposición la función de onda tiene la forma

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \psi(R, \alpha_1) + \psi(R, \alpha_2) + \psi(R, \alpha_3) \quad (\text{B.4})$$

Las ecuaciones (B.3) toman entonces la forma más simplificada, sin momento angular,

$$(T_R + T_{\alpha_1} - E)\psi(R, \alpha_1) + V(\sqrt{2}R \operatorname{sen} \alpha_1)[\psi(R, \alpha_1) + \psi(R, \alpha_2) + \psi(R, \alpha_3)] = 0. \quad (\text{B.5})$$

Las ecuaciones obtenidas al permutar cíclicamente los índices en (B.5), trabajan sobre coordenadas diferentes (ver apéndice B). Si trabajamos con una sola ecuación para α_1 tenemos que obtener las coordenadas α_2 y α_3 como función de la 1. Esto se hace con el siguiente operador integral que permite expresar $\psi(R, \alpha_2)$ y $\psi(R, \alpha_3)$ como función de α_1 ,

$$\psi_2(R, \alpha_1) = \psi_3(R, \alpha_1) = \frac{2}{\sqrt{3}} \int_{\phi - \alpha_1}^{\pi/2 - |\pi/2 - \phi - \alpha_1|} \frac{\operatorname{sen} 2\alpha'}{\operatorname{sen} 2\alpha} \psi(R, \alpha') d\alpha' \quad (\text{B.6})$$

en donde ϕ es un parámetro que depende de las masas. Para el caso de masas iguales vale $\pi/3$. Utilizando esto en (B.5) obtenemos lo que se conoce como la *ecuación de Fadeev de baja energía*

$$(T_R + T_\alpha - E)\psi(R, \alpha) = -V(\sqrt{2} \operatorname{sen} \alpha) \left[\psi(R, \alpha) + \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{\pi/3 - \alpha_1}^{\pi/2 - |\pi/6 - \alpha_1|} \frac{\operatorname{sen} 2\alpha'}{\operatorname{sen} 2\alpha} \psi(R, \alpha') d\alpha' \right]. \quad (\text{B.7})$$

Una forma de resolver esta ecuación es la de utilizar una *expansión hiperesférica*. Para cada valor de R la función $\psi(R, \alpha)$ se expande en una base completa de funciones $\phi_n(R, \alpha)$ del hiperángulo α ,

$$\psi(R, \alpha) = \frac{1}{R^{5/2} \operatorname{sen} 2\alpha} \sum_n f_n(R) \phi_n(R, \alpha) \quad (\text{B.8})$$

La divergencia que se observa en el prefactor de la suma para $\alpha = 0$ y $\alpha = \pi/2$ impone que $\phi_n(R, \alpha)$ debe anularse en los puntos extremos. Las $\phi_n(R, \alpha)$ son soluciones de la ecuación integro-diferencial en una sola variable α ,

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \lambda_n(R) \right] \phi_n(R, \alpha) = -\frac{2m R^2}{\hbar^2} V(\sqrt{2}R \operatorname{sen} \alpha) \left[\phi_n(R, \alpha) + \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{\pi/3 - \alpha_1}^{\pi/2 - |\pi/6 - \alpha_1|} \frac{\operatorname{sen} 2\alpha'}{\operatorname{sen} 2\alpha_1} \phi_n(R, \alpha') d\alpha' \right]. \quad (\text{B.9})$$

En esta ecuación la variable R es un parámetro y los autovalores $\lambda_n(R)$ son funciones de dicho parámetro. Luego, los autovalores $\lambda_n(R)$ definen los potenciales para cada canal de la variable hiperradial,

$$V_n(R) = [\lambda_n(R) - 4] \frac{\hbar^2}{2m R^2}. \quad (\text{B.10})$$

Este procedimiento es completamente análogo al que se realiza en la aproximación de Born-Oppenheimer de una molécula diatómica. Allí se resuelve el Hamiltoniano electrónico y se obtienen las energías $\mathcal{E}_n(R)$ como función de la distancia entre los núcleos atómicos R . Las energías obtenidas luego representan los potenciales de interacción entre los núcleos, definiendo diferentes *canales* de interacción $V_n(R)$.

El lector habrá notado que el operador integral en la parte derecha de la Ec. (B.9) hace que el Hamiltoniano no sea Hermitiano. A causa de esto las autofunciones a diferentes autovalores no son ortogonales¹ y sus productos internos definen la matriz,

$$G_{nm}(R) = \int_0^{\pi/2} \phi_n^*(R, \alpha) \phi_m(R, \alpha) d\alpha. \quad (\text{B.11})$$

Finalmente, insertamos la expansión de ψ mostrada en la Ec. (B.8) en la Ec. (B.7), proyectamos sobre $\phi_n^*(R, \alpha)$ y multiplicamos por la inversa de $G_{nm}(R)$ para obtener el conjunto de ecuaciones acopladas,

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{15}{4R^2} \right) + V_n(R) \right] f_n(R) + \sum_m \left[2P_{nm}(R) \frac{\partial}{\partial R} + Q_{nm}(R) \right] f_m(R) = E f_n R, \quad (\text{B.12})$$

en donde los potenciales de acople están definidos por,

$$P_{nm}(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k G_{nk}^{-1}(R) \int_0^{\pi/2} \phi_k^*(R, \alpha) \frac{\partial}{\partial R} \phi_m(R, \alpha) d\alpha, \quad (\text{B.13})$$

$$Q_{nm}(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k G_{nk}^{-1}(R) \int_0^{\pi/2} \phi_k^*(R, \alpha) \frac{\partial^2}{\partial R^2} \phi_m(R, \alpha) d\alpha. \quad (\text{B.14})$$

El último paso que nos resta para llegar a una interacción efectiva que va como $\frac{1}{R^2}$ es suponer que los autovalores $\lambda_n(R)$ varían muy lentamente con R . Si estos no dependieran en absoluto de R , entonces los potenciales de acople $P_{nm}(R)$ y $Q_{nm}(R)$ se anulan. Podemos entonces suponer que para regiones de R en que los autovalores $\lambda_n(R)$ varían lentamente, las soluciones pueden ser bien aproximadas por la ecuación

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{15}{4R^2} \right) + V_n(R) \right] f_n(R) \approx E f_n(R). \quad (\text{B.15})$$

En el apéndice B.3 puede verse que las soluciones para los potenciales atractivos con interacciones de largo alcance de la forma $\frac{1}{R^2}$ presentan el espectro típico del Efecto Efimov. La forma particular de las constantes de acople y potenciales de cada canal será dependiente de las simetrías del problema (masas relativas y cargas), y estas son las que determinan si el efecto está presente o no.

B.3. Potenciales unidimensionales con alcance $\frac{\Lambda}{r^2}$

La ecuación de Schrödinger para una partícula en un potencial de la forma $\frac{\Lambda}{r^2}$ no soporta estados ligados si $\Lambda > 0$ y el Hamiltoniano no es acotado por debajo si $\Lambda < 0$. Estos dos comportamientos son causados por la divergencia en el origen. En este apéndice estudiaremos el comportamiento de las soluciones de la ecuación de Schrödinger con potenciales que decaen como $\frac{\Lambda}{r^2}$ si $r \rightarrow \infty$ pero son finitos en el origen.

¹En el apéndice F se trata este problema para matrices no Hermitianas con un poco más de detalle.

B.3.1. Caso repulsivo: $\Lambda > 0$

El potencial tiene la forma

$$v(r) = \begin{cases} \lambda_1 V(r) & \text{si } r < R \\ \frac{\Lambda}{r^2} & \text{si } r > R, \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

en donde $V(r)$ es un potencial atractivo (< 0) y acotado. La ecuación radial reducida de Schrödinger para la región $r > R$ es entonces

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \left(\frac{2\Lambda}{r^2} + k^2 \right) \right] \psi_{>}(kr) = 0 \quad ; \quad r > R, \quad (\text{B.17})$$

en donde $k = \sqrt{2|E|}$. Utilizando la parametrización $\Lambda = \nu(\nu + 1)/2$ se obtiene

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \left(\frac{\nu(\nu + 1)}{r^2} + k^2 \right) \right] \psi_{>}(kr) = 0 \quad ; \quad r > R. \quad (\text{B.18})$$

En la Ec. (B.18) identificamos a ν con el momento angular l de una onda plana libre (si ν toma valores enteros). Las soluciones de la Ec. (B.18) tienen la forma $\sqrt{r}Z_{\nu+1/2}(ikr)$ en donde Z son funciones de Bessel de primer, segundo o tercer tipo. La única solución que tiene decaimiento exponencial para $r \rightarrow \infty$ es la función K de Bessel,

$$\psi_{>}(kr) = \mathcal{N}\sqrt{r}K_{\nu+1/2}(kr) \quad ; \quad r > R \quad (\text{B.19})$$

Si la solución corresponde a un estado ligado debemos verificar que sea normalizable, lo que requiere que la integral

$$\int_R^\infty K_{\nu+1/2}^2(kr) r dr, \quad (\text{B.20})$$

no diverja. El comportamiento de $K_{\nu+1/2}(kr)$ en el límite $r \rightarrow \infty$,

$$K_{\nu+1/2} \sim \frac{e^{-kr}}{\sqrt{r}} \quad ; \quad r \rightarrow \infty, \quad (\text{B.21})$$

es independiente del valor de $\nu > 0$ y por lo tanto es normalizable para todo valor de $k > 0$. El caso particular con $k = 0$ debe ser estudiado por separado. La Ec. (B.18) puede resolverse fácilmente en el caso $k = 0$ y las soluciones son de la forma $1/r^\nu$ y $r^{\nu+1}$. La solución $r^{\nu+1}$ diverge en el límite $r \rightarrow \infty$, entonces la función de onda toma la forma $\psi_{>}(E = 0, r) = \frac{\mathcal{N}}{r^\nu}$. La condición de normalización para esta función

$$\int_R^\infty \frac{1}{r^{2\nu}} dr < \infty, \quad \Rightarrow \quad \nu > 1/2 \quad (\text{B.22})$$

Este resultado fue obtenido con anterioridad [3, 1], para potenciales de corto alcance las ondas s no soportan estados ligados en el umbral, pero se tienen ondas de momento angular l ($l \geq 1$).

El comportamiento asintótico de la energía, para $k \rightarrow 0$, define el exponente α . Si $\nu < 1/2$, el estado normalizable en el umbral asegura que $\alpha = 1$ [3]. Si $\nu \leq 1/2$, necesitamos más información sobre el potencial $V(r)$ para obtener la forma asintótica de la energía. Sin embargo, como hemos recalado a lo largo de esta Tesis, asumimos que el comportamiento crítico (exponentes) cerca del umbral esta determinado por el alcance del potencial. Haciendo uso de esta hipótesis elegimos un potencial $V(r) = -1$ para obtener resultados de aplicación general. Entonces, la solución de la ecuación de Schrödinger para $r < R$ toma la forma

$$\psi_{<}(\kappa r) = \mathcal{C} \sin(\kappa r) \quad ; \quad \kappa = \sqrt{2(\lambda_1 + E)} \quad (\text{B.23})$$

en donde se pide que

$$\mathcal{N} = \frac{\sin(\kappa R)}{\sqrt{R} K_{\nu+1/2}(kR)} \mathcal{C} \quad (\text{B.24})$$

para que la función de onda sea continua en $r = R$. Como $\Lambda > 0$ y $V(r) < 0$ solo pueden existir estados ligados para $E \geq -\lambda_1$, de modo que κ esta bien definida. A partir de la continuidad de la derivada en $r = R$ puede obtenerse una ecuación trascendental para E

$$\kappa \cos(\kappa R) = \frac{\sin(\kappa R)}{\sqrt{R} K_{\nu+1/2}(kR)} \left(\frac{K_{\nu+1/2}(kR)}{2\sqrt{R}} + k\sqrt{R} K'_{\nu+1/2}(kR) \right)$$

o, utilizando relaciones estándar para funciones de Bessel y sus derivadas,

$$\frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} = \nu + 1 - \frac{kR K_{\nu+3/2}(kR)}{K_{\nu+1/2}(kR)} \quad (\text{B.25})$$

Para poder estudiar el comportamiento asintótico de la energía se necesita la expansión de $K_\mu(x)$ para $x \rightarrow 0$,

$$K_\mu(x) \sim \frac{1}{2} \Gamma(\mu) \left(\frac{2}{x} \right)^\mu \left[1 + \frac{\Gamma(-\mu)}{4^\mu \Gamma(\mu)} x^{2\mu} + \frac{x^2}{4(1-\mu)} + O(x^4, x^{2\mu+2}) \right] \quad \text{para } x \rightarrow 0, \quad (\text{B.26})$$

de la que se obtiene,

$$\frac{kR K_{\nu+3/2}(kR)}{K_{\nu+1/2}(kR)} \sim (2\nu + 1) \left[1 + \frac{(2\nu + 1) \Gamma(1/2 - \nu)}{4^{\nu+1} \Gamma(1/2 + \nu)} (kR)^{2\nu+1} + O(k^2) \right] \quad \text{para } k \rightarrow 0. \quad (\text{B.27})$$

El valor crítico de la constante de acople $\lambda_1^{(c)}$, esta dado por la solución de la Ec. (B.25) con $k = 0$

$$\frac{\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} R}{\tan\left(\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} R\right)} = -\nu \quad (\text{B.28})$$

Aquí recalamos que $\lambda_1^{(c)}$ depende del potencial $V(r)$, pero el exponente α es universal. Para estudiar el comportamiento de la energía en un entorno de $\lambda_1^{(c)}$ es útil definir

$$\lambda_1 = \lambda_1^{(c)} + \epsilon \quad ; \quad k = k_0 \epsilon^{\alpha/2}$$

y expandir la Ec. (B.25) en una serie de potencias de ϵ . El orden cero es la Ec. (B.28), y el siguiente orden en ambos lados es

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left[k_0 R \left(\frac{1}{\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} \tan\left(\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} R\right)} - \frac{R}{\sin^2\left(\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} R\right)} \right) \right] \epsilon = \\ = \frac{(2\nu+1)^2 \Gamma(1/2-\nu)}{4^{\nu+1} \Gamma(1/2+\nu)} (k_0 R)^{2\nu+1} \epsilon^{\alpha(2\nu+1)/2}. \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Igualando las potencias de ϵ se tiene

$$\alpha = \frac{2}{2\nu+1} \Rightarrow \alpha(\nu=0) = 2 \quad ; \quad \alpha(\nu) \rightarrow 1 \text{ para } \nu \rightarrow 1/2. \quad (\text{B.30})$$

En el caso $\nu = 1/2$ debe procederse con cuidado por que la Ec. (B.26) no es válida para $\mu = 1$, de modo que reemplazamos la Ec. (B.27) por

$$\frac{kR K_2(kR)}{K_1(kR)} \sim 2 - (kR)^2 \ln(kR) + O(k^2) \quad \text{para } k \rightarrow 0. \quad (\text{B.31})$$

A partir de esta ecuación se obtiene $|E| \ln(|E|) \sim \epsilon$. Invirtiendo esta relación resulta en $|E| \sim \epsilon / \ln(\epsilon)$, de modo que para $\nu = 1/2$

$$\alpha(\nu = 1/2) = 1_{\log}.$$

B.3.2. Caso Atractivo: $\Lambda < 0$

Utilizando la misma parametrización que el caso repulsivo, se tiene el siguiente mapeo

$$\begin{aligned} \nu \in [-1/2, 0] & \Rightarrow \Lambda \in [-1/8, 0] \\ \nu \in [-1/2, -1/2 + ib] & \Rightarrow \Lambda \in [-\infty, -1/8] \end{aligned}$$

con $b > 0$. El mapeo se muestra en la Figura (B.3).

Las soluciones en las dos regiones para $k > 0$ y $r > R$ son

$$\begin{aligned} \psi_{>}(kr) &= \mathcal{N} \sqrt{r} K_{\nu+1/2}(kr) & \nu \in [-1/2, 0] \\ \psi_{>}(kr) &= \mathcal{N} \sqrt{r} K_{ib}(kr) & \nu \in [-1/2, -1/2 + ib] \end{aligned}$$

La condición de normalización se cumple aún para $\nu = -1/2$ porque el comportamiento $r \rightarrow \infty$ es independiente de ν y se excluye el origen. Para $k = 0$ ($E = 0$), realizamos

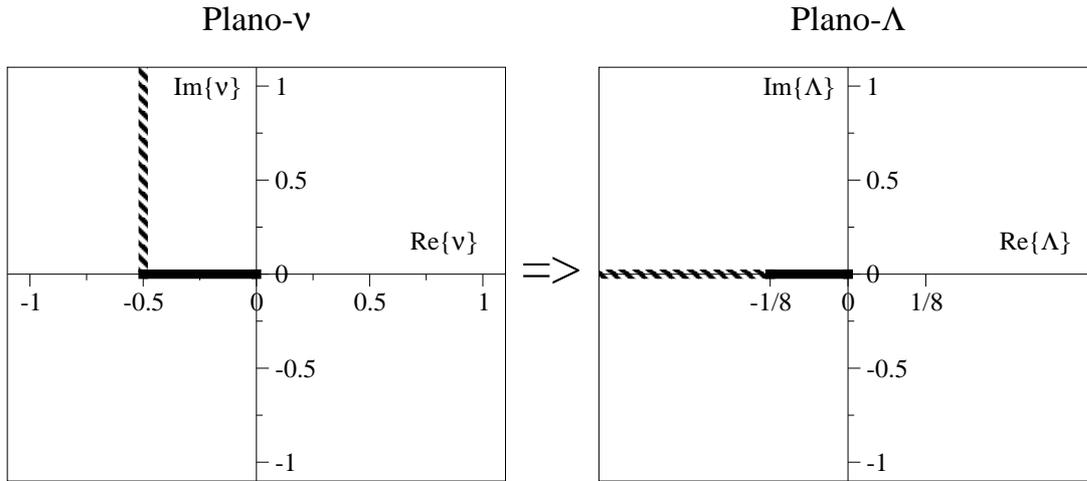


Figura B.3: El mapeo $\Lambda \leftrightarrow \nu$

el mismo análisis que en el caso repulsivo pero trabajando con las dos regiones de ν por separado.

Las soluciones a la ecuación para $k = 0$ son las mismas en ambas regiones

$$\psi_{>}(kr) = \left\{ \frac{1}{r^\nu}, r^{\nu+1} \right\} \quad (\text{B.32})$$

Para $\nu \in [-1/2, 0]$ ambas soluciones divergen cuando $r \rightarrow \infty$, de modo que no hay estados ligados en el umbral.

Para $\nu \in [-1/2, -1/2 + ib]$ las soluciones pueden reescribirse en la forma

$$\psi_{>}(kr) = \sqrt{r} \{ e^{-i \ln(r)b}, e^{i \ln(r)b} \} \quad (\text{B.33})$$

Nuevamente no existe una función de onda normalizable para $k = 0$ y por lo tanto no los hay para toda la región atractiva $\Lambda < 0$.

Veamos que sucede con el exponente α estudiando las dos regiones de ν por separado.

Para $\nu \in [-1/2, 0]$ es análisis que se hizo en el caso repulsivo sigue siendo cálido, de modo que el exponente se comporta como

$$\alpha = \frac{2}{2\nu + 1} \Rightarrow \alpha(\nu = 0) = 2 ; \alpha(\nu) \rightarrow \infty \text{ para } \nu \rightarrow -1/2. \quad (\text{B.34})$$

El caso particular de $\nu = -1/2$ debe estudiarse por separado y corresponde a la solución $K_0(kr)$, la que tiene un comportamiento $K_0(kr) \sim -\ln(k)$ cuando $k \rightarrow 0$. Reemplazando esto en la Ec. (B.29) se obtiene

$$k \sim e^{-c/\varepsilon} \text{ for } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Este comportamiento puede relacionarse con $\alpha = \infty$, ya que decae más rápido que cualquier potencia de ε .

Para $\nu \in [-1/2, -1/2+ib]$ utilizamos otra expansión de $K_\mu(x)$ ya que μ es imaginario. Para $z \rightarrow 0$

$$K_{ib}(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{b \sinh(\pi b)}} \sin [b \ln(z/2) - \arctan(\gamma)]$$

en donde

$$\gamma = \arg(\Gamma(1+ib)) = -i \left(\frac{\Gamma(1+ib) - \Gamma(1-ib)}{\Gamma(1+ib) + \Gamma(1-ib)} \right).$$

También se necesita evaluar el comportamiento asintótico de $K_{1+ib}(z)$,

$$K_{1+ib}(z) = \frac{\pi b}{z} \left(\frac{2}{z} \right)^{ib} \frac{1}{\Gamma(1+ib) \sinh(\pi b)}.$$

Utilizando estas relaciones en la Ec. (B.25), se obtiene la ecuación trascendental

$$\frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} = 1/2 + ib + \sqrt{\frac{b^3 \pi}{\sinh(\pi b)}} \left(\frac{2}{KR} \right)^{ib} \frac{1}{\Gamma(1+ib) \sinh(\pi b)} \frac{1}{\sin [b \ln(KR/2) - \arctan(\gamma)]} \quad (\text{B.35})$$

Dado que el lado izquierdo es siempre real, entonces la parte imaginaria del lado derecho debe anularse. Esto puede chequearse evaluándola

$$\Im \left(\frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} \right) = b + \frac{1}{|\Gamma(1+ib)|} \sqrt{\frac{b^3 \pi}{\sinh(\pi b)}} \frac{\sin \left(\arg \left\{ \left(\frac{2}{KR} \right)^{ib} \frac{1}{\Gamma(1+ib)} \right\} \right)}{\sin [b \ln(KR/2) - \arctan(\gamma)]} \quad (\text{B.36})$$

pero como,

$$\arg \left\{ \left(\frac{2}{KR} \right)^{ib} \frac{1}{\Gamma(1+ib)} \right\} = -b \ln \left(\frac{KR}{2} \right) + \arctan(\gamma),$$

y $|\Gamma(1+ib)|^2 = \frac{\pi b}{\sinh(\pi b)}$ [44], se obtiene $\Im \left(\frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} \right) = 0$.

Para la parte real se tiene que

$$\frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} = 1/2 + \frac{b}{\tan [b \ln(KR/2) - \arctan(\gamma)]} \quad (\text{B.37})$$

Luego, utilizando la relación $\Gamma(az+c) \sim \sqrt{2\pi} e^{-az} (az)^{az+c-1/2}$ para $\arg(z) < \pi$ [44], con $z = ib, a = 1, c = 1$, se obtiene

$$\Gamma(1+ib) \sim \sqrt{2\pi b} e^{-b\pi/2} e^{ib(\ln(b)-1) + \pi/8}.$$

Esto permite calcular $\gamma = \arg(\Gamma(1+ib)) = b(\ln(b)-1) + \pi/8$, y reemplazando en la Ec. (B.37) se obtiene la ecuación final

$$\frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} = 1/2 + \frac{b}{\tan [b (\ln(\frac{KR}{2b}) - 1) - \pi/8]} \quad (\text{B.38})$$

Esta expresión tiene muchas divergencias para $|E| \rightarrow 0$ en el lado derecho. En el lado izquierdo, el límite está bien definido

$$\lim_{|E| \rightarrow 0} \frac{\kappa R}{\tan(\kappa R)} = \frac{\sqrt{2\lambda_1} R}{\tan(\sqrt{2\lambda_1} R)},$$

aún para $\lambda_1 \rightarrow 0$, donde vale 1.

Para mayor simplicidad trabajaremos con $\lambda_1 \in (-\infty, |\Lambda|/R^2]$. Para $\lambda_1 \rightarrow -\infty$, el lado izquierdo de la Ec. (B.38) tiende a $\sqrt{|\lambda_1|}$. Por otro lado, las energías donde ocurren las divergencias del lado derecho tienen la forma

$$|E_n| = \frac{2b^2}{R^2} e^{\pi(8n+1)/(4b)+2}. \quad (\text{B.39})$$

De modo que para todo b , en un entorno de estas divergencias, se tienen soluciones de la Ec. (B.38). Esto es cierto aún con $\lambda_1 \rightarrow -\infty$. Si $b \neq 0$, esto implica que los estados nunca son absorbidos por el umbral del continuo $|E| = 0$, y hay un punto de acumulación.

Analicemos que sucede si $b \rightarrow 0$. Las soluciones a la Ec. (B.38) siempre se encuentran en un entorno de las energías $|E_n|$, aunque estas no pueden tener energías menores que el fondo del potencial $\frac{|\Lambda|}{R^2} = \frac{1+4b^2}{8R^2}$. Esta relación restringe los valores de n para cada valor de b ,

$$n < \frac{b}{2\pi} \left[\ln \left(\frac{1+4b^2}{16b^2} \right) - 2 \right] - \frac{1}{8}.$$

Para $b \rightarrow 0$ se obtiene que $n \leq -1$. En un entorno de $b \sim 0$, $n \leq -1$, y las energías $|E_n|$ tienen un decaimiento exponencial, como se ve en la Ec. (B.39). Esto significa que aún cuando el lado derecho de la Ec. (B.38) tiene muchas soluciones para un dado λ_1 , si $b \rightarrow 0$ todas ellas son absorbidas por el umbral del continuo con un exponente $\alpha = \infty$, y $\lambda_1^{(c)}$ dado por la ecuación $\frac{\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} R}{\tan(\sqrt{2\lambda_1^{(c)}} R)} = 1/2$. El diagrama de estabilidad se muestra en la Figura (B.4).

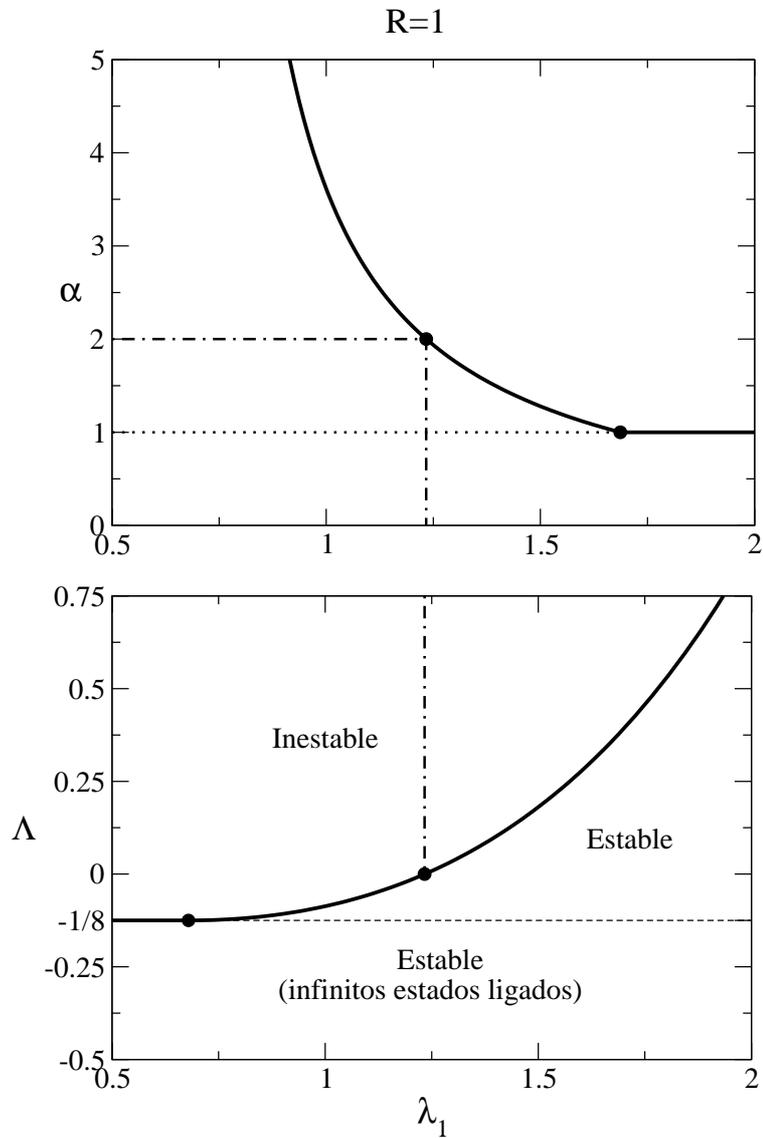


Figura B.4: Diagrama de estabilidad (λ_1, Λ) y el valor del exponente α como función de λ_1 .

Apéndice C

Elementos de Matriz modelo de 1 partícula

Calculamos aquí los elementos de matriz utilizados en el modelo de una partícula del capítulo 5.1. El Hamiltoniano para el modelo tiene la forma

$$\mathcal{H} = -\frac{\nabla^2}{2} - V_0 e^{-r} + \lambda e^{-\beta r}. \quad (\text{C.1})$$

Para construir la matriz del Hamiltoniano en una base solo se necesita conocer la representación de $-\frac{\nabla^2}{2}$ y de $e^{-\beta r}$. Los elementos de la base que utilizaremos son,

$$\chi_{n,\eta}(r) = \frac{\eta^{3/2}}{\sqrt{(n+1)(n+2)}} r e^{-\eta r/2} L_n^{(2)}(\eta r), \quad (\text{C.2})$$

en donde $L_n^{(2)}$ son los polinomios asociados de Laguerre de grado n . Las funciones (5.9) están normalizadas y son ortogonales. Las funciones de la Ec. (C.2) no incluyen la dependencia angular (armónicos esféricos), porque son una base para la ecuación radial reducida del Hamiltoniano. Los elementos de matriz para el Laplaciano se encuentran en [103], pero los incluimos aquí por completitud

$$T_{m,n} = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \chi_{m,\eta} \frac{d^2}{dr^2} \chi_{n,\eta} dr \quad (\text{C.3})$$

$$= \eta^2 \left[\delta_{m,n}/8 + \frac{(2m^3 + 9m^2 + 13m + 6)}{12\sqrt{(n+1)(n+2)(m+1)(m+2)}} \right] \quad (\text{C.4})$$

Los elementos de matriz para la exponencial son

$$V_{m,n} = \frac{\eta^3 \Gamma(m+n+3)}{n!m! \sqrt{(n+1)(n+2)(m+1)(m+2)}} \times \frac{\beta^{m+n}}{(\eta+\beta)^{m+n+3}} F \left[-m, -n; -m-n-2; 1 - \frac{\eta^2}{\alpha^2} \right] \quad (\text{C.5})$$

en donde $F[n, m; k; z]$ es la función hipergeométrica de Gauss (ver [104] pág. 1065).

Apéndice D

Elementos de Matriz para el Modelo de punto cuántico

La matriz que corresponde a la energía cinética en la base representada en la Ec. (5.31), solo tomando los términos correspondientes a una partícula $|n, l\rangle$, tiene la forma

$$\left\langle n, l \left| \frac{-\nabla^2}{2} \right| n', l' \right\rangle = \frac{\alpha^2 (n + n')!}{2 [(2n + 2)!(2n' + 2)!]^{1/2}} \left(l(l + 1) - \frac{1}{4} ((n - n')^2 - (n + 1) - (n' + 1)) \right) \delta_{l, l'} \quad (\text{D.1})$$

El término de repulsión Coulombiana lo podemos expandir utilizando el desarrollo en polinomios de Legendre y armónicos esféricos,

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{\frac{4\pi}{2k + 1}} \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} Y_k^0(\theta, \phi) \quad ; r_{<} = \text{mín}(r, r') \quad ; \quad r_{>} = \text{máx}(r, r'). \quad (\text{D.2})$$

Utilizando esta expansión, pueden calcularse los elementos de matriz

$$\left\langle n, l \left| \frac{1}{|\vec{r} - R\hat{k}|} \right| n', l' \right\rangle = \alpha \sqrt{(2l + 1)(2l' + 1)} \times \quad (\text{D.3})$$

$$\times \sum_{k=|l-l'|}^{l+l'} \frac{(n + n' + 2)! + (\alpha R)^{2k+1} \Gamma(n + n' - k + 2; \alpha R) - \Gamma(n + n' + k + 3; \alpha R)}{(\alpha R)^{k+1} [(2n + 2)!(2n' + 2)!]^{1/2}}$$

en donde $\Gamma(m, z)$ es la función Gama incompleta [44]. Los elementos de matriz del potencial exponencial en la base de la Ec. (5.35) tienen la forma

$$\langle n | e^{-r} | n' \rangle = \int_0^{\infty} e^{-r} \phi_n(r) \phi_{n'}(r) r^2 dr = \left(\frac{\alpha}{1 + \alpha} \right)^{n+n'+3} \frac{(2 + n + n')!}{\sqrt{(2n + 2)!(2n' + 2)!}}. \quad (\text{D.4})$$

Apéndice E

Significado Geométrico de la función \mathcal{G}

El problema variacional de Rayleigh-Ritz se resuelve diagonalizando la matriz Hermítica del Hamiltoniano $\mathcal{H}(\lambda)$ en una base en particular de tamaño N . Los autovectores de este problema son entonces una base ortogonal del espacio expandido de tamaño N . Uno pide normalmente la condición de normalización para los autovectores ϕ_λ , $\langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle \equiv 1$, para todos los valores del parámetro λ . De esta forma los autovectores son vectores unitarios en un espacio de dimensión N que pueden ser representados por puntos en una *hiperesfera* de radio 1.

Al modificar el parámetro λ los autovectores se modifican pero vuelven a ser una base ortogonal de vectores unitarios. En esta forma, la conexión entre bases a diferente λ es una rotación en el espacio de dimensión N . Por lo tanto la variación local $|\frac{\partial \phi}{\partial \lambda}\rangle$ de un autovector es tangente al vector $|\phi_\lambda\rangle$ (ver figura E).

Ahora si los cambios ocurren en pasos $\delta \lambda$ finitos (como para los cálculos numéricos) la variación es casi normal a los vectores. Esto lo podemos expresar si consideramos el vector $\frac{\partial \phi_\lambda}{\partial \lambda} \approx \frac{\phi_{\lambda+\delta\lambda} - \phi_\lambda}{\delta\lambda}$ como la variación, y se desprende que

$$\left\langle \phi_\lambda \left| \frac{\partial \phi_\lambda}{\partial \lambda} \right. \right\rangle \approx \frac{\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda+\delta\lambda} \rangle - 1}{\delta \lambda}, \quad (\text{E.1})$$

en donde podemos ver que la función $\mathcal{G} \equiv 1 - |\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda+\delta\lambda} \rangle|^2$ queda relacionada directamente con la ortogonalidad en las variaciones de ϕ .

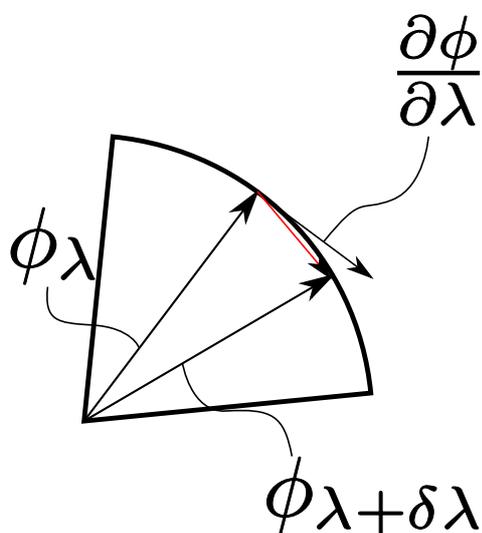


Figura E.1: Cuando la norma se conserva los cambios son rotaciones que son ortogonales a los vectores en todo punto ($\frac{\partial \phi}{\partial \lambda} \perp \phi$). Si los cambios tienen un tamaño finito $\delta \lambda$ entonces la diferencia entre ellos es casi ortogonal (vector rojo).

Apéndice F

Autovectores a Izquierda, Matrices simétricas y producto-C

Cuando uno trabaja con autoestados o estados normalizables en sistemas cuánticos escribe, casi sin darle importancia, algunas ecuaciones en notación bra-ket que tienen muchas suposiciones por detrás. Por ejemplo, es común escribir las siguientes igualdades

$$\mathcal{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\phi|\mathcal{H} = E\langle\phi| \quad (\text{F.1})$$

las cuales llevan implícito que \mathcal{H} es Hermitiano, por lo tanto $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$ y $E = E^*$. También en la notación esta implícito que $\langle\phi|$ representa la función ϕ^* y es un autovalor a izquierda de \mathcal{H} . Tratemos entonces de explicar el por qué de todas estas suposiciones para operadores Hermitianos $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$ y veremos como las trasladamos a operadores *simétricos* $\mathcal{H} = \mathcal{H}^t$. Las cuentas que haremos en este apéndice son válidas en realidad para las matrices que representan estos operadores en alguna base, sin embargo los resultados son generalizables a operadores. Para un dado operador \mathcal{H} siempre podemos definir los autovalores a derecha e izquierda,

$$\mathcal{H}\phi^R = E\phi^R \quad ; \quad (\phi^L)^t \mathcal{H} = \tilde{E}(\phi^L)^t. \quad (\text{F.2})$$

Rápidamente podemos ver que si transponemos la ecuación para los autovalores a izquierda obtenemos que

$$\mathcal{H}^t \phi^L = \tilde{E} \phi^L, \quad (\text{F.3})$$

por lo que los autovalores a izquierda de \mathcal{H} son los autovalores a derecha de \mathcal{H}^t . Además, haciendo un paralelismo con matrices podemos ver que el determinante de \mathcal{H}^t es igual al de \mathcal{H} entonces los autovalores a izquierda \tilde{E} son iguales a los a derecha E . Entonces la ecuación (F.3) la podemos reescribir como

$$\mathcal{H}^t \phi^L = E \phi^L. \quad (\text{F.4})$$

Veamos ahora que propiedades tienen estos autovalores a izquierda respecto de los de derecha. Para tal fin vamos a recurrir nuevamente a pensar en \mathcal{H} como una matriz.

Definimos además X_R como la matriz que tiene por columnas a los autovectores a derecha de modo que se cumple

$$\mathcal{H} X_R = X_R \cdot \text{diag}(E_1, \dots, E_n), \quad (\text{F.5})$$

en donde $\text{diag}(E_1, \dots, E_n)$ es la matriz que tiene en la diagonal a todos los autovalores. Por lo pronto, vamos a suponer también que los autovalores no son degenerados. Para los autovectores a izquierda podemos escribir una ecuación similar

$$X_L \mathcal{H} = \text{diag}(E_1, \dots, E_n) \cdot X_L, \quad (\text{F.6})$$

siendo X_L una matriz que tiene por filas a los autovectores a izquierda. Si ahora multiplicamos a izquierda la ecuación (F.5) por X_L y la (F.6) a derecha por X_R y las restamos, se obtiene que

$$\text{diag}(E_1, \dots, E_n) X_L \cdot X_R = X_L \cdot X_R \text{diag}(E_1, \dots, E_n). \quad (\text{F.7})$$

Luego si una matriz conmuta con una matriz diagonal que tiene todas sus entradas diferentes, esta también es diagonal. Por lo tanto la ecuación (F.7) nos dice que $X_L \cdot X_R$ es diagonal. Esto indica que los autovectores a izquierda y derecha de diferentes autovalores son ortogonales. Los autovectores pueden ser normalizados de modo que (volviendo a lo notación en autovectores de \mathcal{H})

$$(\phi_n^L)^t \cdot \phi_m^R = \delta_{n,m}. \quad (\text{F.8})$$

Esta es una relación que vale para todos los autovalores a izquierda y derecha de operadores con autovalores no degenerados. El caso degenerado tiene dos posibles resultados. El más *benévolo* es que para obtener la ortogonalidad (F.8) de los autovalores a izquierda y derecha debemos realizar una combinación lineal de los diferentes autovectores a un mismo autovalor. El caso más *patológico* es que los autovectores sean incompletos y no expandan todo el espacio de funciones. Normalmente para una matriz de tamaño $N \times N$ sucede que la dimensión del espacio expandido es $N - 1$. Pero no vamos a profundizar más en estos temas por ahora. Dicho todo esto sobre los autovalores a izquierda y derecha, veamos que sucede cuando \mathcal{H} es Hermitiano. Si lo es, entonces $\mathcal{H}^t = \mathcal{H}^*$ y los autovalores son reales. Utilizando esto en la ecuación (F.4) y conjugándola obtenemos que

$$\mathcal{H} (\phi_n^L)^* = E_n (\phi_n^L)^*, \quad (\text{F.9})$$

y comparando con (F.2) vemos que $(\phi_n^L)^* \equiv \phi_n^R$. De ahí que al escribir $\langle \phi_n | | \phi_n \rangle$ en mecánica cuántica (en donde los operadores son casi todos Hermitianos) queremos decir $(\phi_n)^* \cdot \phi_n$, el producto escalar de un vector con su conjugado. Ahora si en lugar de un operador Hermitiano, tenemos un operador simétrico $\mathcal{H}^t = \mathcal{H}$ (como los que se obtienen al realizar dilataciones analíticas a los Hamiltonianos Hermitianos) vemos directamente de la ecuación (F.4) que $\phi^L \equiv \phi^R$. Esto nos dice que la relación de ortogonalidad con los autovalores a derecha se cumple al utilizar ϕ_n en lugar de ϕ_n^* . Vale decir que el *producto* correcto en este caso es

$$\langle \phi_n^* | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}. \quad (\text{F.10})$$

El avisado lector ya habrá notado que la ecuación (F.10) define un producto entre funciones del espacio, pero no es un producto escalar. De hecho puede anularse, tomar valores complejos y ser negativo. De todas formas el producto complejo cae dentro de los *productos internos generalizados* y es muy usado en la teoría de rotaciones complejas.

Apéndice G

La densidad de estados cerca de la resonancia

En el comienzo del capítulo 5.1 se observó que las resonancias están asociadas a polos en la matriz de dispersión. Los polos k_n se encuentran en el cuarto cuadrante ($\text{Re}(k_n)$; $\text{Im}(k_n)$) del plano complejo k (vector de onda). En un entorno de un polo k_n la matriz de dispersión toma la forma,

$$S(k) \propto \frac{1}{k - k_n}. \quad (\text{G.1})$$

Luego si esta es la única dependencia en k , la derivada logarítmica es exactamente igual a

$$\frac{\partial \ln S(k)}{\partial k} = -\frac{1}{k - k_n}. \quad (\text{G.2})$$

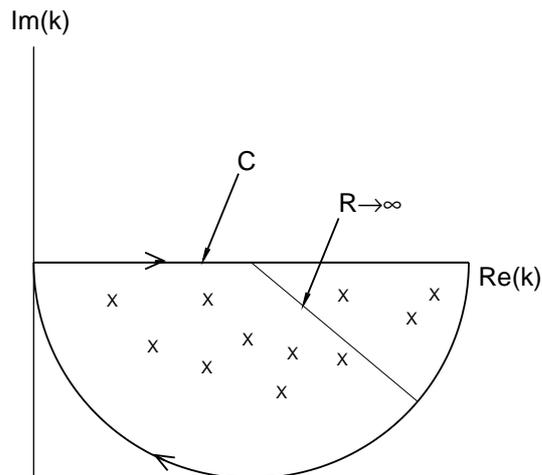


Figura G.1: Contorno de integración en el plano complejo k .

Supondremos además que los polos de la matriz, además de k_n , están todos en una región acotada y pueden ser encerrados por un semicírculo en el cuarto cuadrante (ver Figura G.1). Utilizando el teorema de los residuos, la integral en el plano complejo de $\frac{\partial \ln S(k)}{\partial k}$ sobre el contorno del semicírculo es,

$$N = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{\partial \ln S(k)}{\partial k} dk, \quad (\text{G.3})$$

en donde N es el número de polos en el cuarto cuadrante. Si todos los polos están en una región acotada, puede hacerse el radio del semicírculo de integración tan grande como se desee y la integral sobre este se anulará. La integral de la Ec. (G.3) se realiza sobre el eje real positivo, por lo que puede escribirse

$$\frac{\partial N}{\partial k} = \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial S(k)}{\partial k}. \quad (\text{G.4})$$

La densidad de estados es por definición $\rho \equiv \frac{dN}{dE}$, y puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \rho(k) &= \frac{\partial N}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial E}, \\ &= \frac{\mu}{2\pi i \hbar^2 k} \frac{\partial S(k)}{\partial k}, \end{aligned} \quad (\text{G.5})$$

en donde se utilizó que $E - E_{thr} = \frac{(\hbar k)^2}{2\mu}$. Escribiendo explícitamente la forma de $\frac{\partial S(k)}{\partial k}$ de la Ec. (G.2) y tomando la parte real de ρ se obtiene,

$$\text{Re}(\rho) = \frac{-\mu}{2\pi \hbar^2 k} \frac{k_I}{[(k - k_R)^2 + k_I^2]} \quad (\text{G.6})$$

en donde $k = k_R + i k_I$. La forma funcional es una Lorentziana que tiene el pico centrado en $k = k_R$, cuya altura esta dada por

$$\text{Re}(\rho_{max}(k = k_R)) = \frac{-\mu}{2\pi \hbar^2} \frac{1}{[k_R k_I]}. \quad (\text{G.7})$$

Luego por definición, la energía asociada al vector de onda viene dada por $E_R^{(n)} + i E_I^{(n)} - E_{thr} = \frac{(\hbar k_n)^2}{2\mu}$, de modo que el pico de la densidad de estados vale

$$\text{Re}(\rho_{max}(k_R)) = -\frac{1}{2\pi E_I^{(n)}}. \quad (\text{G.8})$$

Debido a la forma lorentziana también se cumple que el ancho total a altura mitad, Γ_n , es igual a $\Gamma_n = \frac{1}{\pi \text{Re}(\rho_{max})}$. Con esta relación podemos hacer la conexión entre la parte imaginaria de la energía y el ancho de la Lorentziana Γ_n , de la Ec. (G.8) se obtiene que

$$\Gamma_n = -2 E_I^{(n)} \quad (\text{G.9})$$

Este resultado es el que dice que el ancho de los picos en la densidad de estados es directamente proporcional a la parte imaginaria de la energía. Como la parte imaginaria de la energía esta a su vez ligada al tiempo de vida media, el ancho en los picos es una medida directa del tiempo de vida de una resonancia.

Apéndice H

Publicaciones

1. Ground-state stability diagrams for two identical particles in an external potential

F. M. Pont and P. Serra, Journal of Physics A: Math. Theor. **41**, 275303 (2008).

Abstract:

We study the stability of the ground state of a two identical particles system in an external potential. We consider a repulsive interaction between particles and an attractive external potential. The existence of a bounded ground-state as a function of the strength Hamiltonian parameters is studied for long and short range potentials. The possible existence of single or double ionization is discussed. Criteria for the existence of a threshold-energy bound state and the energy critical exponent are given. In particular, we show that for the case of an attractive long-range external potential with short-range repulsive inter-particle interaction, a bound system can become unstable increasing the strength of the attractive potential.

2. Stability Diagrams of plasma embedded three-unit-charge systems: Efimov effect and Borromean states.

F. M. Pont and P. Serra, Physical Review A **79**, 032508 (2009).

Abstract:

The stability of the ground state of three-unit-charge $q_i = \pm 1, \pm 1 \mp 1$, interacting through a statically screened Coulomb potential, has been studied as a function of the values of the constituent masses for different values of the screening parameter. General conditions are given and accurate variational calculations have been performed to determine the region where the three-body ground state is Borromean. The possible existence of Efimov states when the screening parameter is equal to the two-body critical screening parameter is discussed. The critical exponent for the energy in different regions of the stability diagram has been also calculated.

3. Entropy, fidelity, and double orthogonality for resonance states in two-electron quantum dots

Federico M. Pont, Omar Osenda, Julio H. Toloza and Pablo Serra, Physical Review A (2010). *Enviado a publicar.*

Abstract:

Resonance states of a two-electron quantum dot are studied using a variational expansion with both real basis-set functions and complex scaling methods. The two-electron entanglement (linear entropy) is calculated as a function of the electron repulsion at both sides of the critical value, where the ground (bound) state becomes a resonance (unbound) state. The linear entropy and fidelity and double orthogonality functions are compared as methods for the determination of the real part of the energy of a resonance. The complex linear entropy of a resonance state is introduced using complex scaling formalism.

4. The density of state's scaling in systems with resonance states

Federico M. Pont, Omar Osenda and Pablo Serra, *Physica Scripta* (2010). *Selected papers originated from the workshop on quantum nonstationary systems in Brasilia. Enviado a publicar.*

Abstract:

Resonance states of a two-electron quantum dot are studied using a variational expansion with both real basis-set functions and complex scaling methods. We present numerical evidence about the critical behaviour of the density of states in the region where there are resonances. The critical behaviour is signaled by a strong dependence of some features of the density of states with the basis set size used to calculate it. The complex resonance energy is obtained using the scaling properties of the density of states

Symmetrical systems of three charged particles in Debye plasmas

Abstract:

Manuscrito en preparación (contendrá los resultados del capítulo 4.)

Bibliografía

- [1] M. Lassaut, I. Bulboaca, and R. J. Lombard. Critical behaviour of weakly bound systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 29:2175–2186, 1996.
- [2] M. Hoffmann-Ostenhof, T. Hoffmann-Ostenhof, and B. Simon. A multiparticle coulomb system with bound state at threshold. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 16:1125–1131, 1983.
- [3] M. Klaus and B. Simon. Coupling constant thresholds in nonrelativistic quantum mechanics. i. short-range two-body case. *Annals of Physics*, 130:251–281, 1980.
- [4] M. Klaus and B. Simon. Coupling constant thresholds in nonrelativistic quantum mechanics. ii. two-cluster thresholds in n -body systems. *Communications in Mathematical Physics*, 78:153–168, 1980.
- [5] F. Pont and P. Serra. Ground-state stability diagrams for two identical particles in an external potential. *Journal of Physics A: Mathematical and general*, 41:275303, 2008.
- [6] P. Serra and S. Kais. *Advances in Chemical Physics*, 125:1–99, 2003.
- [7] K. Chadan, R. Kobayashi, and M. Lassaut. Generalization of the Birman–Schwinger method for the number of bound states. *Journal of Mathematical Physics*, 40:1756–1763, 1999.
- [8] O. Juillet, S. Fleck, L. Theussl, J-M. Richard, and K. Varga. Lower bound on fermion binding energies. *Physical Review B*, 63:073102, 2001.
- [9] K. Chadan and H. Grosse. New bounds on the number of bound states. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 16:955–961, 1983.
- [10] F. Brau. Sufficient conditions for the existence of bound states in a central potential. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37:6687–6692, 2004.
- [11] F. Brau. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36:9907–9913, 2003.
- [12] Per-Olov Löwdin. Studies in perturbation theory. x. lower bounds to energy eigenvalues in Perturbation-Theory ground state. *Physical Review*, 139:A357, 1965.

-
- [13] R. Jost and A. Pais. On the scattering of a particle by a static potential. *Physical Review*, 82:840, 1951.
- [14] V. Bargmann. On the number of bound states in a central field of force. *Proceedings of the National Academy Sciences USA*, 38:961, 1952.
- [15] F. Brau and M. Lassaut. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37:11243–11257, 2004.
- [16] P. Serra, J. P. Neirotti, and S. Kais. Finite-size scaling approach for the schrödinger equation. *Physical Review A*, 57:R1481–R1484, 1998.
- [17] A. S. Jensen, K. Riisager, and D. V. Fedorov. Structure and reactions of quantum halos. *Review of Modern Physics*, 76:215–261, 2004.
- [18] V. Pandharipande, S. Pieper, and R. Wiringa. Variational monte carlo calculations of ground states of liquid 4He and 3He drops. *Physical Review B*, 34:4571–4582, 1986.
- [19] R. Guardiola and J. Navarro. Drops of 3He atoms with good angular-momentum quantum numbers. *Physical Review Letters*, 84:1144, 2000.
- [20] S. Kar and Y. K. Ho. Bound states and resonance states of the plasma-embedded $pp\ \mu$ molecular ion. *Physical review A*, 75:062509, 2007.
- [21] S. Kar and Y. K. Ho. Ground state and resonance state of ps^- in plasmas with various debye lengths. *Physical review A*, 71:052503, 2005.
- [22] S. Kar and Y. K. Ho. Autoionizing 1se resonance of h- in debye plasma environments. *Physical review E*, 70:066411, 2004.
- [23] L. Bertini, M. Mella, D. Bressanini, and G. Morosi. Borromean binding in h_2 with yukawa potential: A nonadiabatic quantum monte carlo study. *Physical review A*, 69:042504, 2004.
- [24] Y. K. Ho and S. Kar. Bound states and resonant states of three self-gravitating Bose-Einstein condensates. *Few-Body Systems*, 44:253–256, 2008.
- [25] S. Kar and Y.K. Ho. Dipole polarizabilities of plasma-embedded ps^- and h- ions. *Physics Letters A*, 372:4253–4256, 2008.
- [26] J. R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. Dover Publications, 2006.
- [27] R. G. Newton. *Scattering theory of waves and particles*. Courier Dover Publications, 2002.

-
- [28] G. Gamow. *The Constitution of Atomic Nuclei and Radioactivity*. Clarendon Press, 1931.
- [29] G. Gamow and C. Critchfield. *Theory of Atomic Nucleus and Nuclear Energy Sources*. Clarendon Press, 1949.
- [30] G. Gamow. *Structure of Atomic Nuclei and Nuclear Transformations*. Clarendon Press, 1937.
- [31] V. Efimov. Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system. *Physics Letters B*, 33:563–564, 1970.
- [32] L. H. Thomas. The interaction between a Neutron and a proton and the structure of ^3H . *Physical Review*, 47:903, 1935.
- [33] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H.-C. Nägerl, and R. Grimm. Evidence for efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms. *Nature*, 440:315–318, 2006.
- [34] S. Knoop, F. Ferlaino, M. Mark, M. Berninger, H. Schöbel, H.-C. Nägerl, and R. Grimm. Observation of an efimov-like trimer resonance in ultracold atom–dimer scattering. *Nature Physics*, 5:227–230, 2009.
- [35] F. Ferlaino. Forty years of efimov physics: How a bizarre prediction turned into a hot topic. *Physics*, 3:9, 2010.
- [36] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Arxiv*, 0812.1496.
- [37] D. V. Fedorov and A. S. Jensen. Efimov effect in coordinate space faddeev equations. *Physical Review Letters*, 71:4103, 1993.
- [38] A. Ferrón, O. Osenda, and P. Serra. Entanglement in resonances of two-electron quantum dots. *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, 79:032509–6, 2009.
- [39] O. Osenda and P. Serra. Scaling of the von Neumann entropy in a two-electron system near the ionization threshold. *Physical Review A*, 75, 2007.
- [40] F. Brau and F. Calogero. A class of (l -dependent) potentials with the same number of (l -wave) bound states. *Physics Letters A*, 312:16–20, 2003.
- [41] B. Simon. On the absorption of eigenvalues by continuous spectrum in regular perturbation problems. *Journal of Functional Analysis*, 25:338, 1977.
- [42] W. Thirring. *A course in mathematical Physics 3: Quantum Mechanics of atoms and molecules*. Springer-Verlag, 1981.

-
- [43] S. Flugge. *Practical quantum mechanics*. Springer-Verlag, Berlin ;;New York, springer study ed. edition, 1994.
- [44] M. Abramowitz. *Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs, and mathematical tables*. Dover Publications, New York, 1970.
- [45] F. J. Rogers, H. C. Graboske, and D. J. Harwood. Bound eigenstates of the static screened coulomb potential. *Physical Review A*, 1:1577, 1970.
- [46] O. A. Gomes, H. Chacham, and J. R. Mohallem. Variational calculations for bound-unbound transition of the yukawa potential. *Physical review A*, 50:228, 1994.
- [47] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Wiley, New York, 3 edition, 1998.
- [48] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77*. Cambridge University Press,Cambridge, 2 edition, 1996.
- [49] P. Serra, A. F. Stanton, S. Kais, and R. E. Bleil. Comparison study of pivot methods for global optimization. *The Journal of Chemical Physics*, 106:7170–7177, 1997.
- [50] R. A. Bonham and D. A. Kohl. Simple correlated wavefunctions for the ground state of heliumlike atoms. *The Journal of Chemical Physics*, 45:2471–2473, 1966.
- [51] D. H. Bailey. A fortran-90 based multiprecision system. *RNR Technical Report*, 94-013:10, 1995.
- [52] A. Martin, J-M. Richard, and T. T. Wu. Stability of three-unit-charge systems. *Physical review A*, 46:3697, 1992.
- [53] E. A. G. Armour and W. B. Brown. The stability of three-body atomic and molecular ions. *Accounts of Chemical Research*, 26:168–173, 1993.
- [54] E. A. G. Armour, J. M. Richard, and K. Varga. Stability of few-charge systems in quantum mechanics. *Physics reports*, 413:1–90, 2005.
- [55] R. N. Hill. Proof that the h- ion has only one bound state. details and extension to finite nuclear mass. *Journal of Mathematical Physics*, 18:2316–2330, 1977.
- [56] S. Kais and Q. Shi. Quantum criticality and stability of three-body coulomb systems. *Physical Review A*, 62:060502(4), 2000.
- [57] E. Braaten and H.-W. Hammer. Universality in few-body systems with large scattering length. *Physics Reports*, 428:259–390, 2006.
- [58] D. Petrov. Three-body problem in fermi gases with short-range interparticle interaction. *Physical Review A*, 67:010703, 2003.

-
- [59] A. C. Fonseca, E. F. Redish, and P. E. Shanley. Efimov effect in an analytically solvable model. *Nuclear Physics A*, 320:273–288, 1979.
- [60] V. N. Efimov. Weakly-bound states of three resonantly-interacting particles. *Soviet Journal of Nuclear Physics*, 12, 1971.
- [61] A. Amorim, T. Frederico, and L. Tomio. Universal aspects of efimov states and light halo nuclei. *Physical Review C*, 56:R2378–R2381, 1997.
- [62] M. Lee, T. Köhler, and P. Julienne. Excited Thomas-Efimov levels in ultracold gases. *Physical Review A*, 76:012720, 2007.
- [63] O. Osenda and P. Serra. Excited state entanglement on a two-electron system near the ionization threshold. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 41:065502, 2008.
- [64] A. Ferrón, P. Serra, and S. Kais. Stability conditions for hydrogen-antihydrogen-like quasimolecules. *Physical Review A*, 77, 2008.
- [65] G. J. Hanna and D. Blume. Energetics and structural properties of three-dimensional bosonic clusters near threshold. *Physical Review A*, 74:063604, 2006.
- [66] Jr. Stillinger. Ground-State energy of Two-Electron atoms. *The Journal of Chemical Physics*, 45:3623–3631, 1966.
- [67] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer, 1995.
- [68] J. D. Baker, D. E. Freund, R. N. Hill, and J. D. Morgan. Radius of convergence and analytic behavior of the $1/Z$ expansion. *Physical Review A*, 41:1247, 1990.
- [69] I. A. Ivanov. Radius of convergence of the $1/Z$ expansion for the ground state of a two-electron atom. *Physical Review A*, 51:1080, 1995.
- [70] C. H. Maier, L. S. Cederbaum, and W. Domcke. A spherical-box approach to resonances. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 13:L119–L124, 1980.
- [71] N. Moiseyev. Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling. *Physics Reports*, 302:212–293, 1998.
- [72] N. Moiseyev and J. O. Hirschfelder. Representation of several complex coordinate methods by similarity transformation operators. *The Journal of Chemical Physics*, 88:1063–1065, 1988.
- [73] E. Balslev and J. M. Combes. Spectral properties of many-body schrödinger operators with dilatation-analytic interactions. *Communications in Mathematical Physics*, 22:280–294, 1971.

-
- [74] H. Lehr and C. A. Chatzidimitriou-Dreismann. General properties of the spectrum of complex scaled hamiltonians: Phenomenological description of pole string curves. *Physical Review A*, 50:2347, 1994.
- [75] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, 416:608–610, 2002.
- [76] W. K. Wootters. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, 80:2245, 1998.
- [77] P. Zanardi and N. Paunkovic'. Ground state overlap and quantum phase transitions. *Physical Review E*, 74:031123, 2006.
- [78] F. Schmuser and D. Jansing. Entanglement generation via scattering of two particles with hard-core repulsion. *Physical Review A*, 73:052313, 2006.
- [79] J. Coe, A. Sudbery, and I. D'Amico. Entanglement and density-functional theory: Testing approximations on hooke's atom. *Physical Review B*, 77:205122, 2008.
- [80] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West. N-electron ground state energies of a quantum dot in magnetic field. *Physical Review Letters*, 71:613, 1993.
- [81] K. Varga, P. Navratil, J. Usukura, and Y. Suzuki. Stochastic variational approach to few-electron artificial atoms. *Physical Review B*, 63:205308, 2001.
- [82] M. Bylicki, W. Jaskólski, A. Stachów, and J. Diaz. Resonance states of two-electron quantum dots. *Physical Review B*, 72:075434, 2005.
- [83] S. Abdullah, J. P. Coe, and I. D'Amico. Effect of confinement potential geometry on entanglement in quantum dot-based nanostructures. *Physical Review B*, 80:235302, 2009.
- [84] C. Emary. Measuring the entanglement between double quantum dot charge qubits. *Physical Review B*, 80:161309, 2009.
- [85] L. Slen, R. Nepstad, I. Degani, and J. P. Hansen. Optical control in coupled Two-Electron quantum dots. *Physical Review Letters*, 100:046805, 2008.
- [86] D. Loss and D. P. DiVincenzo. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, 57:120, 1998.
- [87] Y. Sajeev and N. Moiseyev. Theory of autoionization and photoionization in two-electron spherical quantum dots. *Physical Review B*, 78:075316, 2008.
- [88] A. Galindo and P. Pascual. *Quantum Mechanics I*. Springer, 1st edition, 1991.

-
- [89] A. T. Kruppa and K. Arai. Resonances and the continuum level density. *Physical Review A*, 59:3556, 1999.
- [90] P. Serra O. Osenda and S. Kais. Dynamics of entanglement for two-electron atoms. *International Journal of Quantum Information*, 6:303–316, 2008.
- [91] P. Serra and S. Kais. Finite size scaling for critical conditions for stable dipole-bound anions. *Chemical Physics Letters*, 372:205–209, 2003.
- [92] W. P. Reinhardt and S. Han. Exploiting the analyticity of schrödinger operators: Theory and the computation of partial cross sections. *International Journal of Quantum Chemistry*, 57:327–341, 1996.
- [93] S. Kar and Y. K. Ho. S-wave resonances in e⁺,⁻He scattering below the ps (n = 2) excitation threshold. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37:3177–3186, 2004.
- [94] V. A. Mandelshtam, T. R. Ravuri, and H. S. Taylor. Calculation of the density of resonance states using the stabilization method. *Physical Review Letters*, 70:1932–1935, 1993.
- [95] F. M. Pont, O. Osenda, and P. Serra. *Physica Scripta*, pages–, 2010. Selected papers originated from the workshop on quantum nonstationary systems in Brasilia. Enviado a publicar.
- [96] P. Zanardi, P. Giorda, and M. Cozzini. Information-Theoretic differential geometry of quantum phase transitions. *Physical Review Letters*, 99:057205, 2007.
- [97] S. Garnerone and N. Jacobson, S. Haas, and P. Zanardi. Fidelity approach to the disordered quantum XY model. *Physical Review Letters*, 102:057205, 2009.
- [98] N. Schuch, M. Wolf, F. Verstraete, and J. Cirac. Entropy scaling and simulability by matrix product states. *Physical Review Letters*, 100:030504, 2008.
- [99] P. Ziesche, K. Kunze, and B. Milek. Generalisation of the hellmann-feynman theorem to gamow states. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20:2859, 1987.
- [100] F. Pont and P. Serra. Stability diagrams of plasma-embedded three-unit-charge systems: Borromean states and the efimov effect. *Physical Review A*, 79:032508–8, 2009.
- [101] S. P. Neirotti, P. Serra, and S. Kais. Electronic structure critical parameters from finite-size scaling. *Phys. Rev. Lett.*, 79:3142, 1997.
- [102] F. M. Pont, O. Osenda, J. H. Toloza, and P. Serra. Entropy, fidelity, and double orthogonality for resonance states in two-electron quantum dots. *Phys. Rev. A*, 2010. Aceptado para su publicación.

- [103] T. N. Rescigno, M. Baertschy, D. Byrum, and C. W. McCurdy. Making complex scaling work for long-range potentials. *Physical Review A*, 55:4253–4262, 1997.
- [104] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press, New York, 1997.