



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**BÚSQUEDA DE UNA SOLUCIÓN ANALÍTICA PARA EL
TRANSBORDADOR DE TRIPLE PUNTO CUÁNTICO**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE MAESTRA EN CIENCIAS
FÍSICAS

PRESENTA
PRAT STEPHANÍA VÁZQUEZ PERALTA

TUTOR PRINCIPAL
DR. ERNESTO COTA ARAIZA
CNyN-UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DRA. KARINA GARAY PALMETT DR. JESÚS MAYTORENA CÓRDOVA
CICESE CNyN-UNAM

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA, MÉXICO, ENERO DE 2021.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

RESUMEN de la tesis que presenta **PRAT STEPHANÍA VÁZQUEZ PERALTA** como requisito parcial para la obtención del grado de MAESTRA EN CIENCIAS en FÍSICA. Ensenada, Baja California, enero de 2021.

BÚSQUEDA DE UNA SOLUCIÓN ANALÍTICA PARA EL TRANSBORDADOR DE TRIPLE PUNTO CUÁNTICO

Resumen aprobado por:

Dr. Ernesto Cota Araiza
Director de tesis

En el presente trabajo se estudia el hamiltoniano linealizado del transbordador de triple punto cuántico (TQDS por sus siglas en inglés) mediante métodos de solución analíticos. Este sistema consiste en un arreglo lineal de tres puntos cuánticos donde los puntos de los extremos permanecen fijos mientras que el punto central oscila entre ellos y su movimiento es modelado por un oscilador armónico cuántico; la linealización del hamiltoniano consiste en aproximar el acoplamiento túnel al término de primer orden en el desarrollo de su forma exponencial. En una primera aproximación, se considera que la parte electrónica del modelo está completamente descrita por tres estados electrónicos mientras que para la parte vibracional se consideran D modos de vibración (sistema de 3 niveles en interacción con D modos de oscilación: $\hat{H}_{TQDS}^{3 \times D}$). En un intento por encontrar una expresión analítica para los eigenvalores y eigenestados de \hat{H}_{TQDS} se estudiaron dos métodos diferentes para su posible aplicación, uno propuesto por Zhang en 2014 [28] y el otro propuesto por Kus [30] en 1986.

Una generalización de la simetría Z_2 del hamiltoniano del modelo de Rabi de dos estados a una simetría Z_N para un modelo de N estados es el trabajo propuesto por Zhang donde se establece que si algún sistema sin importar su dimensionalidad (número de estados que represente) posee la simetría correspondiente Z_N , su hamiltoniano será elegible para diagonalización parcial mediante el uso de una transformación unitaria. En este caso, se mostró que \hat{H}_{TQDS} carece de la simetría Z_3 requerida, por lo que el método fue descartado.

Por otro lado, el método desarrollado por Kus permite encontrar soluciones exactas aisladas para hamiltonianos del tipo \hat{H}_{TQDS} usando la representación de Bargmann [31]. Esto nos da la oportunidad de obtener algunos valores de energía y posteriormente construir sus respectivos eigenvectores con la condición de que los parámetros que describen al sistema cumplan con ciertas restricciones llamadas condiciones de compatibilidad. Esto último nos brinda la posibilidad de desarrollar un criterio para establecer bajo qué condiciones el método de Kus será aplicable para la resolución de sistemas representados por un hamiltoniano del tipo \hat{H}_{TQDS} .

Las energías y los eigenvectores encontrados de forma analítica son comparados con aquellos calculados mediante diagonalización numérica en un código de PYTHON.

Palabras clave: Hamiltoniano linealizado, TQDS, solución analítica, modelo de Rabi, espacio de Bargmann.

ABSTRACT of the thesis presented by **PRAT STEPHANÍA VÁZQUEZ PERALTA** as a partial requirement to obtain the MASTER OF SCIENCE degree in PHYSICS. Ensenada, Baja California, january of 2021.

SEARCH FOR AN ANALYTICAL SOLUTION FOR THE TRIPLE QUANTUM DOT SHUTTLE

In the present work we study the linearized Hamiltonian of a triple-quantum-dot shuttle (TQDS). This system consists of a straight line of three quantum dots where the end dots remain fixed while the center dot oscillates between them and its motion is modelled by a quantum harmonic oscillator; the linearization of the Hamiltonian consists of bringing the tunnel coupling closer to the first order term in the expansion of its exponential form. In a first approximation, it is considered that the electronic part of the model is completely described by three electronic states, while for the vibrational part we consider D vibration modes (3-level system with D oscillation modes: $\hat{H}_{TQDS}^{3 \times D}$). In an attempt to find an analytical expression for the eigenvalues and eigenstates of \hat{H}_{TQDS} , we review two different methods for their possible application, the one proposed by Zhang in 2014 [28] and the one developed by Kus in 1986 [30].

A generalization of the Z_2 symmetry of the hamiltonian of the two-level model to a Z_N symmetry for a N-level model is the work proposed by Zhang, where it is established that if any system regardless of its dimensionality has such symmetry, this would allow a partial diagonalization of the Hamiltonian using a unitary transformation. In this case we show that \hat{H}_{TQDS} lacks the required Z_3 symmetry, discarding the method.

The method developed by Kus allows to find exact isolated solutions of a Hamiltonian of the \hat{H}_{TQDS} -type using the Bargmann representation [31]. This allows us to obtain some energy values and their respective eigenvectors with the condition that the parameters that describe the system comply with certain constraints called compatibility conditions. The latter gives rise to the possibility of developing a criterion that would let us to establish under what conditions the Kus method is applicable in the solution of systems represented by Hamiltonians of the \hat{H}_{TQDS} -type.

The energies and eigenvectors found analytically are compared with those calculated numerically in a Python code.

Keywords: Linearized Hamiltonian, TQDS, analytical solution, Rabi model, Bargmann space.

A Pablo, por tanto...

A Aída, con todo mi ser...

A Lucy, con mucho cariño...

A Heriberto, Zaida y Hernán, por siempre...

Agradecimientos

Agradezco profundamente al Dr. Ernesto Cota por ser una pieza fundamental en mi formación académica desde hace ya varios años, por aceptarme como tesista y guiarme en todo este proceso de iniciación en la investigación científica. Gracias por el ejemplo, el tiempo y el apoyo incondicional.

A los doctores Jesús Maytorena y Karina Garay, por permitirse ser miembros de mi Comité de Tesis y brindar su valioso tiempo para la revisión exhaustiva de este texto, enriqueciéndolo con sus comentarios y sugerencias.

Al Dr. Manuel Herrera, por el apoyo moral, administrativo y académico en todo momento, por su invaluable compañía desde el proceso de admisión hasta el día de hoy.

A Pablo, por estar ahí siempre y adoptar mi tema de tesis como suyo para discutirlo conmigo. A mi mamá, Aída, por creer en mí e impulsarme constantemente, porque le debo gran parte de lo que soy. A Lucy, por poder contar con ella sin condiciones. A mis hermanos Heriberto, Zaida y Hernán, porque me inspiran.

Al Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM por brindarme lo necesario para culminar satisfactoriamente mis estudios de posgrado y, por último, al CONACyT por el apoyo económico recibido.

Índice general

Resumen en español	I
Resumen en inglés	III
Dedicatoria	IV
Agradecimientos	V
Índice general	VI
Índice de cuadros	VIII
Índice de figuras	IX
1. Introducción	1
1.1. Justificación	1
1.2. Transporte electrónico	2
1.3. Efecto túnel	3
1.4. Puntos cuánticos	3
1.5. Transistor de un solo electrón y bloqueo de Coulomb	3
1.6. Dispositivos nanoelectromecánicos	4
1.7. Transbordador de electrones	5
1.8. Transbordador de triple punto cuántico	6
1.8.1. Régimen lineal de tunelaje	9
1.9. Objetivos	10
1.9.1. Objetivo general	10
1.9.2. Objetivos específicos	10
2. Antecedentes	11
2.1. Transporte a través de un transbordador de electrones	11
2.1.1. Acoplamiento a contactos	13
2.1.2. Espectro de energía del transbordador aislado	13
2.1.3. Características de la corriente	14
2.2. Otros estudios sobre el transbordador de triple punto cuántico	15
2.2.1. Transbordador de triple punto cuántico sometido a un campo eléctrico oscilante	15
2.2.2. Interacción espín-órbita en el transbordador de triple punto cuántico	17

2.2.3. Entrelazamiento híbrido en un dispositivo de transbordador de triple punto cuántico	17
3. Modelo de Rabi y extensión a tres niveles	20
3.1. El modelo de Rabi	20
3.2. Generalización del modelo de Rabi a N estados	25
3.2.1. Caso $N=3$	29
4. Soluciones exactas aisladas para sistemas del tipo óptico-cuántico	34
4.1. El espacio de Bargmann	35
4.2. Solución de la Ecuación de Schrödinger en la representación de Bargmann	36
4.2.1. Condiciones de compatibilidad	39
4.3. Soluciones aisladas del transbordador de triple punto cuántico	41
5. Resultados y discusión	47
5.1. Caso $n = 0$	54
5.2. Caso $n = 2$	56
5.3. Cálculo de los eigenvectores del TQDS	60
5.4. Parámetros típicos	65
6. Conclusiones	69
Referencias	72
Apéndice A. Eigenvectores de la matriz $\hat{\lambda}$	75
Apéndice B. Matriz de transformación	76
Apéndice C. Operador $\hat{\Omega}^{(\lambda)}$ en su forma matricial	77
Apéndice D. Algoritmo para el cálculo numérico	78
Apéndice E. Condición de compatibilidad global para $n = 2$	80

Índice de cuadros

4.1. Raíces reales de las condiciones de compatibilidad locales (CCL) correspondientes a cada uno de los eigenvalores λ_i para $n = 1.$	46
5.1. Raíces reales de las condiciones de compatibilidad locales (CCL) correspondientes a cada uno de los eigenvalores λ_i para $n = 2.$	57

Índice de figuras

1.1. Esquema del transbordador de triple punto cuántico.	6
2.1. Transbordador de electrones propuesto por Armour y MacKinnon [12].	12
2.2. Espectro de energía en función de ϵ_b para el transbordador de Armour [12].	14
2.3. Corriente de estado estacionario a través del transbordador de Armour [12].	15
2.4. TQDS conectado a una diferencia de potencial variable en el tiempo [14].	16
2.5. Dinámica de las primeros 20 eigenenergías como función de ϵ_b y número de Schmidt para 4 eigenestados del sistema del TQDS [20].	18
2.6. Corriente eléctrica a través del TQDS y número de Schmidt para 3 de los eigenestados del sistema [20].	19
3.1. Esquema del modelo atómico de dos estados.	23
4.1. Condiciones de compatibilidad para cada uno de los eigenvalores λ_i en el caso $n = 1$	45
5.1. Comparación de los resultados obtenidos del cálculo de la energía de forma analítica y numérica considerando $\epsilon_b = 0.420583$	49
5.2. Condiciones de compatibilidad asociadas al primer eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_1 = 0$ para el caso $n = 1$	50
5.3. Condiciones de compatibilidad asociadas al segundo eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_2 = \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 1$	51
5.4. Condiciones de compatibilidad asociadas al tercer eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_3 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 1$	52
5.5. Comparación de los resultados obtenidos del cálculo de la energía de forma analítica y numérica considerando $\epsilon_b = -0.420583$	53
5.6. Condiciones de compatibilidad asociadas al segundo eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_2 = \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 2$	58
5.7. Condiciones de compatibilidad asociadas al tercer eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_3 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 2$	59
5.8. Condiciones de compatibilidad asociadas a cada uno de los eigenvalores λ_i para el caso $n = 1$ y usando los parámetros típicos: $x_0 = 5$, $V_0 = 0.5$ y $\alpha = 0.2$	66

5.9. Comparación de los resultados obtenidos del cálculo de la energía del TQDS de forma numérica y analítica considerando los parámetros típicos y $\epsilon_b = 0$ 67

Capítulo 1

Introducción

1.1. Justificación

La miniaturización es una característica inherente a la tecnología, es lo que marca tendencia, ya que la electrónica moderna exige cada vez más un rendimiento mejorado en un espacio reducido, un aumento en las velocidades de procesamiento y una reducción en el consumo energético de los componentes básicos en los dispositivos electrónicos y circuitos integrados. Sin embargo, el costo de la miniaturización es alto, pues se está llegando al límite en el cual los efectos cuánticos propios de todo material empiezan a manifestarse de manera significativa, lo cual nos enfrenta a una innumerable cantidad de retos experimentales, pero a su vez, abre toda una gama de novedosas aplicaciones, convirtiendo a la mecánica cuántica en un marco de referencia para la innovación tecnológica.

En un mundo donde el alto rendimiento tecnológico sigue dominado por el uso de transistores, donde cada dos años el número de transistores en un circuito integrado se duplica (Ley de Moore, 1965) a la par de que los dispositivos aumentan su eficiencia y reducen su tamaño, la industria de los semiconductores tiene en sus manos la tecnología de la información. Transistores cada vez más pequeños permiten que los electrones fluyan rápidamente a través de ellos, se convierten en dispositivos de alta frecuencia; por otro lado, un número alto de transistores en un circuito integrado admite la realización de muchos cálculos simultáneamente, de modo que un circuito integrado con muchos pequeños transistores nos conduce a computadoras con una alta capacidad de procesamiento.

Los dispositivos nanoelectromecánicos (integración de funcionalidades eléctricas y mecánicas a la nanoescala) se han miniaturizado rápidamente siguiendo la tendencia de la electrónica comercial basada en el transistor. La miniaturización de dispositivos electromecánicos es prevista para una variedad de aplicaciones así como para acceder a regímenes interesantes de la física fundamental; un caso particular es el de los transbordadores de electrones, dispositivos a la nanoescala en los cuales se manifiestan efectos de naturaleza cuántica que son aprovechados para que se dé transporte electrónico de manera controlada, donde el transbordador de triple punto cuántico ha

cobrero reciente interés por sus posibles aplicaciones en información cuántica [7, 11].

El transbordador de triple punto cuántico (triple quantum dot shuttle, TQDS) es un tipo de transbordador de electrones donde cada uno de los puntos cuánticos que lo conforman se comporta como un transistor de un solo electrón. Sus propiedades de transporte electrónico son objeto de estudio actual debido a su potencial aplicación en información cuántica y a que el TQDS representa el siguiente nivel de complejidad en el estudio del bit cuántico (sistema cuántico con dos estados propios que puede ser manipulado arbitrariamente, concepto fundamental para la computación cuántica). El TQDS se ha analizado contemplando efectos de espín-órbita [19], se han encontrado correlaciones cuánticas entre el grado de entrelazamiento del sistema y la corriente electrónica [20, 21], entre otros estudios [14, 15, 16, 17]; pero, para todos esos análisis, los eigenvalores y eigenvectores del hamiltoniano del sistema fueron obtenidos de forma numérica, lo cual deja a los métodos analíticos para la solución de este problema como un área poco explorada y de un gran atractivo. Una expresión analítica para la energía y los eigenestados del sistema permitirá un entendimiento más profundo de la física del transbordador.

En las siguientes secciones presentamos en forma resumida algunos conceptos básicos que intervienen en la descripción de las propiedades de transporte a través del TQDS, que es el sistema en el que estará enfocado este trabajo de tesis.

1.2. Transporte electrónico

El concepto de transporte en la experiencia diaria en la cual observamos objetos que parten de una ubicación inicial y al cabo de un tiempo determinado se encuentran posicionados en algún otro lugar, donde la idea de trayectoria y desplazamiento es completamente clara, puede mantenerse aún cuando estemos considerando transporte electrónico. Si bien el electrón es un objeto cuyo comportamiento es regido por la mecánica cuántica (donde su posición y momento no pueden ser medidos con gran precisión simultáneamente tal como indica el principio de incertidumbre de Heisenberg), esto no va contra la concepción que tenemos del transporte clásico.

De manera concreta, el transporte electrónico se refiere al estudio de cómo las partículas cargadas fluyen a través de un conductor. Un ejemplo básico de transporte electrónico es cuando se conecta una batería a las terminales de un resistor y somos capaces de medir la corriente a través de este último; los electrones al fluir a través de la resistencia a temperatura ambiente pueden ser considerados como pelotitas con velocidades bien definidas (exhiben comportamiento corpuscular), por lo que el fenómeno evidenciado se considera transporte electrónico clásico. Por otro lado, para ir al transporte electrónico cuántico los electrones deben comportarse como objetos cuánticos y exhibir características ondulatorias. Esto lo podemos lograr con temperaturas lo suficientemente bajas o en dispositivos suficientemente pequeños (dispositivos a la nanoescala).

1.3. Efecto túnel

El efecto túnel es un fenómeno cuántico que se refiere a la probabilidad no nula de que una partícula en la mecánica cuántica se encuentre en una posición o en un estado que está prohibido clásicamente; de una manera más precisa, una partícula en movimiento viola los principios de la mecánica clásica penetrando una barrera de potencial mayor que la propia energía total de la partícula. Si dicha partícula no dispone de energía mecánica suficiente como para atravesar la barrera, la mecánica clásica afirma que nunca podrá aparecer del otro lado de ésta, como una pelota rebotando y redirigiéndose hacia atrás al golpear una pared. Por otro lado, a escalas cuánticas las partículas exhiben un comportamiento ondulatorio que permite que exista cierta probabilidad de que la partícula se desplace a través de la barrera y sea encontrada del otro lado aún cuando no tenga la energía necesaria para superar la cima energética relativa del obstáculo.

1.4. Puntos cuánticos

Los puntos cuánticos (quantum dots, QD) son nanoestructuras artificiales generalmente de material semiconductor (aunque también las hay metálicas) que confinan el movimiento en las tres direcciones espaciales de los portadores de carga. Este confinamiento se puede ajustar variando el tamaño de los QD's y da lugar a fenómenos cuánticos que no se manifiestan en materiales con dimensiones macroscópicas. Cuando los electrones son confinados a volúmenes muy pequeños, comparables con su longitud de onda de De Broglie, se comportan como partículas cuánticas en un pozo de potencial, la partícula entonces sólo tiene permitido acceder a ciertos estados electrónicos con energías características, lo que nos conduce a un espectro discreto de energía. Los QD's tienen un número finito de cargas eléctricas elementales, las cuales se disponen en el QD como en un único átomo, de ahí que también se les conozca con el nombre de átomos artificiales.

El tamaño de los puntos cuánticos va desde unos cuantos nanómetros hasta cientos de éstos, por lo que son consideradas estructuras cuasi-cero-dimensionales y las propiedades electrónicas y ópticas que exhiben son muy diferentes a las propiedades del material en bulto. Una de sus propiedades más interesantes es que muestran el fenómeno de bloqueo de Coulomb, lo que los hace de gran atractivo para estudios de transporte electrónico; otra propiedad interesante es que presentan luminiscencia, es decir, reemiten luz en una longitud de onda muy específica que depende del tamaño de éstos al ser iluminados.

1.5. Transistor de un solo electrón y bloqueo de Coulomb

Un transistor es un dispositivo electrónico semiconductor cuya principal funcionalidad es la de entregar una señal de salida en respuesta a una señal de entrada. En la actualidad, los transistores se encuentran prácticamente en todos los aparatos electrónicos de uso cotidiano, desde televisores hasta teléfonos inteligentes, casi siempre

formando parte de los llamados circuitos integrados donde, para una mayor integración de este tipo de dispositivos, los transistores deben superar retos tales como lograr un bajo consumo energético y tener dimensiones en el rango nanométrico. Bajo esas características, el transistor de un solo electrón (single electron transistor, SET) ha acontecido como un elemento de gran interés tecnológico desde la creciente irrupción del internet de las cosas (concepto referido a la interconexión digital de objetos cotidianos con internet) y las aplicaciones enfocadas a la salud. Particularmente, un transistor de un solo electrón es un dispositivo en el cual los electrones fluyen a través de una unión túnel (en su forma más simple, barrera delgada aislante entre dos electrodos conductores) a un punto cuántico (isla conductora) entre una fuente y un sumidero. Un SET siempre se encuentra aislado y se conforma por 3 electrodos: fuente, sumidero y compuerta. La fuente y el sumidero se acoplan a través de dos uniones túnel a una isla (punto cuántico metálico o semiconductor), la compuerta se acopla a la isla y permite regular en ella el potencial electrostático. El SET es el dispositivo más simple en el cual se observa el fenómeno conocido como bloqueo de Coulomb, lo cual resulta de gran importancia porque justamente dicho bloqueo es el responsable de que se logre transporte electrónico controlado en el sistema de QD's que se describe en la sección 1.8.

El bloqueo de Coulomb es un fenómeno clásico que se manifiesta en dispositivos de baja dimensionalidad, como puntos cuánticos. Cuando el dispositivo es lo suficientemente pequeño, los electrones en su interior generan una fuerte repulsión coulombiana que impide el flujo de otros electrones.

Recordemos que, coloquialmente, la capacitancia de un dispositivo se define como la capacidad de éste para almacenar carga y asimismo es proporcional a sus dimensiones. Los puntos cuánticos se caracterizan por su baja capacitancia, de modo que si un electrón externo busca penetrar en él y no cuenta con la energía suficiente para acceder a alguno de los niveles energéticos del QD, éste será bloqueado debido a la repulsión coulombiana que generan los electrones internos y el transporte electrónico se verá interrumpido. Debido a la discretización de la carga eléctrica, la corriente a través de una unión túnel puede visualizarse como una serie de eventos en los cuáles exactamente un solo electrón atraviesa la barrera, no se contempla la posibilidad de que se produzcan procesos de túnel simultáneos (co-túnel).

El bloqueo de Coulomb se manifiesta bajo las siguientes condiciones:

- El voltaje aplicado a los electrodos debe ser menor a la carga elemental dividida por la auto-capacitancia de la isla.
- La energía térmica del sistema deberá ser menor que la energía de carga del electrón, esto para impedir el tuneo de electrones debido a excitación térmica.

1.6. Dispositivos nanoelectromecánicos

Se les denomina sistemas nanoelectromecánicos (nanoelectromechanical systems, NEMS) a un tipo de dispositivos que integran funcionalidades eléctricas y mecánicas a la nanoescala. Son el siguiente paso lógico en miniaturización después de los llamados sistemas microelectromecánicos y están típicamente compuestos por nanoelectrónica

del tipo de un transistor y por actuadores mecánicos o motores. Estos sistemas pueden contar con elementos mecánicos, electromagnéticos, ópticos, térmicos e incluso de fluidos con al menos una dimensión en el orden de nanómetros. El nombre se deriva de las dimensiones típicas del dispositivo en el rango de nanómetros (desde los cientos hasta unos cuantos de nanómetros) y nos dirige a sistemas de poca masa donde se espera la aparición de efectos cuánticos potencialmente considerables. Una de las características más destacadas de los NEMS es su reducido tamaño y todas las posibles aplicaciones que pueden tener derivadas de su baja dimensionalidad, como su posible idoneidad para crear memorias más rápidas y con mayor capacidad de almacenamiento de datos.

El hecho de que los NEMS combinen características mecánicas y electrónicas a la nanoescala los dota de propiedades únicas que pueden ser usadas para una gran variedad de aplicaciones en diferentes áreas de especialidad tales como medicina (nanorobots para cirugía a nivel molecular y tratamiento de cáncer) [1, 2], electrónica (memorias no volátiles de alta velocidad) [3] y mecánica (detección de desplazamiento a la nanoescala [4, 5] y de partículas con masa en la escala de attogramos, 10^{-18} gramos [6]), por mencionar algunas. Los NEMS contribuyen en el desarrollo de una amplia gama de nuevos dispositivos pero a su vez se enfrentan a importantes desafíos como lograr técnicas de nanofabricación reproducibles y de alta resolución, así como la integración eficiente de elementos mecánicos con componentes electrónicos en un sistema completo.

1.7. Transbordador de electrones

Los transbordadores de electrones son un tipo de sistema nanoelectromecánico cuya función principal es la de transportar un número discreto de electrones de una fuente a un sumidero de manera controlada mediante efecto túnel, característica que los hace de un gran interés en el ámbito tecnológico. El primer modelo de transbordador fue propuesto por Gorelik en el año 1998 [8] y consiste en una partícula metálica ligada a un par de electrodos mediante moléculas orgánicas deformables elásticamente que son usadas como ligandos, de tal modo que si se aplica una diferencia de potencial lo suficientemente alta a los electrodos los ligandos se desestabilizan y comienzan a vibrar, dando lugar a la oscilación de la partícula metálica y produciéndose así el transporte electrónico por efecto túnel. Existen reportados en la literatura varios modelos de transbordador de electrones que se han implementado en el laboratorio, por ejemplo, nanopartículas de oro colocadas sobre moléculas flexibles [9] y arreglos de uno [10] y tres puntos cuánticos [11] con el elemento móvil posicionado sobre nanovarillas flexibles.

Un atributo que poseen los transbordadores de electrones es que, debido a que el tunelaje es controlado por la oscilación del elemento móvil, únicamente una vía de tunelaje se encuentra abierta a la vez, lo que permite tener un control preciso de la cantidad de electrones que pueden traspasar la barrera de potencial. Esta característica los hace dispositivos sumamente útiles con aplicaciones desde sensores [5, 6] hasta una nueva generación de transistores de alto y bajo flujo de corriente electrónica.

1.8. Transbordador de triple punto cuántico

El transbordador de triple punto cuántico (triple quantum dot shuttle, TQDS) fue propuesto por Armour y MacKinnon en el 2002 [12] y consiste en un arreglo lineal de tres puntos cuánticos donde el QD central es un elemento móvil con propiedades oscilatorias y su movimiento es modelado por un oscilador armónico cuántico simple mientras que los QD's de los extremos quedan fijos en $\pm x_0$ (desplazamiento máximo del punto cuántico central).

La capacitancia de los QD's se estima lo suficientemente baja como para encontrarnos en el régimen del bloqueo de Coulomb, por lo tanto la energía necesaria para añadir un electrón al transbordador se asume tan alta que sólo un electrón podrá ocupar la cadena de tres puntos cuánticos en todo momento.

Este modelo es una idealización en la que se considera, como una primera aproximación, que el electrón tiene acceso a un único estado energético con energía bien definida correspondiente a cada punto cuántico en el cual se posiciona. Por lo anterior, la parte electrónica del modelo queda descrita por los estados electrónicos $|l\rangle$, $|c\rangle$ y $|r\rangle$, con energías respectivas dadas por ϵ_l , ϵ_c y ϵ_r para cuando el electrón se encuentra en el punto cuántico de la izquierda, central y de la derecha.

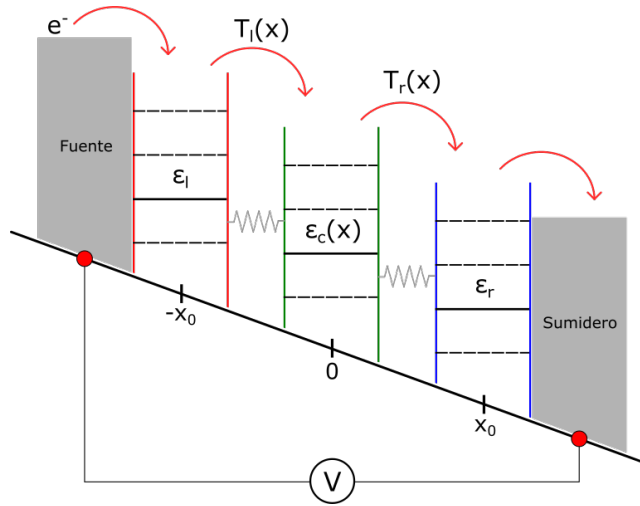


Figura 1.1: Esquema del transbordador de triple punto cuántico.

Los puntos cuánticos de los extremos se encuentran conectados a electrodos a los que se les aplica una diferencia de potencial V que permite el flujo de electrones de una fuente a un sumidero.

Denotaremos por ϵ_b a la diferencia de energía del sistema ($\epsilon_b = \epsilon_l - \epsilon_r$), la cual es atribuida a la diferencia de potencial aplicada,

$$eV = \epsilon_b = \epsilon_l - \epsilon_r. \quad (1.1)$$

Dado que el punto cuántico central no está fijo (a diferencia de los puntos extremos que sí lo están) su energía ϵ_c es en realidad una función del operador de posición \hat{X} ($\epsilon_c(\hat{X})$), de forma explícita:

$$\epsilon_c(\hat{X}) = \frac{\epsilon_l}{2} \left(1 - \frac{\hat{X}}{x_0}\right) + \frac{\epsilon_r}{2} \left(1 + \frac{\hat{X}}{x_0}\right) = \epsilon_l - \frac{\epsilon_b}{2x_0} (\hat{X} + x_0), \quad (1.2)$$

donde el operador de posición se define en términos de los operadores de aniquilación y creación de la siguiente forma:

$$\hat{X} = \Delta x_{zp} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}), \quad (1.3)$$

y Δx_{zp} se refiere al desplazamiento de punto cero,

$$\Delta x_{zp} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad (1.4)$$

siendo ω la frecuencia del oscilador, \hbar la constante de Planck y m la masa de la partícula oscilante que en este caso es el QD central.

Finalmente, el TQDS queda completamente descrito por los tres estados electrónicos $|l\rangle$, $|c\rangle$, $|r\rangle$ y D estados vibracionales que corresponden a los modos de oscilación del punto cuántico central. Dada esta configuración nos enfrentamos a un sistema cuántico de naturaleza híbrida, cuyo espacio de Hilbert es de dimensión $3 \times D$.

El sistema es modelado por un hamiltoniano de amarre fuerte con la siguiente estructura [12]:

$$\hat{H}_{TQDS} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{osc} + \hat{H}_{tun}. \quad (1.5)$$

De manera explícita [12],

$$\hat{H}_0 = \epsilon_l |l\rangle \langle l| + \epsilon_c |c\rangle \langle c| + \epsilon_r |r\rangle \langle r|, \quad (1.6a)$$

$$\hat{H}_{osc} = \hbar\omega \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}, \quad (1.6b)$$

$$\hat{H}_{tun} = T_l(\hat{X})(|l\rangle \langle c| + |c\rangle \langle l|) + T_r(\hat{X})(|c\rangle \langle r| + |r\rangle \langle c|), \quad (1.6c)$$

correspondiendo \hat{H}_0 a la aportación energética de sitio de los tres puntos cuánticos; siendo $|i\rangle\langle i|$ (con $i = l, c, r$) los operadores de proyección y ϵ_i la energía de sitio para cada estado electrónico, respectivamente.

Por otro lado, \hat{H}_{osc} representa la contribución de energía de oscilación del punto cuántico central usando el modelo del oscilador armónico cuántico en función de los operadores de aniquilación y creación y omitiendo el término energético debido al punto cero.

Finalmente, \hat{H}_{tun} se refiere a la aportación debido al tuneo electrónico en el sistema. Más específicamente, \hat{H}_{TQDS} toma la forma:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{TQDS} = & \epsilon_l |l\rangle\langle l| + \epsilon_c |c\rangle\langle c| + \epsilon_r |r\rangle\langle r| + \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} + T_l(\hat{X})(|l\rangle\langle c| + |c\rangle\langle l|) \\ & + T_r(\hat{X})(|c\rangle\langle r| + |r\rangle\langle c|). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Un modelo comúnmente usado para representar las tasas de tunelaje entre los QD's de los extremos y el QD central es mediante una dependencia exponencial con el operador de posición, de manera explícita [12]:

$$T_l(\hat{X}) = -V_0 e^{[-\alpha(x_0 + \hat{X})]}, \quad (1.8a)$$

$$T_r(\hat{X}) = -V_0 e^{[-\alpha(x_0 - \hat{X})]}, \quad (1.8b)$$

siendo V_0 y α constantes positivas que representan la amplitud de tunelaje y la inversa de la longitud de tunelaje, respectivamente.

El hamiltoniano del transbordador de triple punto cuántico escribiendo las tasas de tunelaje de forma explícita adquiere la siguiente estructura:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{TQDS} = & \epsilon_l |l\rangle\langle l| + \epsilon_c |c\rangle\langle c| + \epsilon_r |r\rangle\langle r| + \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} - V_0 e^{-\alpha(x_0 + \hat{X})}(|l\rangle\langle c| + |c\rangle\langle l|) \\ & - V_0 e^{-\alpha(x_0 - \hat{X})}(|c\rangle\langle r| + |r\rangle\langle c|), \end{aligned} \quad (1.9)$$

y hasta el momento sólo es posible encontrar sus eigenvalores y eigenvectores mediante diagonalización numérica.

A continuación se propone estudiar el hamiltoniano del TQDS en el régimen lineal de tunelaje en búsqueda de expresiones analíticas para los eigenvalores y eigenvectores del sistema.

1.8.1. Régimen lineal de tunelaje

En la aproximación lineal se busca simplificar el hamiltoniano del TQDS de modo que sea más sencillo manipularlo analíticamente. Para ello se expanden las tasas de tunelaje (1.8a)(1.8b) en serie de Taylor y nos quedamos a primer orden en \hat{X} . Para validez de la aproximación consideramos $\alpha \ll 1$, lo cual implica una longitud de tunelaje grande que se traduce en una barrera de potencial angosta, obtenemos:

$$\begin{aligned} T_l(\hat{X}) &= -V_0 e^{-\alpha(x_0 + \hat{X})} \approx -V_0 [1 - \alpha(x_0 + \hat{X})] \\ &\approx -V_0(1 - \alpha x_0) + V_0 \alpha \Delta x_{zp} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}), \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} T_r(\hat{X}) &= -V_0 e^{-\alpha(x_0 - \hat{X})} \approx -V_0 [1 - \alpha(x_0 - \hat{X})] \\ &\approx -V_0(1 - \alpha x_0) - V_0 \alpha \Delta x_{zp} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Del proceso de linealización tomamos (1.10) y (1.11) y lo sustituimos en (1.9) para así, finalmente, escribir \hat{H}_{TQDS} como sigue:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{TQDS} &= \epsilon_l |l\rangle \langle l| + \epsilon_c |c\rangle \langle c| + \epsilon_r |r\rangle \langle r| + \hbar \omega \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} \\ &\quad - V_0(1 - \alpha x_0) (|l\rangle \langle c| + |c\rangle \langle l| + |c\rangle \langle r| + |r\rangle \langle c|) \\ &\quad + V_0 \alpha \Delta x_{zp} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}) [|l\rangle \langle c| + |c\rangle \langle l| - |c\rangle \langle r| - |r\rangle \langle c|]. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Debido a la naturaleza híbrida del sistema (ya que se encuentra descrito por tres estados electrónicos y D estados vibracionales), los elementos de matriz de \hat{H}_{TQDS} se calculan de la siguiente forma en una base compuesta de estados híbridos $|i, n\rangle$ donde $i = l, c, r$ se refiere a los estados electrónicos según la posición del electrón en el sistema (punto cuántico de la izquierda, central o de la derecha) y n (y m) etiquetan a cada uno de los modos de vibración:

$$\hat{H}_{TQDS}^{mn} = \begin{pmatrix} \langle l, m | \hat{H}_{TQDS} | l, n \rangle & \langle l, m | \hat{H}_{TQDS} | c, n \rangle & \langle l, m | \hat{H}_{TQDS} | r, n \rangle \\ \langle c, m | \hat{H}_{TQDS} | l, n \rangle & \langle c, m | \hat{H}_{TQDS} | c, n \rangle & \langle c, m | \hat{H}_{TQDS} | r, n \rangle \\ \langle r, m | \hat{H}_{TQDS} | l, n \rangle & \langle r, m | \hat{H}_{TQDS} | c, n \rangle & \langle r, m | \hat{H}_{TQDS} | r, n \rangle \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Así, de manera explícita en su forma matricial, el hamiltoniano del transbordador de triple punto cuántico linealizado se ve como:

$$\hat{H}_{TQDS} = \hbar \omega \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \begin{pmatrix} \epsilon_l & -V_1 & 0 \\ -V_1 & \frac{\epsilon_l + \epsilon_r}{2} & -V_1 \\ 0 & -V_1 & \epsilon_r \end{pmatrix} + \Delta x_{zp} \begin{pmatrix} 0 & V_0 \alpha & 0 \\ V_0 \alpha & \frac{\epsilon_b}{2x_0} & -V_0 \alpha \\ 0 & -V_0 \alpha & 0 \end{pmatrix} (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger), \quad (1.14)$$

donde $V_1 = V_0(1 - \alpha x_0)$.

1.9. Objetivos

1.9.1. Objetivo general

El objetivo de este trabajo de investigación es encontrar una expresión analítica para los eigenvalores y eigenvectores del hamiltoniano de un transbordador de triple punto cuántico estudiando al sistema en el régimen lineal de tunelaje y comparar los resultados obtenidos por métodos algebraicos con los logrados mediante análisis numérico. Un enunciado algebraico para la energía y los eigenestados del TQDS proporciona información cualitativa y cuantitativa de la dependencia global de la energía con los parámetros del sistema, conduciéndonos a un entendimiento más profundo de la física del transbordador.

1.9.2. Objetivos específicos

- Estudiar una de las generalizaciones del modelo de Rabi a N estados como método de solución del hamiltoniano linealizado del TQDS, esto debido a la similitud que se aprecia entre el transbordador de triple punto cuántico (sistema de tres estados en interacción con los modos de oscilación del elemento móvil) y un sistema de dos estados en interacción con un campo electromagnético externo (objeto de estudio del modelo de Rabi).
- Examinar el problema del transbordador linealizado cambiando de representación al espacio de Bargmann.
- Escribir un código computacional que permita el cálculo de los eigenvalores y eigenvectores del hamiltoniano del TQDS de forma numérica y comparar los valores obtenidos con los resultados que arroja el estudio de los métodos analíticos.

Capítulo 2

Antecedentes

En este capítulo se presentan como antecedentes algunos trabajos de investigación que son exclusivamente sobre un transbordador de triple punto cuántico en arreglo lineal, esto con el fin de guiar al lector al estado actual en el que se encuentra el estudio del sistema y hacer notar que otra de las características que comparten dichos trabajos es que los cálculos de la energía y los eigenestados del \hat{H}_{TQDS} en cuestión son realizados siempre por medio de diagonalización numérica, posicionando al enfoque analítico como un área de interés poco explorada y a la que esperamos aportar algo significativo en los siguientes capítulos.

2.1. Transporte a través de un transbordador de electrones

Las tasas de tunelaje electrónico a través de uniones mesoscópicas son fuertemente moduladas por cambios en la extensión física de las barreras de potencial, lo cual puede surgir de la excitación de modos vibracionales en el sistema. En estructuras semiconductoras estándar donde sus componentes se encuentran rígidas, las fluctuaciones en el ancho de la barrera son relativamente despreciables, a diferencia de cuando el transporte electrónico ocurre a través de barreras túnel flexibles, pues ahí se espera que el tunelaje se vea afectado debido a vibraciones que modifiquen el ancho de la barrera.

La perturbación de procesos de tunelaje a través de una única unión mesoscópica debido a un elemento mecánico en el sistema es ahora un tema relativamente bien entendido; surgen efectos más complicados cuando nos enfrentamos a dos o más uniones flexibles conectadas en serie, particularmente, una excitación de los modos vibracionales del componente móvil puede conducir a que se lleve a cabo un transbordo de electrones entre las uniones. La idea de un transbordador de electrones mesoscópico en el cual un grado de libertad vibracional modula las tasas de tunelaje a través de dos uniones flexibles a la vez fue propuesto por Gorelik et al. en el año de 1998 (ver sección 1.7).

En el año 2002, A. D. Armour y A. MacKinnon [12] investigaron el efecto que

tendría sobre el tunelaje electrónico el añadir modos de vibración a una cadena de tres puntos cuánticos. El modelo propuesto consistió en un arreglo lineal de tres puntos cuánticos donde los QD's externos se encuentran fijos y conectados a contactos eléctricos a los cuales les será aplicado posteriormente un voltaje que permitirá el flujo de electrones de un lado a otro, mientras que el punto cuántico central es un elemento móvil del sistema y es a quien se le atribuyen los modos vibracionales. El movimiento del QD central modula el tamaño de las barreras de tunelaje de manera opuesta entre ellas, esto es, cuando disminuye la anchura de la barrera entre el QD izquierdo y el QD central, la que hay entre el QD derecho y el QD central, aumenta, y viceversa, de modo que el tunelaje del electrón está correlacionado con la posición del oscilador y el sistema se comporta como un transbordador de electrones (ver sección 1.8). La parte electrónica del problema es tratada usando un esquema simple de Bloqueo de Coulomb y la vibración del QD central es modelada como un oscilador armónico cuántico.

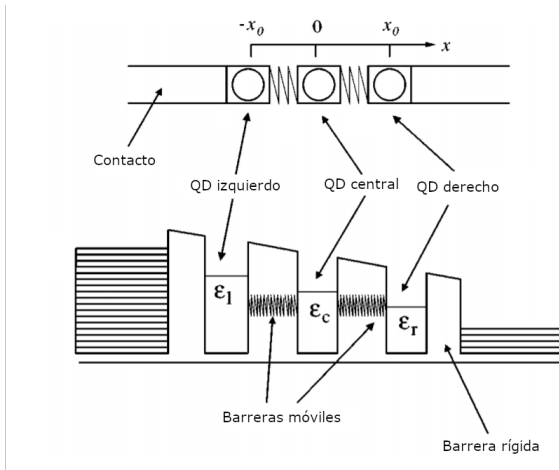


Figura 2.1: Esquema del transbordador de triple punto cuántico propuesto en el 2002 por Armour y MacKinnon [12].

De manera concreta, estudiaron el tunelaje electrónico a través de un sistema electromecánico de dimensiones nanométricas en el límite del bloqueo de Coulomb (la energía de carga para añadir más de un electrón al transbordador se asume lo suficientemente alta, de modo que sólo un electrón de transporte pueda ocupar la cadena de 3 puntos cuánticos a la vez). El interés está en que la anchura de las barreras túnel que atraviesan los electrones es modulada por la vibración del QD central y justamente es el efecto de esto sobre el tunelaje electrónico en la cadena de puntos cuánticos lo que quisieron investigar.

La parte electrónica del sistema es idealizada: cada punto es representado por un único y localizado estado energético. Aparte de la dinámica interna del transbordador (tres QD's en interacción con un oscilador cuántico como un sistema aislado), hay dos efectos que tomaron en cuenta: acoplamiento entre los estados electrónicos de los puntos externos y los contactos y acoplamiento entre el oscilador y su ambiente. El

modelo que consideraron está simplificado en muchos aspectos, pero aún así les fue posible construir un entendimiento de las características de transporte que ocurren cuando hay acoplamiento fuerte entre los grados de libertad electrónicos y el desplazamiento del oscilador armónico cuántico.

El sistema fue modelado por un hamiltoniano de amarre fuerte cuya estructura puede verse a detalle en la sección 1.8. Calcularon el espectro de energías del sistema en función de la diferencia entre los niveles energéticos correspondientes a los puntos cuánticos externos (E vs ϵ_b). La dinámica del transporte electrónico a través del sistema la analizaron usando el formalismo de la matriz de densidad, ya que este permite acoplamiento con contactos externos e incorporar de manera más conveniente efectos del ambiente del oscilador, para posteriormente calcular la corriente de estado estacionario a través del dispositivo. El comportamiento del sistema de transbordador fue fácilmente investigado por ellos mediante métodos numéricos: el hamiltoniano y el operador de densidad son representados por matrices y la evolución temporal del sistema puede obtenerse para cualquier forma inicial de la matriz de densidad, sin embargo, dado que el número de modos vibracionales es, estrictamente, infinito, su consideración en el cálculo numérico implica necesariamente un truncamiento.

2.1.1. Acoplamiento a contactos

Las propiedades de transporte del transbordador acoplado a los contactos las obtuvieron integrando la ecuación de movimiento correspondiente para la matriz de densidad de un sistema cuántico abierto en el que se considera interacción con el entorno, tomando en cuenta el acoplamiento de los QD's externos con los contactos eléctricos y el acoplamiento entre el oscilador y su ambiente.

La naturaleza discreta de los estados electrónicos tiene un efecto importante en las formas en las cuales se lleva a cabo la transferencia de energía en el dispositivo. Un electrón viajando a través del transbordador debe entrar con una energía determinada por el nivel energético del QD izquierdo y dejar el sistema con la energía determinada por el nivel energético del QD derecho, de modo que cada electrón que viaja a través del dispositivo disipa una cantidad de energía proporcional al voltaje entre los contactos, energía que se le atribuye como ganancia al oscilador.

2.1.2. Espectro de energía del transbordador aislado

Cuando el sistema se encuentra débilmente acoplado con el ambiente y los contactos externos pero los QD's se encuentran fuertemente acoplados entre sí, se considera éste un sistema aislado y se espera que las características de la corriente sean fuertemente influenciadas por los eigenestados del mismo. Calcularon entonces el espectro de energías como función de ϵ_b examinando primero al sistema sin acoplamiento entre puntos cuánticos ($V_0 = 0$, amplitud de tunelaje nula) para posteriormente calcular el eigenespectro del sistema para valores finitos de la amplitud de tunelaje. Se puede ver de la figura (2.2(a)) que para una amplitud de tunelaje nula se manifiestan cruces en el espectro que corresponderían a un sistema desacoplado, caso contrario, con un valor para V_0 distinto de cero, las figuras (2.2 (b)(c)(d)) muestran anticruces característicos de sistemas acoplados.

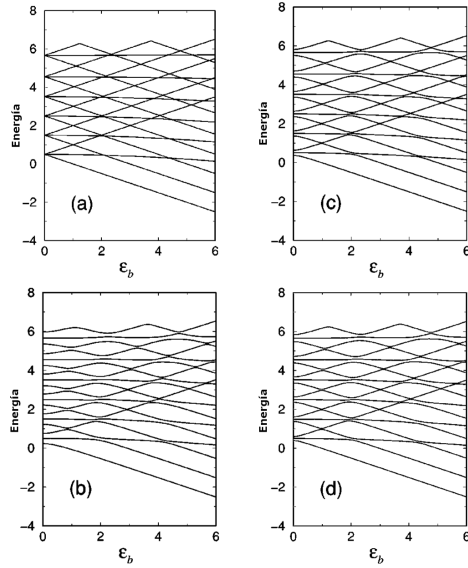


Figura 2.2: Espectro de energía en función de ϵ_b [12] para distintos conjuntos de parámetros: $\alpha = 0.2$, $x_0 = 5$ con $V_0 = 0$ (a), $V_0 = 0.5$ (b) y $V_0 = 0.25$ (c); $\alpha = 0.4$, $x_0 = 5$ y $V_0 = 0.5$ (d).

2.1.3. Características de la corriente

Para obtener las características de la corriente a través del dispositivo de transbordador integraron la ecuación de movimiento para la matriz de densidad desde un estado inicial dado hasta que obtuvieron el estado estacionario, lo cual se puede encontrar explícitamente en el apéndice B del artículo de Armour y MacKinnon [12]. El estado estacionario se logra cuando la energía ganada por el oscilador debido a la disipación de energía de los electrones es contrarrestada por las pérdidas de éste debido al amortiguamiento que resulta de su interacción con el medio.

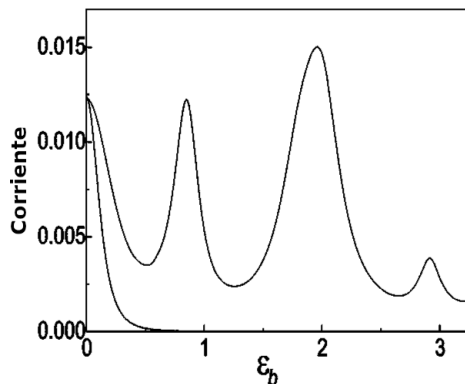


Figura 2.3: Corriente de estado estacionario a través del transbordador [12] para $\alpha = 0.2$, $x_0 = 5$ y $V_0 = 0.5$, donde la curva superior considera la presencia del oscilador y la inferior no.

Por un lado, encontraron que la presencia del oscilador conduce a cambios significativos en las características de la corriente y asimismo es importante considerar amortiguamiento para poder lograr el estado estacionario. El estado inicial del oscilador depende de la temperatura del ambiente, a temperatura igual a cero el oscilador se encuentra inicialmente en su estado base; los efectos de temperaturas finitas complican el cálculo numérico pero pueden ser tomadas en cuenta en el estado inicial del oscilador y modificando los términos de amortiguamiento. Por otro lado, el resultado más importante que obtuvieron fue que los picos de corriente ubicados en $\epsilon_b \simeq 0.86$, $\epsilon_b \simeq 1.95$ y $\epsilon_b \simeq 2.92$ corresponden a anticruces en el espectro de energías (figura 2.2 (b)), de modo que, cuando los QD's se encuentran fuertemente acoplados entre ellos y débilmente acoplados a los contactos, la corriente a través del dispositivo puede ser predicha estudiando los anticruces en el espectro de energía.

En la práctica, cuando nos referimos a puntos cuánticos podrían ser puntos semiconductores, moléculas grandes o nanopartículas [12]. Similarmente, el oscilador puede ser un oscilador mecánico de ultra alta frecuencia con un punto montado sobre él [13], alternativamente el modo de oscilador puede lograrse de la vibración del punto central dentro de un medio elástico estabilizador o el potencial que lo confina entre los puntos externos [12].

2.2. Otros estudios sobre el transbordador de triple punto cuántico

2.2.1. Transbordador de triple punto cuántico sometido a un campo eléctrico oscilante

El estudio de los sistemas nanoelectromecánicos es de gran interés tanto teórico como experimental ya que manifiestan novedosas propiedades de transporte electrónico debido a la fuerte interacción entre los grados de libertad electrónicos y vibracionales.

En la presencia de un campo eléctrico de corriente alterna (AC), es conocido que se da una interacción entre el campo y la frecuencia del dispositivo que da lugar a peculiares efectos en la corriente. En el año 2007, Maldonado et al. [14] propuso analizar las características de un TQDS donde los QD's externos se encuentran conectados a una diferencia de potencial variable en el tiempo (AC TQDS) y fue en el año 2008 que Villavicencio et al. [15] introdujo una descripción cuántica del estudio de la dinámica del mismo modelo; la corriente del sistema fue calculada numéricamente en el formalismo de la matriz de densidad para incluir el ambiente del oscilador y efectos de amortiguamiento, obteniendo que al variar los parámetros del campo AC se pueden modular las características de la corriente de tunelaje y mostrando además que en este dispositivo se puede lograr el fenómeno de destrucción coherente del tunelaje.

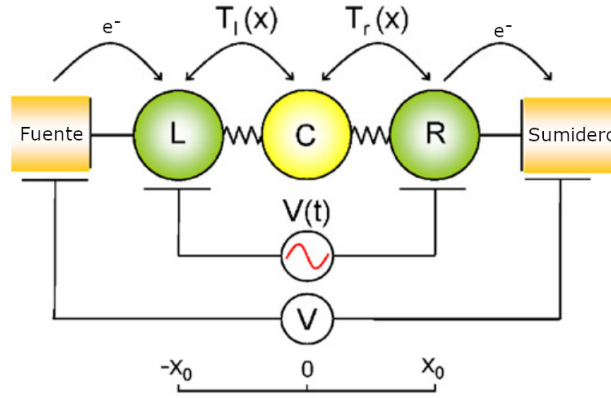


Figura 2.4: TQDS conectado a una diferencia de potencial variable en el tiempo, $V(t) = V_{ac} \cos \omega_{ac} t$, donde el movimiento del QD central queda limitado por los QD's extremos que se encuentran fijos en la posición $\pm x_0$ y conectados rígidamente a los electrodos [14].

Posteriormente, en el año 2011 Villavicencio et al. [16] retomó el AC TQDS analizando la dinámica del sistema en el marco de la teoría de Floquet. Particularmente estudió el espectro de cuasienergía del sistema en función de la intensidad y frecuencia del campo AC y del voltaje DC en los contactos externos. Mediante el análisis del espectro de cuasienergía en función de ϵ_b y los parámetros del campo le fue posible hallar bajo qué condiciones se manifestaba la destrucción coherente del tunelaje y mostrar que en la vecindad de esas condiciones el cuasispectro exhibía ciertos cruces que podían ser caracterizados mediante propiedades de paridad de los eigenvectores correspondientes.

A inicios del año 2012, Qu et al. [17] reanudó el estudio del AC TQDS desde la perspectiva de la teoría de Floquet para estudiar el fenómeno de localización dinámica de dos electrones calculando el promedio en el tiempo de la probabilidad de ocupación. Este fenómeno puede ser útil para controlar el transporte electrónico y la evolución temporal de los estados en un NEMS con posibles aplicaciones en electrónica molecu-

lar, información y computación cuántica. Localización dinámica es el término que se le atribuye al hecho de que la presencia de un campo AC parece atrapar al electrón dentro de un solo punto cuántico en una escala larga de tiempo y ha sido ya reportado que con un campo adecuado se pueden localizar incluso dos electrones en un mismo QD a pesar de la repulsión coulombiana [18]. Qu et al. encontró que máximos en el promedio temporal de la probabilidad de ocupación, es decir, la localización dinámica, se ubican cerca de los anti-cruces en el espectro de cuasienergía, esto es, ahora hay localización en los anti-cruces en vez de máximos de corriente. Asimismo, determinó que comparado con sistemas de puntos cuánticos sin elementos móviles, la oscilación en los transbordadores de electrones favorece la localización dinámica.

2.2.2. Interacción espín-órbita en el transbordador de triple punto cuántico

Las propiedades de transporte electrónico en sistemas de tres puntos cuánticos han cobrado importancia reciente debido a su potencial aplicación en información cuántica. Estos sistemas representan el siguiente nivel de complejidad en el estudio de propiedades de bits cuánticos acoplados (qubits). A finales del año 2013, Villavicencio et al. [19] presenta un análisis de las propiedades de transporte electrónico tomando en cuenta el grado de libertad de espín debido a la presencia de interacción espín-órbita (spin-orbit interaction, SOI) en un TQDS. Calculó la corriente a través del dispositivo como función de ϵ_b (como ya se había venido manejando) encontrando nuevas resonancias en la corriente debido a la presencia de SOI. También analizó la polarización de la corriente identificando bajo qué condiciones ésta se encuentra completamente polarizada y el dispositivo se comporta como un filtro de espín.

Para explicar las características de la corriente a través del dispositivo, calcularon el espectro de energía para el sistema aislado (considerando sólo acoplamiento entre los puntos cuánticos y de éstos con el oscilador) y se identificaron los estados involucrados (anti-cruces en el espectro que reflejan acoplamiento entre los estados debido a SOI) en el proceso de conducción para cada resonancia en la corriente, la cual fue calculada en el formalismo de la matriz de densidad; todo esto de forma numérica. Del cálculo de los eigenestados correspondientes a las energías en las que se efectúan los anti-cruces fueron identificados los estados involucrados en el proceso de conducción.

2.2.3. Entrelazamiento híbrido en un dispositivo de transbordador de triple punto cuántico

El entrelazamiento cuántico es una propiedad por medio de la cual dos o más estados cuánticos se encuentran correlacionados de tal forma que cada estado individual no puede ser descrito de manera independiente. Esta característica es un recurso importante en la computación cuántica y en procesos de información cuántica. El transbordador de triple punto cuántico es un ejemplo notable de un dispositivo nanoelectromecánico donde la combinación de grados de libertad electrónicos y vibracionales juegan un papel importante en las propiedades de transporte electrónico y por lo mismo puede verse también como un claro ejemplo de un sistema en el que se manifiesta entrelazamiento entre sus estados, y dado que está compuesto por estados de diferente

naturaleza, se dice que el entrelazamiento es híbrido. En el año 2014, Mora et al. [20] estudió el entrelazamiento híbrido entre los estados electrónicos y los modos vibracionales del TQDS propuesto por Armour et al. en el 2002 [12], caracterizó el grado de entrelazamiento del sistema mediante el número de Schmidt y encontró una correlación interesante entre éste y la corriente a través del dispositivo, lo cual posiciona al TQDS como un posible candidato para su uso en procesos de computación cuántica basados en dispositivos de estado sólido.

Calculó la corriente a través del dispositivo (que ya se sabe posee resonancias correspondientes a los anti-cruces en el espectro) y el espectro de energías mediante diagonalización numérica del hamiltoniano. Asimismo, calculó también el número de Schmidt como función de ϵ_b para el estado base y tres estados excitados.

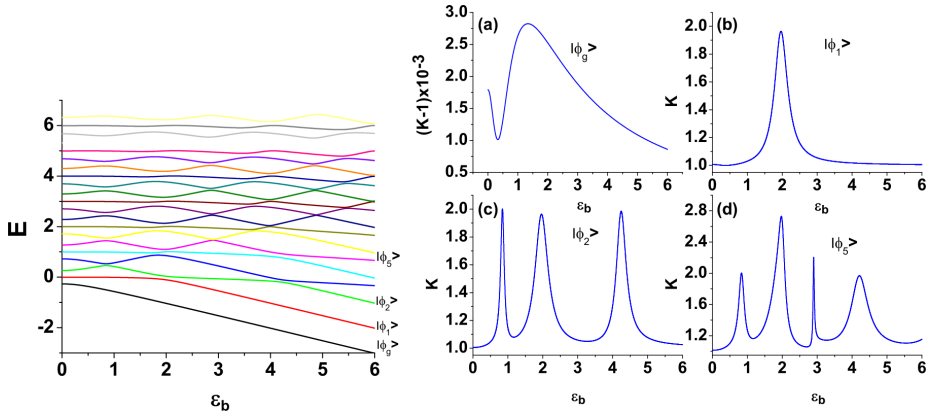


Figura 2.5: Del lado izquierdo vemos la dinámica de las primeras 20 energías como función de ϵ_b con definidos anti-cruces, mientras que del lado derecho se muestra el número de Schmidt para 4 eigenestados del sistema también en función de ϵ_b y con $V_0 = 0.5$, $x_0 = 5$ y $\alpha = 0.2$ [20].

Es claro que debe haber una correlación si los máximos del número de Schmidt corresponden a los anti-cruces en el espectro de energía, mismos que caracterizan la corriente a través del sistema; éste es un resultado importante ya que se relaciona un fenómeno puramente cuántico (entrelazamiento) con una cantidad macroscópica medible (corriente), de modo que las propiedades de transporte electrónico se pueden relacionar directamente con el grado de entrelazamiento.

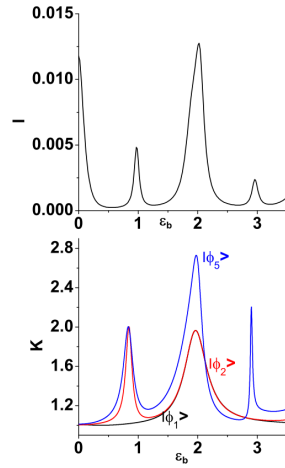


Figura 2.6: En la parte superior de la imagen se observa la corriente electrónica a través del TQDS para los parámetros $V_0 = 0.5$, $x_0 = 5$ y $\alpha = 0.2$ en función de ϵ_b . En la parte inferior vemos al número de Schmidt en función de ϵ_b para tres de los eigenestados del sistema, donde se aprecia que los máximos en el número de Schmidt coinciden con los máximos de la corriente en el dispositivo [20].

Por otro lado, Chagollán et al. [21] propuso en 2018 estudiar efectos no lineales en el entrelazamiento híbrido del TQDS, no linealidad que se deriva de sustituir al oscilador armónico cuántico simple con el que previamente se había estado modelando el movimiento del QD central por un oscilador cuántico no lineal (modelo de Duffing), el cual se caracteriza por añadir un término a la cuarta potencia en la posición al oscilador simple. Observó que la no linealidad afecta notablemente el espectro de energía del sistema y sus propiedades de transporte. Sin embargo, obtuvo que la correlación entre la corriente y el grado de entrelazamiento observada en el caso lineal persiste en el caso no lineal.

Capítulo 3

Modelo de Rabi y extensión a tres niveles

En la búsqueda de una solución analítica para el transbordador de triple punto cuántico proponemos iniciar la investigación explorando una de las generalizaciones del modelo de Rabi. Recordemos que nuestro objeto de estudio es un sistema de tres estados en interacción con los modos de oscilación de un elemento móvil del mismo. Por otro lado, el modelo de Rabi analiza la interacción de un sistema de dos estados con un campo electromagnético oscilante. Por lo anterior, es natural pensar que el TQDS pudiera ser un análogo del modelo de Rabi pero considerando tres estados, entonces, un buen punto de partida sería examinar una extensión del modelo de Rabi, particularmente a un sistema de tres niveles, y compararlo con el TQDS a manera de comprobar si dicha analogía puede ser fundamentada matemáticamente y en efecto ambos sistemas sean equivalentes.

En el año 2014, Y. Z. Zhang [28] propuso una generalización del modelo cuántico de Rabi para átomos de N estados extendiendo la simetría Z_2 del hamiltoniano del modelo de Rabi de dos niveles a una simetría Z_N para un modelo de N niveles y admitiendo además que algunos parámetros del sistema sean complejos siempre y cuando mantengan el hamiltoniano hermitiano. La simetría Z_N permite una diagonalización parcial del Hamiltoniano mediante la transformación unitaria de Foulton-Gouterman, lo cual, trasladándonos a la representación de Bargmann, nos conduciría a la obtención de algunas eigenenergías aisladas del sistema y sus correspondientes eigenestados.

3.1. El modelo de Rabi

En el año de 1931, E. Phipps y O. Stern estudiaron de manera experimental el siguiente problema (el cual fue reproducido por R. Frisch y E. Segré dos años después en el mismo laboratorio): Un haz de átomos neutros de potasio se divide en dos haces al atravesar un campo magnético inhomogéneo (experimento de Stern-Gerlach); uno de estos haces es seleccionado por una abertura que lo dirige a una región donde el campo magnético cambia rápidamente, tanto en dirección como en magnitud, y el haz

resultante es entonces analizado mediante un campo similar al de la primera sección. La interrogante fue cuál sería la cuantización espacial resultante debido a un campo magnético rápidamente variable. Esta pregunta fue discutida teóricamente por P. Gütinger en 1931 y una solución completa para un tipo particular de campo magnético obtenible en el laboratorio fue presentada por E. Majorana en 1932.

Todos los resultados experimentales de los autores aquí mencionados fueron obtenidos sin tomar en consideración efectos del espín nuclear, de modo que, en 1936 I. I. Rabi [22] retomó el trabajo de Frisch y Segré e introdujo un modelo para discutir el efecto de un campo magnético débil que varía rápidamente en el tiempo sobre un átomo orientado que posee espín nuclear. Experimentalmente, un átomo moviéndose a velocidad constante a través de un campo magnético cuya magnitud y dirección varían a lo largo de la trayectoria del mismo es equivalente a un átomo en reposo sujeto a un campo magnético como el ya descrito, y el caso más simple corresponde a un sistema de dos estados.

El modelo de Rabi es un modelo que describe la interacción más simple entre un sistema de dos niveles y un campo electromagnético. Puede ser visto desde dos perspectivas, semiclásica y cuántica [23]. El modelo semiclásico de Rabi se caracteriza porque el átomo se trata como un elemento de la mecánica cuántica mientras que el campo electromagnético es modelado clásicamente. Por otro lado, el modelo cuántico de Rabi describe la interacción más simple entre luz cuántica y materia, es decir, un átomo de dos niveles acoplado a un campo electromagnético cuantizado monomodal [24]. Este último tiene aplicaciones en una gran variedad de sistemas físicos que incluyen cavidades y circuitos cuántico-electrodinámicos (quantum electrodynamics, QED), puntos cuánticos, entre otros, por lo cual lo estudiaremos más a detalle.

Consideremos un átomo de dos estados etiquetados como $|g\rangle$ (para el estado base) y $|e\rangle$ (para el estado excitado) que se encuentra interactuando en una cavidad con un campo electromagnético monomodal de la forma [24]:

$$\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{e}} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}} (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger) \sin(kz), \quad (3.1)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}$ es un vector unitario que representa una dirección arbitraria de polarización, ϵ_0 se refiere a la permitividad eléctrica en el vacío, ω es la frecuencia de oscilación del campo, \hbar es la constante del Planck y V el volumen de la cavidad. El hamiltoniano total del sistema estará dado por las contribuciones energéticas siguientes: la energía debido a la interacción del átomo con el campo electromagnético externo, la energía atómica (asociada a los estados accesibles del átomo) y la energía atribuida a las oscilaciones del campo electromagnético libre.

El hamiltoniano de interacción se escribe de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{INT} = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{E}}, \quad (3.2)$$

siendo $\hat{\mathbf{d}}$ el operador de momento dipolar total el cual se representa como un vector cuyas componentes son operadores que corresponden al momento dipolar en cada una de las direcciones espaciales.

Si definimos al parámetro g como:

$$g = -\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}} \sin(kz), \quad (3.3)$$

y a $\hat{d} = \hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{e}}$ como el operador de momento dipolar en la dirección de polarización del campo eléctrico, podemos reescribir (3.2) como sigue:

$$\hat{H}_{INT} = \hat{d}g(\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger). \quad (3.4)$$

En este punto es conveniente introducir a los llamados operadores de transición atómica y se definen como:

$$\hat{\sigma}_+ = |e\rangle \langle g|, \quad (3.5a)$$

$$\hat{\sigma}_- = |g\rangle \langle e| = \hat{\sigma}_+^\dagger, \quad (3.5b)$$

y el operador de inversión:

$$\hat{\sigma}_z = |e\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g|. \quad (3.6)$$

Estos operadores obedecen las siguientes reglas de conmutación y el álgebra de espín de Pauli:

$$[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-] = \hat{\sigma}_z, \quad (3.7a)$$

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_\pm] = 2\hat{\sigma}_\pm. \quad (3.7b)$$

Debido a consideraciones de paridad, sólo los elementos fuera de la diagonal del operador dipolar en la dirección de la polarización del campo son diferentes de cero: $\langle e|\hat{d}|e\rangle = 0 = \langle g|\hat{d}|g\rangle$. Esto puede verse en analogía con el modelo del átomo de hidrógeno, para el cual consideraremos sólo dos estados accesibles: el estado base y el primer estado excitado. En una representación funcional en el espacio de posiciones para los eigenestados base y excitado, se conoce que ambas eigenfunciones gozarán de una paridad natural bien definida. Regresando a nuestro modelo, el operador de momento dipolar se define en términos del operador de posición de modo que \hat{d} fungiría como

una función impar en el espacio de posiciones a la hora de calcular el producto interno (integral sobre todo el espacio) de él entre dos estados. Entonces, cuando el producto se calcula para estados iguales (en este caso entre estados excitados o estados base) y tomando en cuenta que al igual que en el átomo de hidrógeno las eigenfunciones correspondientes a ambos estados tienen una paridad definida, el resultado es cero, no así para cuando el cálculo es entre estados diferentes (base-excitado o excitado-base). Sabiendo esto y estableciendo que $\langle e|\hat{d}|g\rangle = d$ (donde, sin pérdida de generalidad se asume que d es real), podemos escribir al operador dipolar de la siguiente forma:

$$\hat{d} = d|g\rangle\langle e| + d^*|e\rangle\langle g| = d(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-). \quad (3.8)$$

Finalmente, el hamiltoniano de interacción toma la forma siguiente:

$$\hat{H}_{INT} = \hbar\lambda(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (3.9)$$

habiendo definido a $\lambda = \frac{dg}{\hbar}$.

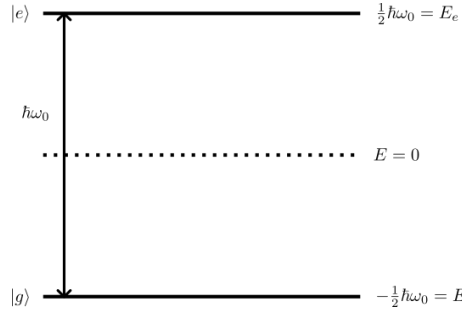


Figura 3.1: Esquema del modelo atómico de dos estados.

Por otro lado, si definimos que el cero de energía sea justo a la mitad entre los estados $|g\rangle$ y $|e\rangle$ como se muestra en la figura 3.1, entonces podemos escribir el hamiltoniano atómico libre como sigue:

$$\hat{H}_{AT} = E_e|e\rangle\langle e| + E_g|g\rangle\langle g| = E_e(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|),$$

que en términos del operador de inversión queda como:

$$\hat{H}_{AT} = \frac{1}{2}(E_e - E_g)\hat{\sigma}_z = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_z, \quad (3.10)$$

donde la diferencia de energía entre los estados es caracterizada por la frecuencia de transición $\omega_0 = \frac{(E_e - E_g)}{\hbar}$ y $E_e = -E_g = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

Por último, el hamiltoniano asociado al campo libre es, descartando el término energético del punto cero:

$$\hat{H}_{CAM} = \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}. \quad (3.11)$$

El hamiltoniano total del sistema considerando todas las contribuciones energéticas queda descrito por:

$$\hat{H} = \hat{H}_{AT} + \hat{H}_{CAM} + \hat{H}_{INT}, \quad (3.12)$$

y sustituyendo (3.9), (3.10) y (3.11) en (3.12) se obtiene:

$$\hat{H}_{RABI} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\boldsymbol{\sigma}}_z + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}} + \hbar\lambda(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_+ + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_-)(\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger). \quad (3.13)$$

A la expresión (3.13) se le conoce como el hamiltoniano del modelo cuántico de Rabi [24].

Debido a la simplicidad de su hamiltoniano, el modelo de Rabi ha servido de base teórica para el entendimiento de las interacciones entre luz y materia, con aplicaciones en óptica cuántica, física de estado sólido [25] e información cuántica [26].

En la mayoría de las condiciones experimentales, tal es el caso de cavidades QED, la creación y aniquilación simultánea de una excitación tanto en el átomo como en la cavidad representan procesos no conservativos que son prácticamente improbables. Desarrollando el tercer término del hamiltoniano de Rabi (3.13) obtenemos cuatro términos de los cuales dos no conservan energía; el término $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_+\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ corresponde a la emisión de un fotón mientras el átomo va de un estado base a un estado excitado (creación simultánea), el término $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_-\hat{\mathbf{a}}$ corresponde a la absorción de un fotón mientras el átomo pasa de un estado excitado al estado base (aniquilación simultánea). Al descartar los términos no conservativos, el hamiltoniano queda de la siguiente forma:

$$\hat{H}_{JC} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\boldsymbol{\sigma}}_z + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}} + \hbar\lambda(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_+\hat{\mathbf{a}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_-\hat{\mathbf{a}}^\dagger). \quad (3.14)$$

Esta última expresión (3.14) se refiere al modelo de Jaynes-Cummings (JC), el cual fue introducido en 1963 por E. T. Jaynes y F. W. Cummings [27] y describe la interacción de un átomo de dos niveles con un modo cuantizado de oscilación en una cavidad óptica. Notemos que el modelo JC puede ser obtenido de aplicar la aproximación de onda rotatoria (RWA) al modelo de Rabi. La RWA es una aproximación que desprecia términos en el hamiltoniano que oscilan rápidamente (anti-resonantes) y es válida cuando el acoplamiento entre el átomo y el campo es débil y se está en cuasi-resonancia (la radiación electromagnética aplicada es de baja intensidad y se encuentra en cercana resonancia con la frecuencia de transición atómica). Esto es, en el régimen en el que $\frac{\hbar\lambda}{\omega} \ll 1$ y $\omega \approx \omega_0$, el modelo de Rabi se aproxima al modelo JC [23].

3.2. Generalización del modelo de Rabi a N estados

Y. Z. Zhang propuso lo que consideró una generalización natural del modelo de Rabi para un sistema de N estados, la cual está dada por un hamiltoniano con simetría Z_N ; de tal forma que, similar al caso en el que un átomo de dos niveles es modelado por espines de dos estados (matrices de Pauli), un átomo de N niveles sería modelado por un análogo de las matrices de Pauli en un espacio vectorial de N dimensiones, algo que podría ser pensado como espines de N estados. Estableció entonces dos operadores básicos llamados \hat{Z} y \hat{X} , los cuales generalizan las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_z$ y $\hat{\sigma}_x$ respectivamente y satisfacen las siguientes relaciones [28]:

$$\hat{Z}^N = \hat{X}^N = 1, \quad (3.15)$$

$$\hat{Z}^\dagger = \hat{Z}^{N-1}, \quad (3.16)$$

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{N-1}, \quad (3.17)$$

$$\hat{Z}\hat{X} = w\hat{X}\hat{Z}, \quad (3.18)$$

$$w = e^{\frac{2\pi i}{N}}, \quad (3.19)$$

$$\hat{X}^\dagger\hat{Z} = w\hat{Z}\hat{X}^\dagger; \quad (3.20)$$

de modo que para $N = 2$ las relaciones anteriores deberán reducirse a las propiedades de las matrices de Pauli y particularmente la expresión (3.19) estaría dando sus eigenvalores. Entonces, la generalización a N estados que aquí se expone del modelo de Rabi se construye de tal forma que al quedarnos con dos estados ($N = 2$), se recupere el hamiltoniano de Rabi, lo cual nos conduce a un hamiltoniano generalizado de la forma [28]:

$$H_N = \beta a^\dagger a + \Delta \sum_{m=1}^{N-1} \alpha_m \hat{Z}^m + \gamma (\hat{X}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{X} \hat{a}), \quad (3.21)$$

donde los parámetros β , Δ y γ son reales mientras que los coeficientes α_m son complejos y obedecen $\alpha_m^\dagger = \alpha_{N-m}$ de modo que el hamiltoniano sea hermitiano. Este hamiltoniano fue propuesto como la generalización más simple y hermitiana del modelo de Rabi.

Tomando $N = 2$ en (3.21), escribimos:

$$\hat{H}_2 = \beta \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \Delta \hat{\sigma}_z + \gamma \hat{\sigma}_x (\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}), \quad (3.22)$$

que con un adecuado manejo de los parámetros β , Δ y γ y tomando en cuenta que $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-$, se reproduce la expresión (3.13).

Un punto clave en el desarrollo de este método es que la simetría Z_2 que se dice posee el hamiltoniano de Rabi se extiende en hamiltonianos que representan sistemas que consideran más de dos estados: 2 estados, simetría Z_2 ; 3 estados, simetría Z_3 ; N estados, simetría Z_N . Una forma de mostrar que un hamiltoniano posee alguna simetría es verificar si el hamiltoniano conmuta con el operador generador de dicha simetría lo cual implicará que existe una base que los diagonaliza a ambos; en este caso, el operador generador de la simetría Z_N tiene la forma siguiente [28]:

$$\Pi_N = \hat{Z} e^{i \frac{2\pi}{N} \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}. \quad (3.23)$$

A continuación mostramos que, en efecto, \hat{H}_2 tiene simetría Z_2 . El operador generador de la simetría correspondiente es:

$$\Pi_2 = \hat{\sigma}_x e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}. \quad (3.24)$$

Tomando a \hat{H}_2 de (3.22) y a Π_2 como el generador de la simetría, procedemos a calcular el conmutador. Obtenemos:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_2, \Pi_2] &= [\beta \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] + [\Delta \hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] + [\gamma \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] \\ &\quad + [\gamma \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Desarrollaremos uno a uno los conmutadores que conforman $[\hat{H}_2, \Pi_2]$ para posteriormente sustituirlos en (3.25).

Para el primer conmutador:

$$[\beta \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] = \hat{\sigma}_z [\cancel{\beta \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}, e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}}^0] + [\cancel{\beta \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}_z}]^0 e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} = 0. \quad (3.26)$$

Para el segundo conmutador:

$$[\Delta \hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] = \Delta \left(\hat{\sigma}_z [\cancel{\hat{\sigma}_z, e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}}^0] + [\cancel{\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_z}]^0 e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right) = 0. \quad (3.27)$$

Para el tercer conmutador:

$$\begin{aligned} [\gamma \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] &= \gamma \left(\hat{\sigma}_z [\hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger, e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] + [\hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\sigma}_z] e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right) \\ &= -\gamma \left(\hat{\sigma}_z [e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger] + [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger] e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right) \\ &= -\gamma \left(\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x [e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] + \hat{\sigma}_z [\cancel{e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\sigma}_x}]^0 \hat{\mathbf{a}}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \hat{\sigma}_x [\cancel{\hat{\sigma}_z, \hat{\mathbf{a}}^\dagger}]^0 e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} + [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] \hat{\mathbf{a}}^\dagger e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Teniendo en cuenta las relaciones de conmutación de las matrices de Pauli, usamos que $[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y$ y lo sustituimos en (3.28), entonces:

$$[\gamma \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] = -\gamma \left(\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x [e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] + 2i\hat{\sigma}_y \hat{\mathbf{a}}^\dagger e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right). \quad (3.29)$$

Y por último, para el cuarto conmutador:

$$[\gamma \hat{\sigma}_x \hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}_z e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}] = -\gamma \left(\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x [e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}] + 2i\hat{\sigma}_y \hat{\mathbf{a}} e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right). \quad (3.30)$$

Sustituyendo (3.26), (3.27), (3.29) y (3.30) en (3.25):

$$[\hat{\mathbf{H}}_2, \Pi_2] = -\gamma \left(\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x \left([e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] + [e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}] \right) + 2i\hat{\sigma}_y (\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}) e^{i\pi \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}} \right). \quad (3.31)$$

Para el cálculo de los conmutadores de la expresión (3.31), hacemos uso de la fórmula Baker-Campbell-Hausdorff (BCH), la cual está dada por la siguiente expresión:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots, \quad (3.32)$$

donde \hat{A} y \hat{B} son operadores cualquiera.

Sean $\hat{B} = \hat{a}^\dagger$ y $\hat{A} = i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}$, entonces:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= [i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = [i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \\ &= -i\pi[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a}] \\ &= -i\pi\left(\hat{a}^\dagger[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a}\right) \\ &= i\pi\hat{a}^\dagger, \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= [i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}, i\pi\hat{a}^\dagger] \\ &= -(i\pi)^2\left(\hat{a}^\dagger[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a}\right) \\ &= (i\pi)^2\hat{a}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Sustituyendo (3.33) y (3.34) en (3.32):

$$e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}\hat{a}^\dagger e^{-i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} = \hat{a}^\dagger + (i\pi)\hat{a}^\dagger + \frac{(i\pi)^2}{2!}\hat{a}^\dagger + \dots. \quad (3.35)$$

Multiplicando la cantidad $e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}$ por el lado derecho en la ecuación (3.35):

$$e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + (i\pi)\hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \frac{(i\pi)^2}{2!}\hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \dots, \quad (3.36)$$

$$e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} = (i\pi)\hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \frac{(i\pi)^2}{2!}\hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \dots. \quad (3.37)$$

Identificamos del lado izquierdo de la ecuación (3.37) el conmutador de $e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}$ con el operador \hat{a}^\dagger y sumamos un cero convenientemente del lado derecho de la misma

ecuación, se obtiene:

$$\begin{aligned}
[e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{(i\pi)^0}{0!} \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \frac{(i\pi)}{1!} \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \frac{(i\pi)^2}{2!} \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + \dots - \frac{(i\pi)^0}{0!} \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} \\
&= \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi)^n}{n!} \right) \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} - \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} \\
&= e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} - \hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}, \\
[e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}, \hat{a}^\dagger] &= -2\hat{a}^\dagger e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}. \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Siguiendo el mismo procedimiento a partir de la ecuación (3.32) pero tomando esta vez $\hat{B} = \hat{a}$ y $\hat{A} = i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}$:

$$[e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}, \hat{a}] = -2\hat{a} e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}}. \tag{3.39}$$

Sustituyendo (3.38) y (3.39) en (3.31), factorizando:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}_2, \Pi_2] &= -\gamma \left(-2\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} + 2i\hat{\sigma}_y (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} \right) \\
&= -\gamma (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) e^{i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}} (-2\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + 2i\hat{\sigma}_y), \tag{3.40}
\end{aligned}$$

y tomando en cuenta que $\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y$,

$$[\hat{H}_2, \Pi_2] = 0. \tag{3.41}$$

De modo que podemos afirmar que \hat{H}_2 posee la simetría Z_2 que genera el operador Π_2 .

3.2.1. Caso N=3

Para un sistema de tres niveles, partiendo de la ecuación (3.21) [28], y escogiendo que $\alpha_1 = \alpha_2^\dagger = e^{i\phi}$ donde ϕ es un parámetro real, el hamiltoniano se escribe como sigue:

$$\hat{H}_3 = \beta \hat{a}^\dagger \hat{a} + \Delta (e^{i\phi} \hat{Z} + e^{-i\phi} \hat{Z}^\dagger) + \gamma (\hat{X}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{X} \hat{a}). \tag{3.42}$$

Dado que el hamiltoniano de Rabi posee una simetría Z_2 , se espera que de la generalización aquí planteada, \hat{H}_N posea asimismo la simetría Z_N , donde un caso particular sería tomar $N = 3$. Tal y como se hizo en el caso $N = 2$, se puede verificar que \hat{H}_3 posee la simetría Z_3 calculando el conmutador de \hat{H}_3 con el operador generador de la simetría correspondiente, en este caso,

$$\Pi_3 = \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}. \quad (3.43)$$

Tomando a \hat{H}_3 de (3.42), a Π_3 de (3.43) y considerando la distributividad de la operación de conmutación sobre la suma, procedemos a calcular el conmutador correspondiente:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_3, \Pi_3] &= \beta[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] + \Delta e^{i\phi}[\hat{Z}, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] + \Delta e^{-i\phi}[\hat{Z}^\dagger, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] \\ &\quad + \gamma[\hat{X}^\dagger\hat{a}^\dagger, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] + \gamma[\hat{X}\hat{a}, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}]. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Nuevamente, tomamos cada uno de los conmutadores que conforman la ecuación (3.44) y los estudiamos por separado para posteriormente sustituirlos en la misma ecuación.

Para el primer conmutador:

$$[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] = \hat{Z} [\hat{a}^\dagger\hat{a}, e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] + [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{Z}] e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}} = 0. \quad (3.45)$$

Para el segundo conmutador:

$$[\hat{Z}, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] = \hat{Z} [\hat{Z}, e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] + [\hat{Z}, \hat{Z}] e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}} = 0. \quad (3.46)$$

Para el tercer conmutador:

$$\begin{aligned} [\hat{Z}^\dagger, \hat{Z} e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] &= \hat{Z} [\hat{Z}^\dagger, e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}] + [\hat{Z}^\dagger, \hat{Z}] e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}} \\ &= [\hat{Z}^\dagger, \hat{Z}] e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a}}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

De (3.16) tenemos que para $N = 3$, $\hat{\mathbf{Z}}^\dagger = \hat{\mathbf{Z}}^2$, sustituyéndolo en (3.47):

$$[\hat{\mathbf{Z}}^\dagger, \hat{\mathbf{Z}}]e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} = \cancel{[\hat{\mathbf{Z}}^2, \hat{\mathbf{Z}}]}^0 e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} = 0. \quad (3.48)$$

Para el cuarto conmutador:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\mathbf{Z}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] &= \hat{\mathbf{Z}}[\hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger, e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] + [\hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\mathbf{Z}}]e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} \\ &= -\hat{\mathbf{Z}}[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger] - [\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger]e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} \\ &= -\hat{\mathbf{Z}}\left(\hat{\mathbf{X}}^\dagger[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] + \cancel{[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger]}^0 \hat{\mathbf{a}}^\dagger\right) \\ &\quad - \left(\hat{\mathbf{X}}^\dagger\cancel{[\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger]}^0 + [\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger]\hat{\mathbf{a}}^\dagger\right)e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} \\ &= -\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}^\dagger[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] - [\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger]\hat{\mathbf{a}}^\dagger e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Dado que $[\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger] = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}^\dagger - \hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{Z}}$ y de la ecuación (3.20) se tiene que $\hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{Z}} = \omega\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}^\dagger$, entonces:

$$[\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}^\dagger] = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}^\dagger(1 - \omega). \quad (3.50)$$

Por otro lado, del uso de la fórmula BCH para el cálculo de los conmutadores en el caso $N = 2$ se puede extraer que:

$$[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] = e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} - \hat{\mathbf{a}}^\dagger e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \quad (3.51)$$

sustituyendo (3.50) y (3.51) en (3.49) y considerando de (3.19) que $\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ para $N = 3$, se obtiene que:

$$[\hat{\mathbf{X}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\mathbf{Z}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] = -\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}^\dagger\left((e^{i\frac{2\pi}{3}} - 1)\hat{\mathbf{a}}^\dagger e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} + (1 - \omega)\hat{\mathbf{a}}^\dagger e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}\right) = 0. \quad (3.52)$$

Para el quinto conmutador:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{Z}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] &= \hat{\mathbf{Z}}[\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}, e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] + [\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{Z}}]e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} \\
&= -\hat{\mathbf{Z}}[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}] - [\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}]e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} \\
&= -\hat{\mathbf{Z}}\left(\hat{\mathbf{X}}[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}] + [e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{X}}] \hat{\mathbf{a}}^\dagger\right) \\
&\quad - \left(\hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{a}}] + [\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}]\hat{\mathbf{a}}\right)e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} \\
&= -\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}] - [\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}]\hat{\mathbf{a}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}. \tag{3.53}
\end{aligned}$$

Dado que $[\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}} - \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{Z}}$ y tomando de la ecuación (3.18) que $\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}} = \omega\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{Z}}$, entonces:

$$[\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{Z}}(\omega - 1). \tag{3.54}$$

Nuevamente, del uso de la fórmula BCH tenemos que:

$$[e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \hat{\mathbf{a}}] = e^{-i\frac{2\pi}{3}}\hat{\mathbf{a}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} - \hat{\mathbf{a}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}, \tag{3.55}$$

sustituyendo (3.54) y (3.55) en (3.53) y considerando también de (3.19) que $\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ para $N = 3$, obtenemos:

$$[\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{Z}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] = \hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}(1 - e^{-i\frac{2\pi}{3}})\hat{\mathbf{a}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} + (1 - e^{i\frac{2\pi}{3}})\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{a}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}. \tag{3.56}$$

De (3.18), $\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{Z}} = \frac{1}{\omega}\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}} = e^{-i\frac{2\pi}{3}}\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}$, reemplazándolo en la ecuación (3.56),

$$[\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{Z}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}}] = -\hat{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{X}}(1 - e^{-i\frac{2\pi}{3}} - 1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}})\hat{\mathbf{a}}e^{i\frac{2\pi}{3}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}}} = 0. \tag{3.57}$$

Finalmente, de sustituir las expresiones (3.45), (3.46), (3.48), (3.52) y (3.57) en la ecuación (3.44):

$$[\hat{\mathbf{H}}_3, \Pi_3] = 0, \tag{3.58}$$

y se confirma que \hat{H}_3 posee la simetría Z_3 que genera el operador Π_3 .

El hecho de que \hat{H}_N sea poseedor de la simetría Z_N permite una diagonalización parcial de éste mediante la transformación unitaria generalizada de Fulton-Gouterman [29], la cual aprovecha la simetría del sistema para reducir el hamiltoniano a una forma unidimensional que resulta más conveniente para que posteriormente sea posible encontrar algunas energías exactas y sus respectivos eigenestados cambiando a la representación de Bargmann. En este sentido, \hat{H}_2 y \hat{H}_3 , al poseer la simetría correspondiente, son elegibles para ser solucionados por este método.

La generalización del modelo de Rabi propuesta por Zhang está basada en dos puntos importantes: la extensión de la simetría Z_2 a simetría Z_N para sistemas de más de dos estados y las propiedades que definen a los operadores generalizados $\hat{\mathbf{X}}$ y $\hat{\mathbf{Z}}$ que son asimismo las responsables de que la simetría se extienda.

Dado el parecido estructural entre \hat{H}_{TQDS} de la ecuación (1.14) y el hamiltoniano de Rabi (3.22), nos fue natural creer que una generalización del modelo de Rabi proveería un modelo de interacción de tres estados que sería compatible con el transbordador de triple punto cuántico, pero particularmente de esta generalización, el hamiltoniano asociado a $N = 3$ (3.42) no es equivalente a \hat{H}_{TQDS} a pesar de que ambos hamiltonianos representan a sistemas de tres estados en interacción con modos vibracionales. Recordamos a continuación la estructura de \hat{H}_{TQDS} en su forma matricial:

$$\hat{H}_{TQDS} = \hbar \omega \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \begin{pmatrix} \epsilon_l & -V_1 & 0 \\ -V_1 & \frac{\epsilon_l + \epsilon_r}{2} & -V_1 \\ 0 & -V_1 & \epsilon_r \end{pmatrix} + \Delta x_{zp} \begin{pmatrix} 0 & V_0 \alpha & 0 \\ V_0 \alpha & \frac{\epsilon_b}{2x_0} & -V_0 \alpha \\ 0 & -V_0 \alpha & 0 \end{pmatrix} (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger).$$

Notemos de (3.42) que si $\hat{\mathbf{X}}$ fuera hermitiano (lo cual violaría la ecuación (3.17)), eso haría a \hat{H}_3 mucho más parecido a \hat{H}_{TQDS} , no obstante, también provocaría una ruptura de la simetría Z_3 pues \hat{H}_3 no conmutaría más con Π_3 ; en el mismo sentido se podría hacer el comentario para el término que incluye $\hat{\mathbf{Z}}$ y $\hat{\mathbf{Z}}^\dagger$ si tomamos al operador $\hat{\mathbf{Z}}$ como hermitiano (lo cual violaría la expresión (3.16)), pero en este caso, cambiar $\hat{\mathbf{Z}}$ por $\hat{\mathbf{Z}}^\dagger$ y viceversa no modifica el cálculo del conmutador el cual sigue anulándose para este término. De modo que intentar que \hat{H}_3 se parezca a \hat{H}_{TQDS} rompe la simetría Z_3 de \hat{H}_3 , de lo que puede concluirse que \hat{H}_{TQDS} no posee la simetría Z_3 y resulta imposible usar este método para encontrar las energías y eigenestados del transbordador de triple punto cuántico, así que el método fue descartado.

Capítulo 4

Soluciones exactas aisladas para sistemas del tipo óptico-cuántico

En el año de 1986, Marek Kuś y Maciej Lewenstein desarrollaron un método que permitiría encontrar, en la representación de Bargmann, algunas soluciones exactas para sistemas físicos cuyo hamiltoniano fuera de la forma [30]:

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \hat{\Omega} + \hat{\lambda}(\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}) \quad (4.1)$$

donde $\hat{\Omega}$ y $\hat{\lambda}$ son matrices hermitianas de $N \times N$ (pero en particular estudiaremos el caso $N = 3$ en el que $\hat{\Omega}$ y $\hat{\lambda}$ son matrices de 3×3); $\hat{\Omega}$ es un hamiltoniano atómico libre y $\hat{\lambda}$ es una matriz de elementos de transición dipolar.

Recordando que la forma matricial del transbordador de triple punto cuántico (1.14) es la siguiente:

$$\hat{H}_{TQDS} = \hbar \omega \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \begin{pmatrix} \epsilon_l & -V_1 & 0 \\ -V_1 & \frac{\epsilon_l + \epsilon_r}{2} & -V_1 \\ 0 & -V_1 & \epsilon_r \end{pmatrix} + \Delta x_{zp} \begin{pmatrix} 0 & V_0 \alpha & 0 \\ V_0 \alpha & \frac{\epsilon_b}{2x_0} & -V_0 \alpha \\ 0 & -V_0 \alpha & 0 \end{pmatrix} (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger),$$

y tomando para fines prácticos unidades tales que $\hbar = \omega = 1$, resulta evidente que la estructura de \hat{H}_{TQDS} lo hace un candidato idóneo para intentar resolverlo por este método, el cual será expuesto a detalle en las siguientes secciones.

4.1. El espacio de Bargmann

El espacio de Bargmann es un espacio de Hilbert que es generado por los estados coherentes. Los estados coherentes son eigenestados del operador de aniquilación \hat{a} que obedecen la siguiente ecuación de eigenvalores [31]:

$$\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle,$$

donde, dado que \hat{a} no es hermitiano, el eigenvalor z es en principio complejo. El operador \hat{a} y su adjunto \hat{a}^\dagger (operador de creación) satisfacen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1, \\ [\hat{a}, \hat{a}] &= 0 = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]. \end{aligned}$$

Por otro lado, el operador $\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{N}$ es conocido como el operador de número y sus eigenestados tienen la forma:

$$|n\rangle = (n!)^{-\frac{1}{2}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle.$$

Al ket $|0\rangle$ se le conoce como el estado vacío y es tal que

$$\hat{a} |0\rangle = 0.$$

Las propiedades en el espacio de Bargmann son análogas a las que se tienen en el espacio de configuraciones, de modo que así como las funciones de onda en el espacio de configuraciones deben ser continuas tanto en primera como en segunda derivada y cuadrado integrables, las funciones de onda en el espacio de Bargmann deben ser enteras (holomorfas, diferenciables en cada punto de su dominio en el plano complejo) y no diverger al cuadrarlas, esto es, que exista un indicador de qué tan rápido crece para asegurar la convergencia [31]. En el espacio de Bargmann, los operadores de aniquilación y creación tienen la siguiente representación:

$$\hat{a}^\dagger = z \quad , \quad \hat{a} = \frac{d}{dz}.$$

4.2. Solución de la Ecuación de Schrödinger en la representación de Bargmann

En la representación de Bargmann, los eigenvectores de \hat{H} se pueden escribir como vectores de N componentes dependientes de la variable z : $\Psi(z)$. En este nuevo espacio, se puede escribir la ecuación de Schrödinger estacionaria como sigue [30]:

$$\left[z \frac{d}{dz} + \hat{\lambda} \left(z + \frac{d}{dz} \right) + \hat{\Omega} \right] \Psi(z) = E \Psi(z). \quad (4.2)$$

Considerando la representación en la que $\hat{\lambda}$ es diagonal y asumiendo diferentes todos sus eigenvalores, escribimos a continuación (4.2) para la i -ésima componente de $\Psi(z)$ [30]:

$$(z + \lambda_i) \frac{d}{dz} \Psi_i(z) = (E - \lambda_i z) \Psi_i(z) - \sum_{j=1}^N \Omega_{ij} \Psi_j(z), \quad (4.3)$$

lo que obtenemos es una ecuación diferencial de primer orden para $\Psi_i(z)$ con un punto singular en $z = -\lambda_i$ y que en general proveerá N soluciones independientes que conformarán a $\Psi(z)$.

Cada solución debe ser analítica en todo el plano, particularmente en los puntos singulares, por lo que se propone entonces que $\Psi_i(z)$ deberá comportarse como $(z + \lambda_i)^\rho$ en la vecindad de $z = -\lambda_i$ [30]. Una forma de hallar una solución para una ecuación diferencial ordinaria en el entorno de un punto singular regular es proponiendo como solución una serie de potencias infinita alrededor de la singularidad, lo cual es la base del método de Frobenius y nos asegura la analiticidad de la solución,

$$\Psi_i^F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^i (z + \lambda_i)^{\rho+n}.$$

Lo anterior nos conduce al siguiente polinomio indicial [30], el cual se define como el coeficiente de la menor potencia de z en la serie infinita:

$$\rho - E - \lambda_i^2 + \Omega_{ii} = 0.$$

En dirección de obtener mayor información sobre ρ , tomemos en consideración el vínculo entre los operadores de aniquilación y creación y la variable z en el espacio de Bargmann. Recordemos que el operador de número \hat{N} en términos de los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger obedece la siguiente ecuación de eigenvalor:

$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} |n\rangle = n |n\rangle.$$

Por otro lado sabemos que en el espacio de Bargmann se cumple la siguiente relación:

$$z \frac{d}{dz}(z^n) = n(z^n),$$

de modo que podemos afirmar, sin pérdida de generalidad, que existe una regla de correspondencia entre las potencias de z en la representación de Bargmann y los estados de número en el espacio de Fock como sigue:

$$z^n \doteq |n\rangle.$$

En este sentido, dada la exigencia de analiticidad para $\Psi_i(z)$ que la propone como una serie de potencias de z de la forma $\Psi_i^F(z)$, se establece que ρ deberá ser un número entero de manera que exista consistencia entre las representaciones. Esto es, de ρ admitir cualquier valor real, una potencia fraccional de z no correspondería a ningún estado en el espacio de Fock, por lo cual quedará restringida a valores enteros. Dicho lo anterior, podemos escribir E como sigue [30]:

$$E = n + \Omega_{ii} - \lambda_i^2, \quad (4.4)$$

para $n = 0, 1, 2, 3, \dots$.

Para que una función $\Psi(z)$ pueda ser solución de algún hamiltoniano se requiere que ésta cumpla con ciertas propiedades, una de ellas es que debe ser de cuadrado integrable, característica que no posee $\Psi_i^F(z)$ debido a que por sí sola es una serie infinita que diverge. Ante esta situación, Kus y Lewenstein propusieron como solución de (4.1) una función vectorial $\Psi_n^{\lambda_i}(z)$ con la siguiente estructura [30]:

$$\Psi_n^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z} (\mathbf{A}_n z^n + \mathbf{A}_{n-1} z^{n-1} + \dots + \mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_0), \quad (4.5)$$

donde \mathbf{A}_k son vectores columna N -dimensionales con $k = 0, 1, 2, \dots, n$. Notemos que el problema se reduce a encontrar precisamente los valores de los coeficientes \mathbf{A}_k . De la sustitución de (4.5) en la ecuación de Schrödinger escrita en el espacio de Bargmann (4.2) y agrupando para cada una de las potencias de z , se obtienen las relaciones siguientes [30]:

$$(\hat{\lambda} - \lambda_i)\mathbf{A}_n = 0, \quad (4.6a)$$

$$(\hat{\lambda} - \lambda_i)\mathbf{A}_{n-1} = (E + \lambda_i\hat{\lambda} - \hat{\Omega} - n)\mathbf{A}_n, \quad (4.6b)$$

$$\begin{aligned} (\hat{\lambda} - \lambda_i)\mathbf{A}_{n-k-1} &= (E + \lambda_i\hat{\lambda} + k - \hat{\Omega} - n)\mathbf{A}_{n-k} \\ &\quad - \hat{\lambda}(n-k+1)\mathbf{A}_{n-k+1} = 0 \quad n > k > 0, \end{aligned} \quad (4.6c)$$

$$(E - \hat{\Omega} + \lambda_i\hat{\lambda})\mathbf{A}_0 - \hat{\lambda}\mathbf{A}_1 = 0; \quad (4.6d)$$

de las cuales se pueden hacer algunos comentarios: la expresión (4.6a) es una ecuación de eigenvalor para el operador $\hat{\lambda}$ que nos da información sobre la estructura de \mathbf{A}_n , presentándolo como uno de sus eigenvectores y cuyas componentes, exceptuando la i -ésima, son iguales a cero. Por otro lado, considerando (4.6a) y del cumplimiento de la ecuación (4.6b) surge la siguiente relación:

$$(E - n - \Omega_{ii} + \lambda_i^2) = 0,$$

la cual coincide con la condición de analiticidad encontrada al explorar el método de Frobenius (4.4). Y por último, la ecuación (4.6d) representa una relación fija entre \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_0 .

En este punto es importante aclarar que la ecuación (4.5) provee las $3D$ soluciones que requiere el hamiltoniano en (4.1) para ser resuelto en su totalidad; esto es, para cada uno de los valores de λ_i donde $i = 1, \dots, N$ y estamos trabajando de fijo con $N = 3$, podemos asignar valores a n que van desde 0 hasta $D - 1$, recordando que D es el valor que asignamos a la dimensión del subespacio de modos vibracionales, y así generar todas las soluciones. La ecuación (4.5) no es una serie que mientras más grande sea el valor de n que se escoja, más se aproxime a ser una mejor solución de (4.1); si tomamos $n = 0$ obtendremos de (4.5) una solución que es diferente e independiente de la que se obtiene al tomar $n = 1$ pero asimismo es igual de válida, ambas son válidas, así como lo serán las que se obtengan de tomar $n = 2, 3, 4, \dots, D - 1$.

Consideraremos a continuación el caso $n = 1$, escribimos la $\Psi_n^{\lambda_i}(z)$ correspondiente y reescribamos las ecuaciones (4.6a-4.6d) como sigue:

$$\Psi_1^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z}(\mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_0), \quad (4.7a)$$

$$(\hat{\lambda} - \lambda_i)\mathbf{A}_1 = 0, \quad (4.7b)$$

$$(\hat{\lambda} - \lambda_i)\mathbf{A}_0 = (E + \lambda_i\hat{\lambda} - \hat{\Omega} - 1)\mathbf{A}_1, \quad (4.7c)$$

$$(E - \hat{\Omega} + \lambda_i\hat{\lambda})\mathbf{A}_0 - \hat{\lambda}\mathbf{A}_1 = 0. \quad (4.7d)$$

De estas nuevas relaciones es fácil ver que (4.7b) corresponde a una ecuación de eigenvalor que daría de manera directa la forma de \mathbf{A}_1 . Por otra parte, tenemos dos ecuaciones restantes completamente independientes que relacionan a \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_0 y al ambas ser igual de válidas, los \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_0 que buscamos serán aquellos que satisfagan ambas ecuaciones ((4.7c) y (4.7d)) simultáneamente. Estos coeficientes se sustituirán en (4.7a) permitiendo escribir la eigenfunción $\Psi_1^{\lambda_i}(z)$ para este caso, la cual deberá corresponder a algún valor de energía generado por (4.4).

4.2.1. Condiciones de compatibilidad

De la ecuación (4.7b) se obtiene \mathbf{A}_1 inequívocamente. Lo siguiente es determinar la forma del vector \mathbf{A}_0 a través del cálculo de sus componentes para cada uno de los eigenvalores λ_i en el sentido de poder construir $\Psi_1^{\lambda_i}(z)$. Para esto, manipulamos las ecuaciones (4.7b), (4.7c) y (4.7d). Tomando la j -ésima componente de (4.7c) obtenemos:

$$(\lambda_j - \lambda_i)A_{0j} = (E + \lambda_i^2 - 1)\delta_{ij} - \Omega_{ji}. \quad (4.8)$$

Ahora, para la j -ésima componente de (4.7d):

$$EA_{0j} - \sum_k \Omega_{jk}A_{0k} + \lambda_i \lambda_j A_{0j} - \lambda_i A_{1j} = 0, \quad (4.9)$$

si $j = i$, sustituyendo $E = 1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2$ y $A_{1j} = \delta_{ij}$, la ecuación (4.9) se escribe como sigue:

$$(1 + \Omega_{ii})A_{0i} - \sum_k \Omega_{ik}A_{0k} - \lambda_i = 0,$$

extrayendo el elemento $k = i$ de la sumatoria se obtiene:

$$\begin{aligned} A_{0i} - \sum_{k \neq i} \Omega_{ik}A_{0k} - \lambda_i &= 0, \\ A_{0i} &= \sum_{j \neq i} \Omega_{ij}A_{0j} + \lambda_i. \end{aligned} \quad (4.10)$$

De la ecuación (4.8) para $i \neq j$:

$$(\lambda_j - \lambda_i)A_{0j} = -\Omega_{ji},$$

$$A_{0j} = -\frac{\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i}. \quad (4.11)$$

Por otro lado, de la ecuación (4.9), tomando $j \neq i$, extrayendo el término $k = i$ de la sumatoria y sustituyendo $A_{1j} = \delta_{ij} = 0$ y $E = 1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2$:

$$(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2)A_{0j} - \sum_{k \neq i} \Omega_{jk}A_{0k} - \Omega_{ji}A_{0i} + \lambda_i\lambda_jA_{0j} = 0. \quad (4.12)$$

Tomando A_{0i} y A_{0j} de las ecuaciones (4.10) y (4.11) y sustituyendo en (4.12) podemos escribir:

$$(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i\lambda_j)\left(\frac{-\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i}\right) + \sum_{k \neq i} \Omega_{jk} \frac{\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} + \sum_{k \neq i} \Omega_{ji} \frac{\Omega_{ik}\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} = 0,$$

$$\left[\sum_{k \neq i} \frac{\Omega_{jk}\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} - \Omega_{ji} \left(\lambda_i - \sum_{k \neq i} \frac{|\Omega_{ik}|^2}{\lambda_k - \lambda_i} + \frac{(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i\lambda_j)}{\lambda_j - \lambda_i} \right) \right]_{j \neq i} = 0. \quad (4.13)$$

La expresión (4.13) es denominada condición de compatibilidad global [30] y surge a la par de la ecuación para las componentes A_{0j} , de modo que puede ser vista como una restricción o condicionamiento. Esto es, para que la A_{0j} obtenida de (4.11) sea válida es necesario que (4.13) se satisfaga, lo cual también condiciona a A_{0i} . De (4.13) se generan $N - 1$ condiciones de compatibilidad locales por cada uno de los eigenvalores λ_i , recordando que N se refiere a la dimensionalidad de las matrices $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$, que en nuestro caso estaría dada por el número de estados electrónicos del sistema. Es importante recalcar que el subíndice i siempre se refiere al i -ésimo eigenvalor de $\hat{\lambda}$ con $i = 1, 2, 3, \dots, N$ mientras que los subíndices j y k tienen la función de contadores y se encargan de etiquetar al resto.

Notemos que la condición de compatibilidad global (4.13) es generada considerando $n = 1$ y como n toma valores desde $0, 1, 2, \dots$, se tendrán tantas condiciones de compatibilidad globales diferentes como valores de n considerados.

Recapitulando sobre las bases del método expuesto en la sección 4.2, el escribir la ecuación de Schrödinger en la representación de Bargmann permite tratar el problema de obtener los eigenvalores y eigenfunciones de un hamiltoniano de la forma (4.1) como un problema de ecuaciones diferenciales de primer orden en el plano complejo. La exigencia de analiticidad de las soluciones facilita una expresión analítica para la energía

del sistema y al proponer una solución del tipo (4.5) se encuentra una expresión para la energía consistente con la condición de analiticidad anteriormente mencionada (4.4), reduciéndose así el ejercicio a encontrar los coeficientes (vectores) \mathbf{A}_k . En el proceso de calcular estos vectores de manera inequívoca para el caso $n = 1$ surge la llamada condición de compatibilidad, la cual involucra, en principio, a todos los parámetros que definen el sistema y de que se satisfaga depende la validez de los \mathbf{A}_k obtenidos, y asimismo, la existencia de una eigenfunción $\Psi_n^{\lambda_i}(z)$ asociada a un correspondiente eigenvalor generado por (4.4).

A continuación se aplica lo aprendido al hamiltoniano del transbordador de triple punto cuántico, que como ya se mencionó en la introducción de este capítulo, su estructura lo hace candidato para resolución por este método.

4.3. Soluciones aisladas del transbordador de triple punto cuántico

En el sentido de aplicar directamente al \hat{H}_{TQDS} el método descrito en la sección 4.2, definimos los operadores $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ como sigue:

$$\hat{\lambda} = \Delta x_{zp} \begin{pmatrix} 0 & V_0\alpha & 0 \\ V_0\alpha & \frac{\epsilon_b}{2x_0} & -V_0\alpha \\ 0 & -V_0\alpha & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \epsilon_l & -V_1 & 0 \\ -V_1 & \frac{\epsilon_l + \epsilon_r}{2} & -V_1 \\ 0 & -V_1 & \epsilon_r \end{pmatrix},$$

de modo que podemos expresar \hat{H}_{TQDS} de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{TQDS} = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{\Omega} + \hat{\lambda}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}).$$

En la eigenbase del operador $\hat{\lambda}$ (ver apéndice A para conocer de manera explícita los eigenvectores de $\hat{\lambda}$ y apéndice B para matriz de cambio de base), los operadores $\hat{\lambda}^{(\lambda)}$ y $\hat{\Omega}^{(\lambda)}$ quedan descritos por las siguientes matrices:

$$\hat{\lambda}^{(\lambda)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta x_{zp} \left(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right) & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta x_{zp} \left(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right) \end{pmatrix},$$

$$\hat{\Omega}^{(\lambda)} = \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \Omega_{13} \\ \Omega_{12} & \Omega_{22} & \Omega_{23} \\ \Omega_{13} & \Omega_{23} & \Omega_{33} \end{pmatrix},$$

donde etiquetaremos a los eigenvalores de $\hat{\lambda}$ como sigue: $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \Delta x_{zp} \left(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right)$ y $\lambda_3 = -\Delta x_{zp} \left(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right)$. La cantidad B se define como $B = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_b^2}{4x_0^2} + 8V_0^2 \alpha^2}$ y $\hat{\Omega}^{(\lambda)}$ es una matriz simétrica cuyos elementos se podrán encontrar de forma explícita en el apéndice C. Y finalmente, en la eigenbase de $\hat{\lambda}$, el hamiltoniano del transbordador de triple punto cuántico se expresa como sigue:

$$\hat{H}_{TQDS}^{(\lambda)} = \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{\Omega}^{(\lambda)} + \hat{\lambda}^{(\lambda)} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}).$$

Tomando el caso $n = 1$, las correspondientes funciones de onda $\Psi_1^{\lambda_i}(z)$ tendrán la forma de la ecuación (4.7a) y las construiremos encontrando los coeficientes \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_0 para cada uno de los eigenvalores λ_i ; donde los valores de energía E_{ni} asociados a esas eigenfunciones son obtenidos de (4.4) y se escriben como sigue:

$$E_{11} = 1 + \frac{1}{2}(\epsilon_l + \epsilon_r), \quad (4.14a)$$

$$E_{12} = 1 + \frac{1}{2}(\epsilon_l + \epsilon_r) - \Delta x_{zp}^2 \left(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right)^2, \quad (4.14b)$$

$$E_{13} = 1 + \frac{1}{2}(\epsilon_l + \epsilon_r) - \Delta x_{zp}^2 \left(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right)^2. \quad (4.14c)$$

Los vectores \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_0 se encuentran mediante (4.7b) y al sustituir en las ecuaciones (4.10) y (4.11) los eigenvalores λ_i y elementos de matriz de $\hat{\Omega}^{(\lambda)}$ requeridos (apéndice C).

Para $\lambda_1 = 0$:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}_0 = \begin{pmatrix} -\frac{[(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0 V_1 \alpha]^2}{\Delta x_{zp} (B - \frac{\epsilon_b}{4x_0}) [4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2]} + \frac{[(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0 V_1 \alpha]^2}{\Delta x_{zp} (B + \frac{\epsilon_b}{4x_0}) [4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2]} \\ \frac{[(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0 V_1 \alpha]}{\Delta x_{zp} (B - \frac{\epsilon_b}{4x_0}) \sqrt{4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2}} \\ \frac{[(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0 V_1 \alpha]}{\Delta x_{zp} (B + \frac{\epsilon_b}{4x_0}) \sqrt{4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2}} \end{pmatrix}.$$

Para $\lambda_2 = \Delta x_{zp} \left(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0} \right)$:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}_0 = \begin{pmatrix} \frac{[(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0 V_1 \alpha]}{\Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\sqrt{4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2}} \\ \frac{[(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0 V_1 \alpha]^2}{\Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})[4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2]} + \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0}) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para $\lambda_3 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}_0 = - \begin{pmatrix} -\frac{[(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0 V_1 \alpha]}{\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\sqrt{4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2}} \\ 0 \\ -\frac{[(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0 V_1 \alpha]^2}{\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})[4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2 \alpha^2]} - \Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0}) \end{pmatrix}.$$

Las condiciones de compatibilidad para el sistema de transbordador de triple punto cuántico se escriben a continuación.

Para $i = 1$, $\lambda_1 = 0$, $j = 2$:

$$B_{\pm} \left(\frac{B_{\pm}^2}{(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})C_+} - \frac{B_{\mp}^2}{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})C_-} - \frac{1}{(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})} \right) = 0. \quad (4.15)$$

Para $i = 1$, $\lambda_1 = 0$, $j = 3$:

$$B_{\mp} \left(\frac{B_{\pm}^2}{(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})C_+} - \frac{B_{\mp}^2}{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})C_-} + \frac{1}{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})} \right) = 0. \quad (4.16)$$

Para $i = 2$, $\lambda_2 = \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})$, $j = 1$:

$$B_{\pm} \left(2\Delta x_{zp}^2 \left(\frac{\epsilon_b}{4x_0} - B \right) + \frac{B_{\pm}^2}{(\frac{\epsilon_b}{4x_0} - B)C_+} - \frac{1}{(\frac{\epsilon_b}{4x_0} - B)} \right) = 0. \quad (4.17)$$

Para $i = 2$, $\lambda_2 = \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})$, $j = 3$:

$$\frac{B_{\mp} B_{\pm}}{(\frac{\epsilon_b}{4x_0} - B)} = 0. \quad (4.18)$$

Para $i = 3$, $\lambda_2 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$, $j = 1$:

$$B_{\mp} \left(2\Delta x_{zp}^2(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0}) + \frac{B_{\mp}^2}{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})C_-} - \frac{1}{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})} \right) = 0. \quad (4.19)$$

Para $i = 3$, $\lambda_2 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$, $j = 2$:

$$\frac{B_{\pm}B_{\mp}}{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})} = 0. \quad (4.20)$$

Con las definiciones:

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_b^2}{4x_0^2} + 8V_0^2\alpha^2}, \\ B_{\pm} &= (B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0V_1\alpha, \\ B_{\mp} &= (B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0V_1\alpha, \\ C_+ &= 4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2\alpha^2, \\ C_- &= 4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2\alpha^2. \end{aligned}$$

Como ya se había mencionado con anterioridad, para que la función de onda construida a partir de los coeficientes \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_0 vinculados a cada uno de los eigenvalores del operador $\hat{\lambda}$, sea una solución admisible para el hamiltoniano del TQDS (lo cual implicaría que ésta tenga correspondencia directa con alguna de las energías calculadas con la ecuación (4.4) y el valor λ_i correspondiente), las condiciones de compatibilidad deben cumplirse estricta y simultáneamente.

Las condiciones de compatibilidad locales (4.15-4.20) están expresadas en términos de los parámetros que definen al sistema de transbordador, de modo que para que las seis se satisfagan simultáneamente se deberá encontrar al conjunto de parámetros que lo permita. Para esta elección nos basamos en los parámetros típicos que se han manejado en otras investigaciones sobre el TQDS (ver antecedentes en el capítulo 2), los usamos en un primer cálculo pero obtuvimos que el valor de ϵ_b para el cual se satisficieran las condiciones de compatibilidad era $\epsilon_b = 0$ y éste no fue un caso de interés puesto que es para valores de ϵ_b distintos de cero cuando se pueden obtener características en el espectro que se correlacionan con propiedades medibles como la corriente a través del dispositivo. Es por eso que se tomaron los parámetros típicos como base y se variaron poco a poco hasta conseguir al primer conjunto de parámetros donde algunas de las condiciones de compatibilidad se satisficieran en un valor de ϵ_b distinto de cero. Cabe mencionar que el uso de los parámetros típicos para el cálculo de los eigenvalores

de \hat{H}_{TQDS} se retoma en la sección 5.4 para ejemplificar la importancia del cumplimiento de todas las condiciones de compatibilidad para una solución total del hamiltoniano.

Se escogió $\hbar = \omega = m = e = 1$ de manera que las unidades de energía queden en múltiplos de $\hbar\omega$ y las de longitud en múltiplos de $\sqrt{2}\Delta x_{zp}$; a la amplitud de tunelaje, la distancia máxima que recorre el QD central y la inversa de la longitud de tunelaje se les asignaron los siguientes valores: $V_0 = 0.7$, $x_0 = 5$, $\alpha = 0.01$ y se dejó cada condición en función de la variable ϵ_b , esto es porque resulta mucho más sencillo dejar fijos todos menos un parámetro para que éste sea el que varíe en vez de variarlos todos y buscar el cumplimiento de las condiciones a prueba y error.

Para verificar que se cumplan las condiciones de compatibilidad éstas se grafican todas en un mismo plano coordenado y se evalúa la intersección de cada una con el eje de abscisas, es decir, se busca si para el conjunto de parámetros escogidos, existe algún valor de energía ϵ_b donde todas se intersecten.

A continuación se presenta el gráfico de las seis condiciones de compatibilidad para el caso $n = 1$ en función de ϵ_b , etiquetada cada curva con un color diferente.

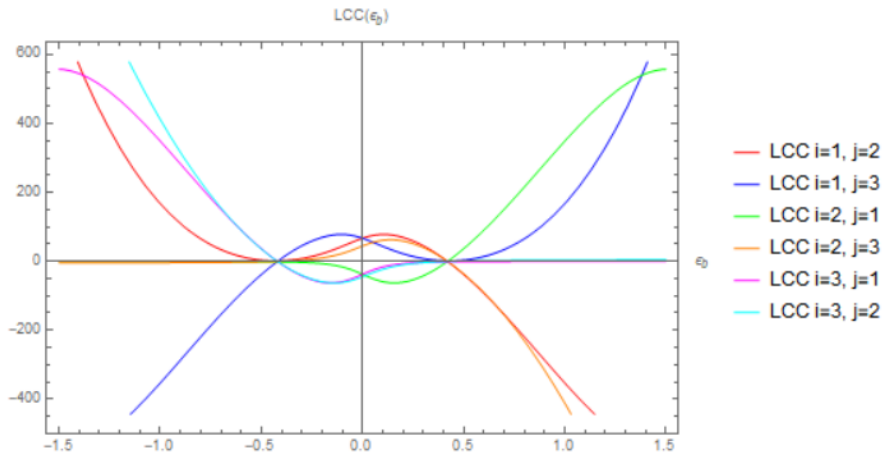


Figura 4.1: Condiciones de compatibilidad para cada uno de los eigenvalores λ_i en el caso $n = 1$.

Para este conjunto de parámetros parece ser, a simple vista, que existen dos valores de ϵ_b (uno positivo y otro negativo) para los cuales se muestra una intersección entre las seis curvas. A manera de identificar cuáles son esos valores se procede a calcular las raíces reales (intersecciones con el eje horizontal) de cada una de las condiciones de compatibilidad, esperando que todas compartan al menos una.

$CCL_{ij}(\epsilon_b) = 0$	ϵ_b
CCL i=1, j=2	0.420583, 2.09316
CCL i=1, j=3	-2.09316, -0.420583
CCL i=2, j=1	-1.55338, 0.420583, 2.09108
CCL i=2, j=3	-0.420583, 0.420583
CCL i=3, j=1	-2.09108, -0.420583, 1.55338
CCL i=3, j=2	-0.420583, 0.420583

Cuadro 4.1: Raíces reales de las condiciones de compatibilidad locales (CCL) correspondientes a cada uno de los eigenvalores λ_i para $n = 1$.

De la tabla (4.1) vemos que las condiciones CCL_{12} , CCL_{21} , CCL_{23} y CCL_{32} cruzan en $\epsilon_b = 0.420583$ mientras que CCL_{13} , CCL_{23} , CCL_{31} y CCL_{32} cruzan en $\epsilon_b = -0.420583$; esto es, para el conjunto de parámetros escogidos, $\epsilon_b = \pm 0.420583$ son los valores en los cuales se cumplen simultáneamente la mayor cantidad de condiciones de compatibilidad pero no se encuentra un valor en el que se satisfagan todas.

Capítulo 5

Resultados y discusión

Las energías generadas a partir de la expresión (4.4) no tienen ningún tipo de restricción. Esto es debido a que simplemente son consecuencia de la exigencia de analiticidad de $\Psi_i(z)$ en todo el plano y pueden ser calculadas en tanto se conozcan los eigenvalores λ_i , los elementos diagonales del operador $\hat{\Omega}^{(\lambda)}$ y se precisen los valores admisibles que podrá tomar n ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$).

El término n , además de representar números enteros positivos para el cálculo de las energías, como índice establece la forma de la función de onda $\Psi_n^{\lambda_i}(z)$ y la asocia al que sería su correspondiente eigenvalor:

$$\begin{aligned} n = 0 & \quad \Psi_0^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z} \mathbf{A}_0, \\ n = 1 & \quad \Psi_1^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z} (\mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_0), \\ n = 2 & \quad \Psi_2^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z} (\mathbf{A}_2 z^2 + \mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_0), \\ & \quad \vdots \\ n & \quad \Psi_n^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z} (\mathbf{A}_n z^n + \mathbf{A}_{n-1} z^{n-1} + \dots + \mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_0), \end{aligned}$$

donde para cada uno de los valores de n habrá tantas eigenfunciones $\Psi_n^{\lambda_i}(z)$ como eigenvalores λ_i , lo cual entonces estará determinado por las dimensiones de la matriz $\hat{\lambda}$. Por otro lado, dada la construcción de las funciones $\Psi_n^{\lambda_i}(z)$ en términos de los vectores \mathbf{A}_k , cuyo cálculo se encuentra restringido al cumplimiento de las condiciones de compatibilidad, las funciones de onda quedan asimismo restringidas. En otras palabras, aún si la expresión analítica para la energía (4.4) no se encuentra condicionada, la validez de las energías que puedan generarse de ésta estará limitada al cumplimiento de las condiciones de compatibilidad, puesto que cada una de las energías del sistema (eigenvalores de \hat{H}_{TQDS}) deberá estar asociada a una función de onda generada por (4.5); cuando las condiciones de compatibilidad no se satisfacen, las expresiones que se encuentren para calcular las componentes de los vectores \mathbf{A}_k (en este caso los correspondientes a $n = 1$, que es la situación estudiada) no son válidas. Esto nos conduciría

a funciones de onda que tampoco serían válidas y no habría manera de asociar a ninguna de ellas con las energías correspondientes generadas por (4.4).

Para el caso $n = 1$ se calcularon las energías asociadas a cada uno de los eigenvalores de $\hat{\lambda}$, las cuales pueden verse de forma explícita en las ecuaciones (4.14).

Con el objetivo de comparar los resultados obtenidos analíticamente con resultados numéricos, calculamos los eigenvalores de \hat{H}_{TQDS} mediante diagonalización numérica. Para esto, se escribió un código en Python que resuelve el sistema del transbordador de triple punto cuántico totalmente calculando sus eigenvalores y eigenvectores, en el apéndice D se presenta el algoritmo desarrollado para esto. Este código recibe como parámetros de entrada los que definen al sistema y se escoge $\hbar = m = \omega = e = 1$, de modo que, en estas unidades, $\epsilon_l = 1$, $\epsilon_r = 0.579417$, $\Delta x_{zp} = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $V_0 = 0.7$, $\alpha = 0.01$ y $x_0 = 5$. Los valores anteriores fueron escogidos de tal forma que $\epsilon_b = 0.420583$, pues se conoce que para este conjunto de parámetros, cuatro de las seis condiciones de compatibilidad se satisfacen.

Dada la naturaleza híbrida del transbordador de triple punto cuántico, recordemos que el hamiltoniano del sistema se encuentra escrito en una base compuesta por dos subespacios: el subespacio de los tres estados electrónicos y el subespacio de los que llamaremos D modos de oscilación (donde en principio D tiende a infinito). Esto viene a consideración debido al requerimiento de asignación de dimensionalidad al subespacio de modos vibracionales (subespacio en el que se encuentran los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger) para que el hamiltoniano sea numéricamente diagonalizable. Se escoge para D un valor lo suficientemente grande como para lograr una buena aproximación (considerando que en principio la dimensión del subespacio de modos de oscilación es infinita) y lo suficientemente pequeño para que las energías obtenidas sean una muestra representativa del comportamiento del sistema. Hacemos $D = 10$.

Debido a la elección de D , es claro que el cálculo numérico arrojará como resultado treinta eigenvalores para un sistema que está compuesto de tres estados electrónicos y diez modos de vibración. De la expresión (4.4) somos capaces de calcular analíticamente tantas energías como asignemos valores a n , por lo que, a manera de buscar consistencia en la comparación de resultados, calculamos las energías analíticas para cada uno de los eigenvalores λ_i con $n = 0, 1, 2, 3, \dots, D - 1$, esto con la finalidad de que a cada energía obtenida mediante cálculo numérico se le asociara una energía calculada analíticamente para poder compararlas; dejando de lado el análisis enfocado en las condiciones de compatibilidad donde se fijó $n = 1$ y se obtuvieron con ello sólo tres eigenenergías.

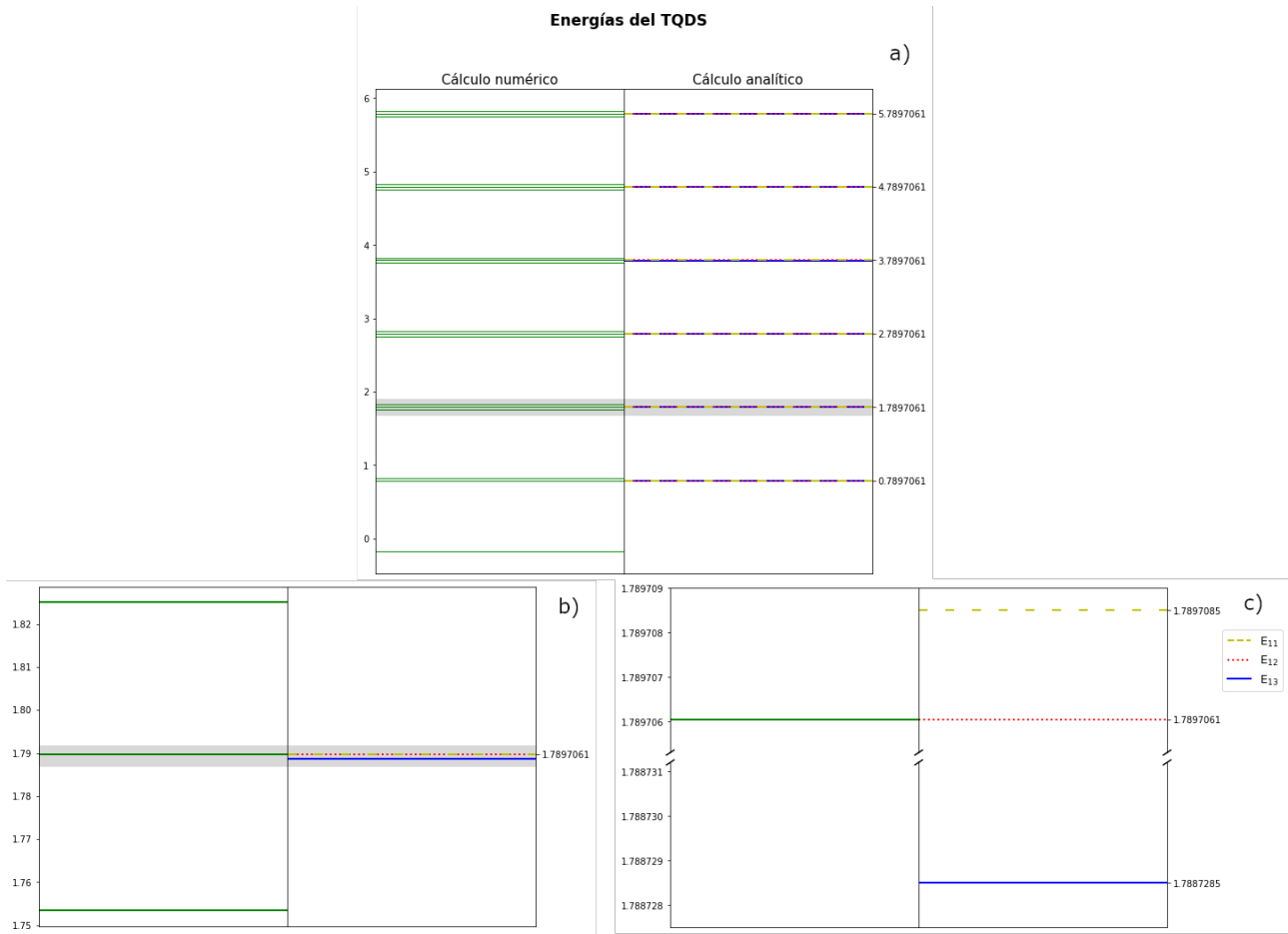


Figura 5.1: a) Gráfico para la comparación de los resultados obtenidos del cálculo de la energía del TQDS de forma numérica (izquierda) y analítica (derecha); éstos se muestran para 6 valores distintos de n , desde 0 a 5 en orden ascendente. La zona sobresaltada en gris es la que corresponde a las energías con $n = 1$. b) Se muestra aquí un acercamiento de la zona resaltada gris en a) y c) es un acercamiento de la zona gris en b).

En la figura (5.1 a)) se muestran y comparan las 18 energías más bajas obtenidas mediante cálculo numérico y analítico, se escogió mostrar en la gráfica una extracción de 18 eigenvalores de los 30 que se obtienen como resultado porque es una muestra representativa que refleja el comportamiento de todos; las energías se manifiestan como conjuntos de 3 líneas pues corresponden a cada uno de los eigenvalores λ_i y asimismo, cada conjunto está asociado a un valor de n , el cual va desde $n = 0$ hasta $n = 5$ en forma ascendente. El panel izquierdo contiene las energías obtenidas mediante diagonalización numérica mientras que el panel derecho contiene las calculadas de la ecuación (4.4). Es fácil de ver que del lado derecho, más que presentar conjuntos de 3 líneas se

presenta solo una, esto es debido a que los valores de energía son tan cercanos entre ellos (para $n = 1$ y para cualquier valor de n) que las líneas se superponen. Como un ejemplo, tomamos el caso $n = 1$ cuyo conjunto de líneas se encuentra resaltado en gris en la figura (5.1 a)) y hacemos un acercamiento logrando la figura (5.1 b)) donde se observa un desdoble de líneas pero manteniéndose dos aún sobrepuestas, entonces se hace un acercamiento mas a la región resaltada en gris de la figura (5.1 b)) obteniendo la figura (5.1 c)) donde el desdoblamiento de líneas es total y se manifiestan las rectas asociadas a E_{11} , E_{12} y E_{13} las cuales se encuentran posicionadas en los valores 1.7897085, 1.7897061 y 1.7887285 respectivamente. Se puede ver que E_{11} y E_{12} se diferencian hasta en el sexto dígito después del punto decimal y E_{13} se diferencia de ellos desde el tercer dígito después del punto decimal. De la figura (5.1 c)) notamos que una de las rectas del cálculo analítico empata exactamente con una de las rectas cuyo valor fue generado de forma numérica y esto corresponde a la energía $E_{12} = 1.7897061$.

Por otro lado, del análisis de las condiciones de compatibilidad (4.15-4.20) recordemos que para el valor de ϵ_b que se fijó con el fin de realizar la diagonalización numérica, cuatro de las seis condiciones de compatibilidad generadas por (4.13) se satisficieron y de esas cuatro dos de ellas correspondían al mismo eigenvalor: λ_2 . Esto es, si la satisfacción simultánea de todas las condiciones de compatibilidad locales para $n = 1$ se hubiera logrado, el empate entre líneas numéricas y analíticas en la figura (5.1 a)) se esperaría completamente; pero al satisfacerse solo parcialmente, se obtuvo el empate de eigenenergías cuando se lograron cumplir en su totalidad las condiciones de compatibilidad de al menos un eigenvalor λ_i .

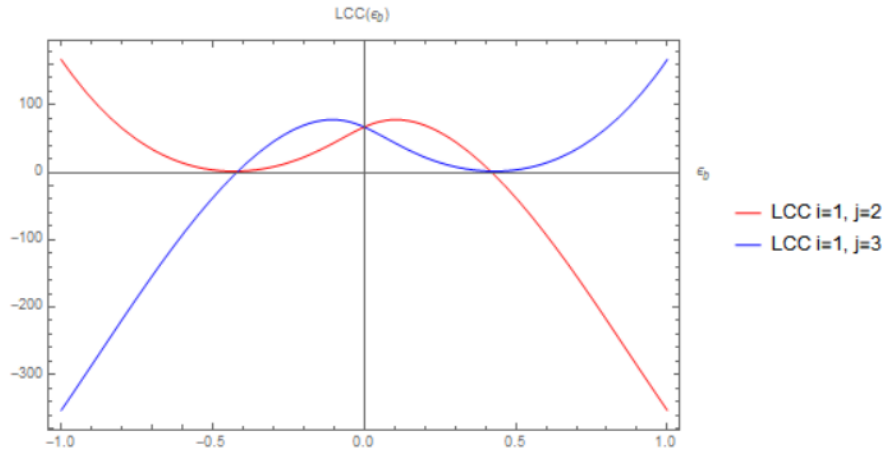


Figura 5.2: Condiciones de compatibilidad asociadas al primer eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_1 = 0$ para el caso $n = 1$. De la tabla (4.1) se puede ver que ambas curvas no comparten raíces, por lo tanto la energía calculada analíticamente (4.4) correspondiente a λ_1 nunca será válida.

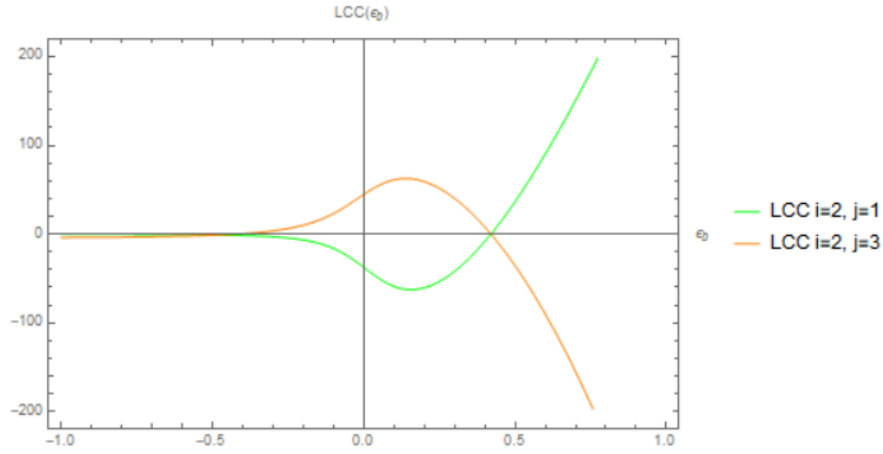


Figura 5.3: Condiciones de compatibilidad asociadas al segundo eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_2 = \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 1$. De la tabla (4.1) podemos ver que ambas curvas comparten la raíz $\epsilon_b = 0.420583$, es decir, se satisfacen en ese punto. Dado que la diagonalización numérica del hamiltoniano del TQDS se llevó a cabo considerando $\epsilon_b = 0.420583$, la energía calculada analíticamente (4.4) correspondiente a λ_2 cumple con condiciones de compatibilidad y es una energía válida del sistema, es por eso que se reproduce en el cálculo numérico.

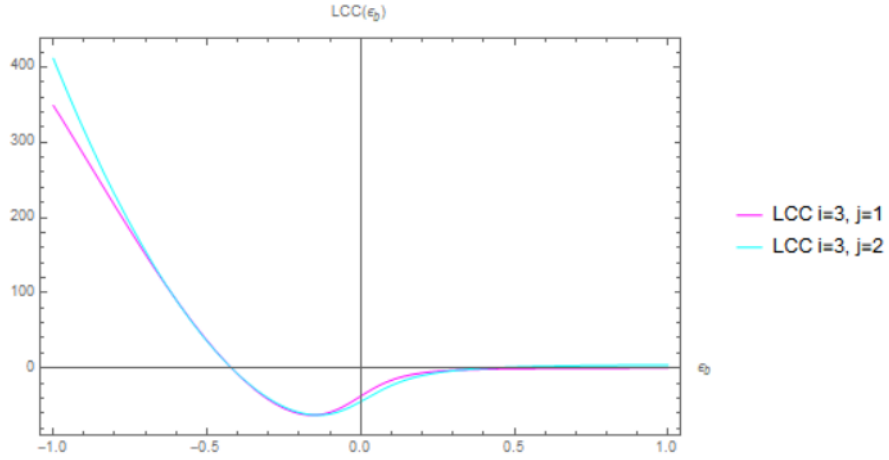


Figura 5.4: Condiciones de compatibilidad asociadas al tercer eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_3 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 1$. De la tabla (4.1) podemos ver que ambas curvas comparten la raíz $\epsilon_b = -0.420583$, es decir, se satisfacen en ese punto. Dado que la diagonalización numérica del hamiltoniano del TQDS se llevo a cabo considerando $\epsilon_b = 0.420583$, la energía calculada analíticamente (4.4) correspondiente a λ_3 no cumple con condiciones de compatibilidad y es una energía inválida del sistema, es por eso que no se reproduce en el cálculo numérico. No obstante, si se escogiese $\epsilon_b = -0.420583$ para llevarse a cabo la diagonalización numérica del hamiltoniano, sería la energía analítica asociada a λ_3 la única energía válida del sistema y la que se reproduzca por los resultados numéricos.

A continuación se presenta una figura similar a la figura (5.1) en la que se muestran los resultados obtenidos para las energías del transbordador usando $\epsilon_b = -0.420583$ para la diagonalización numérica.

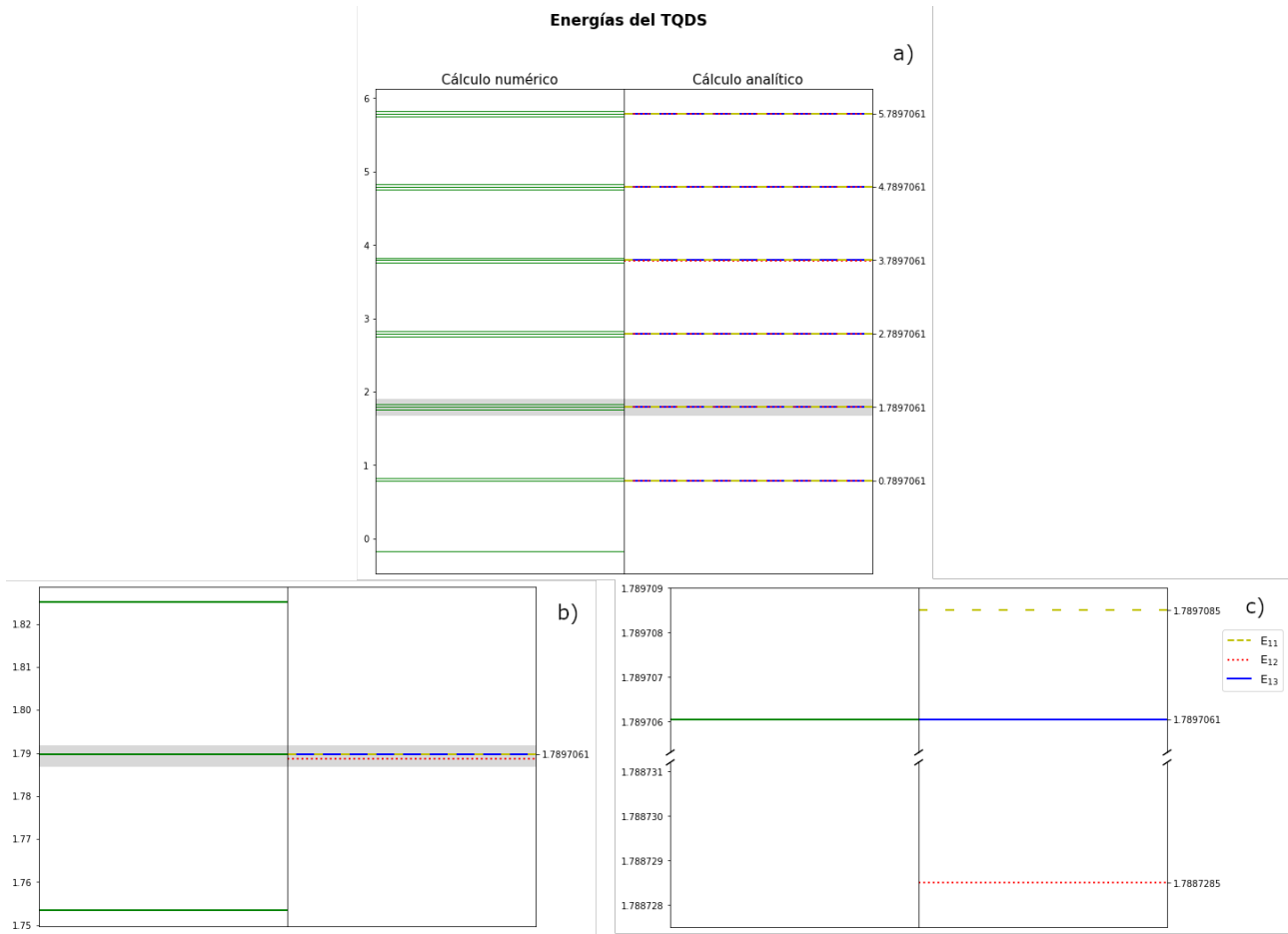


Figura 5.5: a) Comparación de los resultados obtenidos del cálculo de la energía del TQDS de forma numérica (izquierda) y analítica (derecha) considerando $\epsilon_b = -0.420583$; éstos se muestran para 6 valores distintos de n , desde 0 a 5 en orden ascendente. La zona sobresaltada en gris es la que corresponde a las energías con $n = 1$. b) Se muestra aquí un acercamiento de la zona resaltada gris en a) y c) es un acercamiento de la zona gris en b).

La figura (5.1) muestra la comparación de resultados obtenidos de forma analítica y numérica para una $\epsilon_b = 0.420583$, uno de los resultados importantes de este trabajo fue que se encontró, para el caso $n = 1$, que una de las energías obtenidas analíticamente (E_{12}) era reproducida en el cálculo numérico y que ésta estaba asociada al eigenvalor para el cual todas las condiciones de compatibilidad correspondientes se satisfacían. Asimismo, la figura (5.5) muestra la comparación de resultados pero ahora usando $\epsilon_b = -0.420583$. En este caso la energía analítica que se reproduce en el cálculo numérico es E_{13} debido a que para ese valor de ϵ_b , las condiciones de compatibilidad que se satisfacen son las que corresponden al tercer eigenvalor de $\hat{\lambda}$.

Por otro lado, retomando las figuras de resultados (5.1) y (5.5), es claro que el comportamiento de la región sombreada correspondiente al caso $n = 1$ en las gráficas se reproduce para los demás valores de n . El cálculo de la condición de compatibilidad global (4.13) se especificó que era bajo $n = 1$, para diferentes valores de n las condiciones de compatibilidad globales son, en principio, diferentes a (4.13). Otro resultado importante es que, al cumplirse las condiciones de compatibilidad para λ_2 en $\epsilon_b = 0.420583$, se esperaba que (E_{12}) fuera la única energía que se reprodujera numéricamente, así como en $\epsilon_b = -0.420583$ la única energía que se reproduciría numéricamente sería (E_{13}) , pero en cada uno de esos casos no sólo se reprodujo para $n = 1$ sino que lo hizo también para $n = 0$ y valores de n posteriores a 1. Esto es, al encontrar ϵ_b tal que al menos las condiciones de compatibilidad del mismo eigenvalor se satisfagan, se esperaba entonces que sólo una de las energías analíticas resultaría idéntica a alguna de las energías obtenidas numéricamente, pero el resultado contundente es que los valores analíticos de energía para $n = 0$ y n posterior a 1 también tienen su correspondiente valor numérico, lo cual implicaría que al buscar compatibilidad para $n = 1$ también se está obteniendo una compatibilidad (cuyas expresiones son desconocidas) que abarca todos los valores de n posibles.

El álgebra para el cálculo de las condiciones de compatibilidad se complica a manera que n aumenta. Esto es debido a que las condiciones de compatibilidad son una consecuencia de la búsqueda de los coeficientes \mathbf{A}_k ; mientras mayor sea el valor de n , más vectores \mathbf{A}_k se necesitan para construir la función de onda (4.5) correspondiente a su respectivo valor de energía dado por (4.4).

5.1. Caso $n = 0$

Si $n = 0$,

$$\Psi_0^{\lambda_i}(z) = e^{-\lambda_i z} \mathbf{A}_0. \quad (5.1)$$

Sustituyendo (5.1) en la ecuación de Schrödinger (4.2) y factorizando las potencias de z se obtiene lo siguiente:

$$z(\hat{\lambda} - \lambda_i)\mathbf{A}_0 + (\hat{\Omega} - \lambda_i\hat{\lambda} - E)\mathbf{A}_0 = 0,$$

y, como \mathbf{A}_0 no puede ser el vector nulo (caso trivial), se siguen las condiciones:

$$\hat{\lambda}\mathbf{A}_0 = \lambda_i\mathbf{A}_0, \quad (5.2)$$

$$\hat{\Omega}\mathbf{A}_0 = (E + \lambda_i\hat{\lambda})\mathbf{A}_0. \quad (5.3)$$

Recordemos ahora que se está trabajando en la eigenbase del operador $\hat{\lambda}$, de modo que a partir de las ecuaciones (5.2) y (5.3) se suprimirá en $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ el superíndice (λ) para indicar la base en la que están escritos y se dará por sentado.

Dado que $\hat{\lambda}$ se encuentra en su forma diagonal, de la satisfacción de la ecuación de eigenvalor (5.2) es posible determinar inequívocamente los vectores \mathbf{A}_0 para cada eigenvalor λ_i . Notemos que cada una de las tres ecuaciones de eigenvalor generadas por (5.2) estarían tomando el papel de tres condiciones de compatibilidad.

Por otro lado, se sabe que para $n = 0$ la expresión analítica de la energía (4.4) toma la forma $E = \Omega_{ii} - \lambda_i^2$, lo cual nos permite reescribir la ecuación (5.3) como sigue:

$$\hat{\Omega}\mathbf{A}_0 = \Omega_{ii}\mathbf{A}_0. \quad (5.4)$$

Vemos que la ecuación (5.4) es también una ecuación de eigenvalor para cada uno de los elementos diagonales de $\hat{\Omega}$ que estaría involucrando los mismos vectores \mathbf{A}_0 que (5.2) y generaría las tres condiciones de compatibilidad restantes. En otras palabras, en el caso $n = 0$ las condiciones de compatibilidad se reducen a ecuaciones de eigenvalor para los operadores $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$, donde las expresiones (5.2) y (5.4) sugieren que $\hat{\Omega}$ también sea diagonal en la eigenbase de $\hat{\lambda}$, esto es, las condiciones exigen que éstos compartan eigenbase y en este caso, los vectores \mathbf{A}_0 serían eigenvectores de ambos operadores simultáneamente.

El estudio del caso $n = 0$ arroja información muy importante sobre las bases de la aplicación del método aquí descrito para la solución de sistemas físicos representados por hamiltonianos del tipo (4.1). Como ya se vio anteriormente en el análisis del caso $n = 1$, de las seis condiciones de compatibilidad impuestas (dos para cada eigenvalor λ_i) se encuentra un conjunto de parámetros que logra la satisfacción de cuatro de ellas, de las cuales dos son generadas para el mismo eigenvalor (λ_2). De esto último resulta que la energía asociada a las condiciones de compatibilidad que se satisfacen para un mismo eigenvalor (E_{12} , en este caso) se valida como una eigenenergía del sistema de TQDS. Además, se sabe también que de la comparación de resultados numéricos y analíticos fue observado que las energías asociadas a λ_2 pero para cualquier valor de n son igualmente válidas, y esto incluye $n = 0$. Es claro que las condiciones de compatibilidad para $n = 1$ (generadas por (4.13)) y $n = 0$ (generadas por (5.2) y (5.4)) son estructuralmente distintas, y así serán las condiciones para n 's posteriores (tal como se verá en la siguiente sección con el estudio del caso $n = 2$), pero es un hecho que el conjunto de parámetros escogidos está satisfaciendo las condiciones de compatibilidad asociadas a λ_2 para cualquier valor de n y que satisfacer las condiciones para $n = 0$ implica que $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ están compartiendo el eigenvector correspondiente a λ_2 . Esto último es un resultado importante pues de encontrar un conjunto de parámetros que satisfaga todas las condiciones de compatibilidad para $n = 1$, implícitamente estaría llevando a $\hat{\Omega}$ a una forma diagonal para obtener las energías del sistema.

5.2. Caso $n = 2$

Si $n = 2$,

$$\Psi_i(z) = e^{-\lambda_i z} (\mathbf{A}_2 z^2 + \mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_0). \quad (5.5)$$

En este caso, la energía toma la forma de $E = 2 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2$ y \mathbf{A}_2 queda determinado totalmente por la ecuación (4.6a). De la manipulación de las ecuaciones (4.6b), (4.6c) y (4.6d) con n correspondiente, es posible encontrar las componentes de los coeficientes \mathbf{A}_0 y \mathbf{A}_1 , las cuales se presentan a continuación:

$$\begin{aligned} A_{0i} = & \frac{1}{2} \sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left[\frac{(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i \lambda_k)}{\lambda_k - \lambda_i} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) - \frac{\sum_{m \neq i} \Omega_{km} \frac{-\Omega_{mi}}{\lambda_m - \lambda_i}}{\lambda_k - \lambda_i} \right. \\ & \left. - \frac{\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \left(\sum_{m \neq i} \Omega_{im} \left(\frac{-\Omega_{mi}}{\lambda_m - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i \right) \right] + \frac{1}{2} \lambda_i \sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) + \lambda_i^2, \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} A_{0j} = & \frac{(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i \lambda_k)}{\lambda_j - \lambda_i} \left(\frac{-\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i} \right) - \frac{\sum_{k \neq i} \Omega_{jk} \frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i}}{\lambda_j - \lambda_i} \\ & - \frac{\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i} \left(\sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i \right), \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$A_{1i} = \sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i, \quad (5.8)$$

$$A_{1j} = \frac{-\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i}. \quad (5.9)$$

Tal y como se ha visto en los casos anteriores, el coeficiente que no es completamente determinado por la ecuación (4.6a), se ha de determinar por las ecuaciones (4.6b-4.6d) y quedará sujeto al cumplimiento de la condición de compatibilidad correspondiente. En este caso, las expresiones para los coeficientes \mathbf{A}_0 y \mathbf{A}_1 se restringen al cumplimiento de la condición de compatibilidad para $n = 2$ que se presenta explícitamente en el apéndice E. De dicha condición de compatibilidad global (E.1) se extraen nuevamente seis condiciones de compatibilidad locales, dos por cada uno de los eigenvalores λ_i que, de haber un valor de ϵ_b para el cual se cumplan simultáneamente, las energías generadas por la expresión (4.4) para $n = 2$ serían eigenvalores definitivos del hamiltoniano del TQDS. En este sentido, se presentan a continuación las raíces reales

de las condiciones de compatibilidad generadas por (E.1).

$CCL_{ij}(\epsilon_b) = 0$	ϵ_b
CCL i=1, j=2	-2.09097, -0.48373, -0.281108, -0.207279, 0.420583
CCL i=1, j=3	-0.420583, 0.207279, 0.281108, 0.48373, 2.09097
CCL i=2, j=1	0.420583
CCL i=2, j=3	-10.0489, -0.420583, 0.420583, 2.09532
CCL i=3, j=1	-0.420583
CCL i=3, j=2	-2.09532, -0.420583, 0.420583, 10.0489

Cuadro 5.1: Raíces reales de las condiciones de compatibilidad locales (CCL) correspondientes a cada uno de los eigenvalores λ_i para $n = 2$.

Como se puede ver en la tabla (5.1), nuevamente no existe ninguna raíz que sea compartida por las seis condiciones, pero recordemos que aún sin lograr la satisfacción simultánea de éstas seis es posible obtener algún valor de energía válido estudiando las condiciones de compatibilidad como pares del mismo eigenvalor. Vemos que las condiciones de compatibilidad asociadas a λ_1 no comparten ninguna raíz mientras que las condiciones asociadas a λ_2 y λ_3 comparten la raíz $\epsilon_b = 0.420583$ y $\epsilon_b = -0.420583$ respectivamente. A continuación se muestran las curvas de compatibilidades correspondientes a λ_2 y λ_3 , se omiten las de λ_1 debido a que no comparten raíces y la energía asociada a ellas no es válida para el sistema.

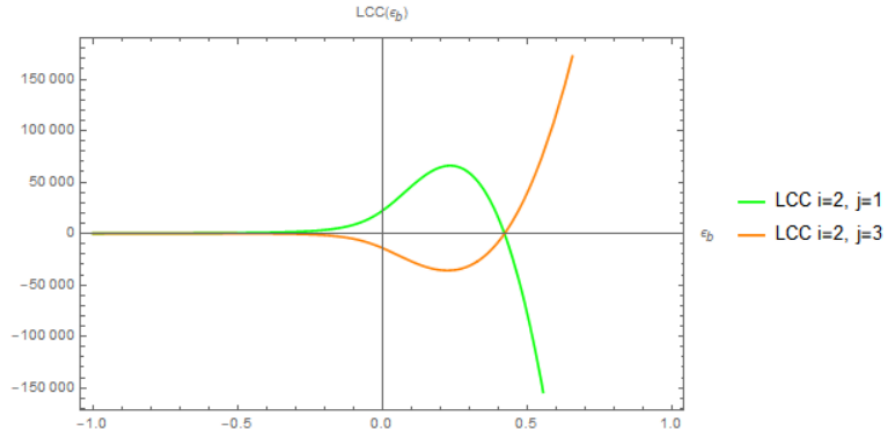


Figura 5.6: Condiciones de compatibilidad asociadas al segundo eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_2 = \Delta x_{zp}(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 2$. De la tabla (5.1) podemos ver que ambas curvas comparten la raíz $\epsilon_b = 0.420583$, es decir, se satisfacen en ese punto. Dado que la diagonalización numérica del hamiltoniano del TQDS se llevo a cabo considerando $\epsilon_b = 0.420583$, la energía calculada analíticamente (4.4) correspondiente a λ_2 cumple con condiciones de compatibilidad y es una energía válida del sistema, es por eso que se reproduce en el cálculo numérico.

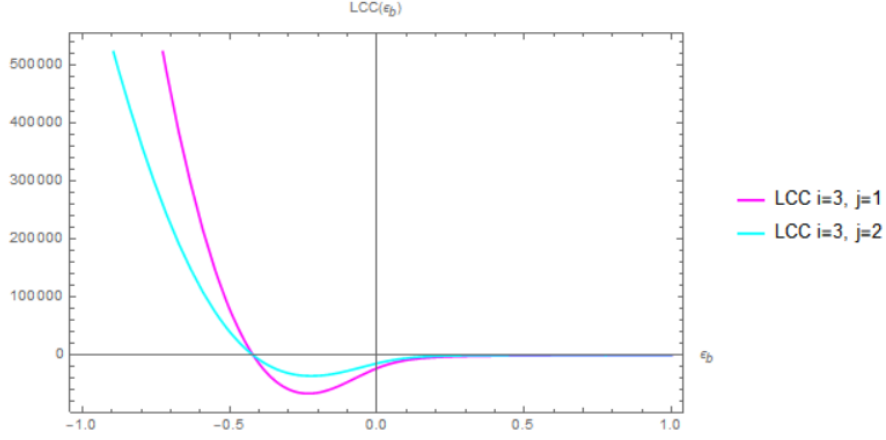


Figura 5.7: Condiciones de compatibilidad asociadas al tercer eigenvalor de $\hat{\lambda}$: $\lambda_3 = -\Delta x_{zp}(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})$ para el caso $n = 2$. De la tabla (5.1) podemos ver que ambas curvas comparten la raíz $\epsilon_b = -0.420583$, es decir, se satisfacen en ese punto. Dado que la diagonalización numérica del hamiltoniano del TQDS se llevo a cabo considerando $\epsilon_b = 0.420583$, la energía calculada analíticamente (4.4) correspondiente a λ_3 no cumple con condiciones de compatibilidad y es una energía inválida del sistema, es por eso que no se reproduce en el cálculo numérico. No obstante, si se escogiese $\epsilon_b = -0.420583$ para llevarse a cabo la diagonalización numérica del hamiltoniano, sería la energía analítica asociada a λ_3 la única energía válida del sistema y la que se reproduzca por los resultados numéricos.

Es importante mencionar que a pesar de haber una fuerte similitud entre las figuras (5.3) y (5.6), las cuales corresponden a las condiciones de compatibilidad para λ_2 en el caso $n = 1$ y $n = 2$ respectivamente, no existe mayor relación entre las condiciones para cada caso más que la naturaleza que comparten de cómo son construidas, y finalmente para los fines del cálculo de las energías y eigenestados del TQDS, no es de interés la forma de la curva que representa a cada condición, lo que interesa son las intersecciones que éstas tengan con el eje horizontal, el mismo comentario aplica para las figuras (5.4) y (5.7). En otras palabras, no nos importa cómo se ven las condiciones de compatibilidad sino qué parámetros las satisfacen.

Los resultados obtenidos en el caso $n = 1$ ya sugerían el desenlace del caso $n = 2$. De la comparación de las energías logradas analíticamente con las calculadas numéricamente se conocía que el análisis de las condiciones de compatibilidad podía llevarse a cabo estudiando por separado el comportamiento de las condiciones asociadas al mismo eigenvalor λ_i y así determinar la validez de la energía correspondiente (4.4); como para $\epsilon_b = 0.420583$ las únicas condiciones de compatibilidad que se satisfacían eran las ligadas a λ_2 , se valida E_{12} como una de las energías del TQDS. Asimismo, se sabía que no sólo la energía E_{12} calculada analíticamente era reproducida por el cálculo numérico, sino que se reproducían para cualquier valor de n : E_{n2} . Es claro que esto último engloba el caso $n = 2$ y se valida E_{22} como otra de las energías del

TQDS. La explicación que se tiene para que esto ocurra es que las condiciones de compatibilidad asociadas a λ_2 se están satisfaciendo en $\epsilon_b = 0.420583$ para cualquier valor de n incluyendo el 0 a pesar de que en principio, todas estas condiciones sean completamente diferentes.

5.3. Cálculo de los eigenvectores del TQDS

Para cada valor accesible de n , cuando se cumplen las condiciones de compatibilidad locales se asegura la validez de las componentes de los coeficientes \mathbf{A}_k que se calculan para cada caso con ayuda de las ecuaciones (4.6); con estos coeficientes \mathbf{A}_k se construyen las funciones de onda Ψ_i generadas por (4.5) que se propusieron como solución de (4.2) y le corresponde a cada una un eigenvalor dado por (4.4). El cumplimiento de la totalidad de las condiciones de compatibilidad conduciría a la solución completa del hamiltoniano del TQDS, el cumplimiento parcial (cumplimiento de condiciones para un mismo eigenvalor λ_i) nos permite encontrar algunos valores aislados de energía y sus respectivas eigenfunciones, es decir, nos otorga una solución parcial del sistema.

Al inicio de este capítulo se presentaron los resultados obtenidos de la comparación de las energías analíticas con el cálculo numérico y la diagonalización numérica del $\hat{\mathbf{H}}_{TQDS}$ permitió también el cálculo de los eigenvectores del sistema. Tal y como se mencionó con anterioridad, con el cumplimiento de las condiciones de compatibilidad se validan las funciones de onda $\Psi_i(z)$ como eigenfunciones del TQDS que, para poder compararse con los resultados numéricos, deberán cambiar de representación. En el capítulo 4 se propuso $\Psi_i(z)$ (4.5) como solución de $\hat{\mathbf{H}}_{TQDS}$. Es claro que se presenta como una función continua y bien comportada en el espacio de Bargmann; sin embargo, para que ésta pueda ser comparada con los resultados numéricos (que en este caso vendrían siendo considerados como resultados exactos y punto de comparación), es necesario encontrar una traducción que nos permita escribir las eigenfunciones de forma discreta, esto es, convertir las eigenfunciones en eigenvectores.

A continuación se propone un método para representar $\Psi_i(z)$ de forma totalmente vectorial y que permita su comparación con los eigenvectores del TQDS calculados de forma numérica.

Sabemos que en la representación de Bargmann podemos escribir los operadores de aniquilación y creación de la siguiente forma:

$$\hat{\mathbf{a}} \doteq \frac{d}{dz}, \quad \hat{\mathbf{a}}^\dagger \doteq z.$$

De aquí puede seguirse que:

$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} \doteq z \frac{d}{dz},$$

donde $\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}$ es el operador de número \hat{N} en la base de Fock y satisface la ecuación de eigenvalor $\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} |n\rangle = n |n\rangle$. En ese sentido, vemos que se cumple la siguiente relación en el espacio de Bargmann:

$$\left(z \frac{d}{dz}\right) z^n = n z^n.$$

De lo anterior puede concluirse que z^n en el espacio de Bargmann es proporcional al ket $|n\rangle$ en el espacio de Fock. Esto es,

$$z^n \propto |n\rangle.$$

Asimismo, el operador de aniquilación $\hat{\mathbf{a}}$ satisface la ecuación de eigenvalor $\hat{\mathbf{a}} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle$, donde el ket $|\lambda\rangle$ representa los estados coherentes, y al cumplirse la siguiente relación:

$$\left(\frac{d}{dz}\right) e^{-\lambda_i z} = -\lambda_i e^{-\lambda_i z},$$

se puede determinar también la relación de proporcionalidad que sigue:

$$e^{-\lambda_i z} \propto |-\lambda_i\rangle.$$

Siendo que conocemos la traducción directa de los operadores $\hat{\mathbf{a}}$ y $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ al espacio de Bargmann y además sabemos cómo se aplican a los estados de número y los estados coherentes, resulta conveniente escribir los kets $|n\rangle$ y $|-\lambda_i\rangle$ en términos de estos operadores.

Una forma de escribir al ket $|n\rangle$ en función del operador de creación es la siguiente:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{\mathbf{a}}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (5.10)$$

y gracias a que conocemos la relación entre los estados coherentes y los estados de número, podemos escribir:

$$|-\lambda_i\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-(\lambda_i)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (5.11)$$

Por otro lado, se puede mostrar fácilmente que:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{-(\lambda_i)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger} |0\rangle,$$

de modo que sustituyendo la expresión anterior en (5.11), obtenemos la ecuación siguiente:

$$|-\lambda_i\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger} |0\rangle. \quad (5.12)$$

Ahora tenemos una expresión para $|n\rangle$ y $|-\lambda_i\rangle$ en términos de $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ (cuya representación en el espacio de Bargmann es conocida) y del ket nulo.

Recordando que:

$$\begin{aligned} z^n &\propto |n\rangle \\ \Rightarrow z^0 &= 1 \propto |0\rangle, \end{aligned}$$

se puede concluir que el ket $|0\rangle$ en el espacio de Fock es proporcional a 1 en el espacio de Bargmann y podemos encontrar el valor de esta constante de proporcionalidad mediante normalización. Se conoce que en el espacio de Fock los kets $|n\rangle$ forman una base ortonormal, de modo que el producto interno de cada vector consigo mismo es 1 y 0 con los demás vectores de la base. En el espacio de Bargmann se define el módulo cuadrado de una función (producto interno consigo misma) como sigue [31]:

$$\|f\|^2 = \frac{1}{\pi} \int |f|^2 e^{-|z|^2} dz,$$

donde f es una función de la variable z que en principio es compleja del tipo $z = x + iy$ ó $z = re^{i\theta}$ y la integral va sobre todo el espacio.

Resolviendo en coordenadas polares y tomando en cuenta que en este caso $f(z) = z^0 = 1$, se obtiene:

$$\|z^0\|^2 = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty (1)^2 r e^{-r^2} dr d\theta = 1,$$

de tal forma que así como el ket $|0\rangle$ está normalizado a 1 en el espacio de Fock, z^0 está normalizado a 1 en el espacio de Bargmann, entonces:

$$z^0 = 1 \doteq |0\rangle. \quad (5.13)$$

Sustituyendo (5.13) en las ecuaciones (5.10) y (5.12) y usando $\hat{\mathbf{a}}^\dagger = z$ se obtienen las relaciones de correspondencia entre espacios que se presentan a continuación.

De Bargmann a Fock:

$$z^n \doteq \sqrt{n!} |n\rangle, \quad (5.14a)$$

$$e^{-\lambda_i z} \doteq e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} |-\lambda_i\rangle. \quad (5.14b)$$

De Fock a Bargmann:

$$|n\rangle \doteq \frac{z^n}{\sqrt{n!}}, \quad (5.15a)$$

$$|-\lambda_i\rangle \doteq e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} e^{-\lambda_i z}. \quad (5.15b)$$

Las relaciones encontradas nos permiten trasladar las eigenfunciones $\Psi_n^{\lambda_i}$ a una forma totalmente vectorial en el espacio de Fock. De la ecuación (4.5) teníamos que:

$$\begin{aligned} \Psi_n^{\lambda_i} &= e^{-\lambda_i z} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_1 z + \mathbf{A}_2 z^2 + \dots + \mathbf{A}_{n-1} z^{n-1} + \mathbf{A}_n z^n) \\ &= \mathbf{A}_0 e^{-\lambda_i z} + \mathbf{A}_1 e^{-\lambda_i z} z + \mathbf{A}_2 e^{-\lambda_i z} z^2 + \dots + \mathbf{A}_n e^{-\lambda_i z} z^n. \end{aligned}$$

Dado que z^n y $e^{-\lambda_i z}$ son funciones de una misma variable, esto es, se encuentran en un mismo espacio, conmutan sin problema. Esto viene al caso porque al distribuir el término $e^{-\lambda_i z}$ sobre todos los elementos de la suma en la ecuación anterior, es igualmente válido colocarlo ya sea a la derecha o a la izquierda de las potencias de z ; en principio se puede escoger a uno como operador y al otro como estado o viceversa, según la conveniencia del cálculo.

$$\text{Si se elige: } z^n: \text{Operador} \Rightarrow (\hat{\mathbf{a}}^\dagger)^n \text{ y } e^{-\lambda_i z}: \text{Estado} \Rightarrow e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} |-\lambda_i\rangle,$$

entonces,

$$z^n e^{-\lambda_i z} = e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger)^n |-\lambda_i\rangle. \quad (5.16)$$

$$\text{Si se elige: } z^n: \text{Estado} \Rightarrow \sqrt{n!} |n\rangle \text{ y } e^{-\lambda_i z}: \text{Operador} \Rightarrow e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger},$$

entonces,

$$e^{-\lambda_i z} z^n = \sqrt{n!} e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger} |n\rangle, \quad (5.17)$$

y es posible construir eigenvectores a partir de las eigenfunciones híbridas $\Psi_n^{\lambda_i}$, los cuales denotaremos por $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_n$. Usando la relación (5.16) como sigue:

$$|\Psi^{\lambda_i}\rangle_n = e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_0 \otimes |-\lambda_i\rangle + e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_1 \otimes \hat{\mathbf{a}}^\dagger |-\lambda_i\rangle + \dots + e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_n \otimes (\hat{\mathbf{a}}^\dagger)^n |-\lambda_i\rangle. \quad (5.18)$$

Alternativamente, usando la relación (5.17) se obtiene:

$$|\Psi^{\lambda_i}\rangle_n = \sqrt{0!} \mathbf{A}_0 \otimes e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger} |0\rangle + \sqrt{1!} \mathbf{A}_1 \otimes e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger} |1\rangle + \dots + \sqrt{n!} \mathbf{A}_n \otimes e^{-\lambda_i \hat{\mathbf{a}}^\dagger} |n\rangle. \quad (5.19)$$

De manera explícita para los casos aquí estudiados $n = 0, 1, 2$ y escogiendo la estructura de la ecuación (5.18), los eigenvectores quedan descritos finalmente de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} |\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=0} &= e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_0 \otimes |-\lambda_i\rangle, \\ |\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=1} &= e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_0 \otimes |-\lambda_i\rangle + e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_1 \otimes \hat{\mathbf{a}}^\dagger |-\lambda_i\rangle, \\ |\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=2} &= e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_0 \otimes |-\lambda_i\rangle + e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_1 \otimes \hat{\mathbf{a}}^\dagger |-\lambda_i\rangle + e^{-\frac{1}{2}|\lambda_i|^2} \mathbf{A}_2 \otimes (\hat{\mathbf{a}}^\dagger)^2 |-\lambda_i\rangle. \end{aligned}$$

Partiendo desde $n = 0$, a manera que n aumenta se irán añadiendo a $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=0}$ más coeficientes \mathbf{A}_k y términos en los que el operador $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ se aplica más y más veces al estado coherente $|-\lambda_i\rangle$ hasta que el valor de n lo indique. Es importante recalcar que los coeficientes \mathbf{A}_0 que aparecen en $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=2}$ y $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=1}$ no son iguales entre ellos ni al que aparece en $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=0}$, asimismo, el coeficiente \mathbf{A}_1 en $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=2}$ es distinto al que aparece en $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_{n=1}$. Cuando se escoge un valor de n para trabajar, el cálculo de los coeficientes \mathbf{A}_k (dado por las ecuaciones (4.6)) resulta independiente del que estaría asociado a cualquier otra n .

El ambiente de programación de Python incluye el manejo de los estados coherentes así como de los estados de Fock, por lo que las expresiones (5.18) y (5.19) para $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_n$ quedan en una forma conveniente para la comparación de los resultados analíticos y numéricos. Sin embargo, la comparación se realizó con los eigenvectores en la forma (5.18).

Debido a que el cumplimiento de las condiciones de compatibilidad en todos los casos aquí estudiados ($n = 0, 1, 2$) se ha dado únicamente para las condiciones que corresponden al eigenvalor λ_2 , entonces en principio sólo tres de los nueve posibles eigenvectores (tres por caso) se validan como eigenvectores de \hat{H}_{TQDS} : $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_{n=0}$, $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_{n=1}$ y $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_{n=2}$.

Recordemos que para la comparación numérica y analítica de energías, se generaron varios valores de energía analíticos con ayuda de la ecuación (4.4) (no sólo las asociadas al valor de n que se estuviera estudiando) para que hubiese consistencia con la cantidad de eigenvalores de \hat{H}_{TQDS} obtenidos mediante diagonalización numérica y ambos resultados se plasmaron en un gráfico de líneas esperando emparejamiento (ver figura 5.1), notando que éste se daba para las energías asociadas a λ_2 . Para el caso de la comparación de eigenvectores, la idea es similar. Cada energía analítica que fue reproducida en el cálculo numérico (lo cual significa que está cumpliendo condiciones de compatibilidad y se valida como energía del transbordador) tendrá asociado un eigenvalor dado por (5.18) que será válido como un eigenestado del transbordador y deberá ser reproducido también por el cálculo numérico, de modo que lo siguiente es compararlo con el eigenvalor calculado numéricamente que está asociado al mismo valor de energía. La manera de verificar que ambos eigenvectores sean idénticos es compararlos componente a componente, pero dado que son vectores de 30 elementos cada uno, no resulta muy eficiente. Por otro lado, otra forma de determinar que dos vectores son iguales es verificando que tengan la misma magnitud, dirección y sentido, de modo que si son vectores normalizados que se encuentran en la misma dirección y tienen el mismo sentido, el producto interno entre ellos deberá ser uno y será la prueba de que los vectores son equivalentes. Ahora, pensando en que estos vectores representan estados, no viene mucho al caso hablar de que tengan el mismo sentido, si tienen misma magnitud y dirección, son eigenvectores que se corresponden, ya sea que el producto interno entre ellos dé 1 ó -1. Al realizar el producto interno entre $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_{n=0}$, $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_{n=1}$ y $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_{n=2}$ debidamente normalizados con sus respectivos eigenvalores numéricos (los que comparten con ellos el eigenvalor), se pudo verificar que tenían misma magnitud y dirección, por lo que, así como anteriormente se validaron las energías analíticas al ser reproducidas en el cálculo numérico, se validan ahora también los eigenvectores analíticos asociados a esas energías como eigenestados del TQDS. Cabe mencionar que los vectores $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_n$ construidos a partir de (5.18) debidamente normalizados forman, al igual que los eigenvectores calculados mediante diagonalización numérica, una base ortonormal.

Dado que las condiciones de compatibilidad para λ_1 y λ_3 no se están satisfaciendo en $\epsilon_b = 0.420583$, los estados $|\Psi^{\lambda_1}\rangle_n$ y $|\Psi^{\lambda_3}\rangle_n$ estarían construidos con coeficientes \mathbf{A}_k inválidos y por lo mismo, también serían inválidos. Si se hubiese considerado $\epsilon_b = -0.420583$, serían los estados $|\Psi^{\lambda_3}\rangle_n$ los reproducidos en el cálculo numérico y los vectores $|\Psi^{\lambda_1}\rangle_n$ y $|\Psi^{\lambda_2}\rangle_n$ se habrían invalidado.

5.4. Parámetros típicos

En los estudios previos del TQDS presentados como antecedentes en el capítulo 2 de este trabajo, para los cálculos numéricos se establece un conjunto de parámetros con valores específicos que son una constante en cada una de esas investigaciones y son

referidos como parámetros típicos, estas cantidades están dadas como sigue: $x_0 = 5$, $V_0 = 0.5$ y $\alpha = 0.2$.

Explorando nuevamente en primera instancia el caso $n = 1$, se calculan las condiciones de compatibilidad correspondientes para este nuevo conjunto de parámetros, esperando encontrar al menos un valor de ϵ_b para el cual todas las condiciones se satisfagan simultáneamente o, en su defecto, que las condiciones que logren satisfacerse estén asociadas al mismo eigenvalor λ_i para que esto nos asegure la validez de por lo menos una de las energías del sistema.

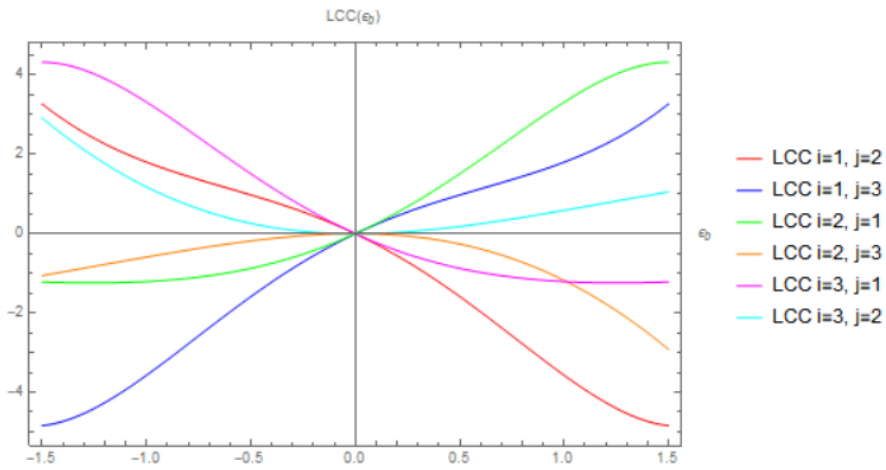


Figura 5.8: Condiciones de compatibilidad asociadas a cada uno de los eigenvalores λ_i para el caso $n = 1$ y usando los parámetros típicos: $x_0 = 5$, $V_0 = 0.5$ y $\alpha = 0.2$. Las seis condiciones comparten la raíz $\epsilon_b = 0$, de modo que para $\epsilon_l = \epsilon_r$ se satisfacen todas las condiciones de compatibilidad simultáneamente.

Entonces, si para la diagonalización numérica del \hat{H}_{TQDS} se consideran los parámetros típicos y $\epsilon_b = 0$, se espera que al cumplirse todas las condiciones de compatibilidad, las energías E_{11} , E_{12} y E_{13} generadas por la expresión (4.4) para $n = 1$ y cada uno de los eigenvalores λ_i se validen como eigenenergías de \hat{H}_{TQDS} al coincidir con tres de los eigenvalores obtenidos en el cálculo numérico.

A continuación se muestra la comparación entre las energías calculadas de forma analítica con las obtenidas numéricamente usando los parámetros típicos y la raíz que se encontró comparten las condiciones de compatibilidad.

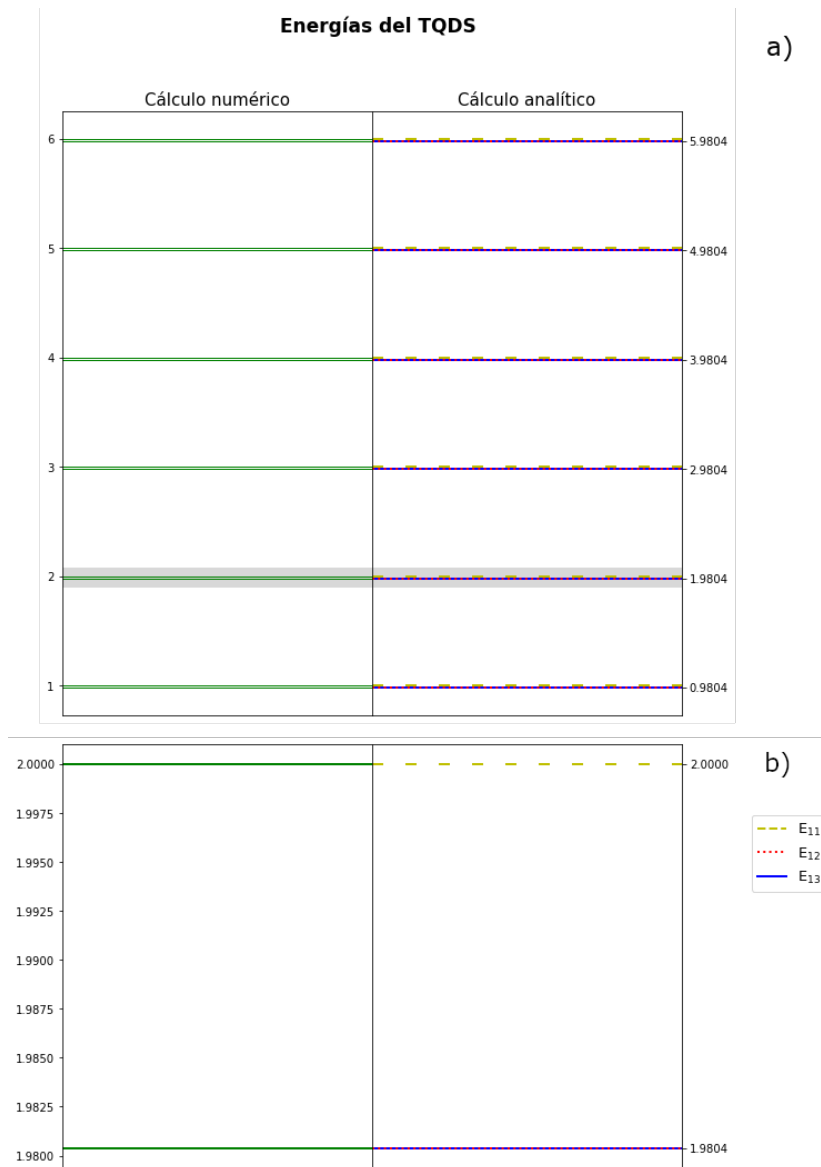


Figura 5.9: a) Comparación entre los resultados obtenidos del cálculo de la energía del TQDS de forma numérica (izquierda) y analítica (derecha) considerando los parámetros típicos $x_0 = 5$, $V_0 = 0.5$, $\alpha = 0.2$ y $\epsilon_b = 0$; éstos se muestran para 6 valores distintos de n , desde 0 a 5 en orden ascendente. La zona sobresaltada en gris es la que corresponde a las energías con $n = 1$. b) Se muestra aquí un acercamiento de la zona resaltada gris en a).

Vemos de la figura (5.9) que la coincidencia entre las energías analíticas y numéri-

cas es total, no sólo para el caso $n = 1$ (que era lo esperado ya que las condiciones de compatibilidad correspondientes a $n = 1$ son las que se mostró que se satisfacían en $\epsilon_b = 0$), sino también para el caso $n = 0$ y valores de n posteriores a 1, como ya se había obtenido anteriormente para la comparación y análisis de energías con otro conjunto de parámetros. Esto implicaría que para $\epsilon_b = 0$ se estarían cumpliendo las ecuaciones (4.13), (E.1), condiciones de compatibilidad globales correspondientes a valores de n mayores a 2 que aún son desconocidas y por último pero no menos importante, se estarían satisfaciendo las condiciones de compatibilidad para $n = 0$ (5.2)(5.4), lo cual significa que la elección de los parámetros típicos y de $\epsilon_l = \epsilon_r$ diagonaliza a la matriz $\hat{\Omega}$ en la eigenbase del operador $\hat{\lambda}$, o en otras palabras, $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ se diagonalizan simultáneamente.

Al cumplirse las condiciones de compatibilidad para todos los eigenvalores λ_i en $\epsilon_b = 0$ y para cualquier valor de n , el sistema queda resuelto totalmente y todas las eigenenergías analíticas y sus respectivos eigenestados $|\Psi^{\lambda_i}\rangle_n$ se reproducen en el cálculo numérico.

Capítulo 6

Conclusiones

El objetivo principal de este trabajo de investigación fue estudiar un sistema que hasta el momento sólo había podido ser resuelto numéricamente observándolo desde un régimen distinto que tal vez permitiría encontrarle solución exacta de forma analítica: el transbordador de triple punto cuántico en el régimen lineal de tunelaje. Como se pudo ver en la sección 1.8.1, la linealización de las tasas de tunelaje provee una simplificación considerable del \hat{H}_{TQDS} , lo cual lo convierte en un objeto matemático algebraicamente más manejable y físicamente, provee información de un sistema donde la única consideración especial es que las barreras de potencial entre los QD's extremos y el QD central sean angostas.

En la búsqueda de métodos de solución analíticos para el \hat{H}_{TQDS} se encontraron dos procedimientos potencialmente admisibles, los cuales se presentan desarrollados a detalle en los capítulos 3 y 4 de esta tesis. El primer método estudiado (capítulo 3), propuso una generalización particular del modelo de Rabi de 2 niveles extendiendo su simetría Z_2 a un sistema de N niveles con simetría Z_N . Esto lo hizo construyendo unos operadores $\hat{\mathbf{X}}$ y $\hat{\mathbf{Z}}$ de dimensión N con características específicas de manera que éstos se reduzcan a las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_x$ y $\hat{\sigma}_z$ respectivamente para $N = 2$. La base de este método es justamente que sin importar el valor de N , el hamiltoniano de Rabi generalizado asociado mantendrá la simetría Z_N correspondiente y precisamente, la presencia de esta simetría en el sistema permitiría una diagonalización parcial del hamiltoniano mediante la transformación unitaria de Fulton-Gouterman. Para identificar si el hamiltoniano del TQDS era soluble usando este procedimiento, el primer requisito a cumplir era que \hat{H}_{TQDS} fuera poseedor de la simetría Z_3 . Sin embargo, de la comparación directa entre \hat{H}_{TQDS} con el que esperábamos fuera su análogo construido a partir de la generalización \hat{H}_3 (el cual se mostró que sí poseía la simetría), se pudo concluir que el hamiltoniano del TQDS no es simétrico ante Z_3 , por lo cual no fue posible calcular de manera analítica las energías y los eigenestados del sistema mediante este método.

El segundo método estudiado (capítulo 4) presentó una alternativa para encontrar algunas soluciones de manera analítica en hamiltonianos del tipo (4.1). Éste se basa en la resolución de la ecuación de Schrödinger en el espacio de Bargmann (4.2), lo cual provee una expresión analítica para la energía del sistema (4.4) que viene de la exigencia de analiticidad de la solución y propone eigenfunciones de la forma (4.5),

reduciendo el problema a encontrar la forma de los coeficientes vectoriales \mathbf{A}_k . De sustituir (4.5) en la ecuación de Schrödinger en el espacio de Bargmann se obtiene una serie de relaciones que permiten el cálculo de expresiones para las componentes de los vectores \mathbf{A}_k al escoger algún valor de n , pero la validez de estas expresiones queda condicionada al cumplimiento de lo que llamamos condición de compatibilidad global.

Las condiciones de compatibilidad son expresiones que relacionan los elementos matriciales de los operadores $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ (matrices que conforman a \hat{H}_{TQDS} y se encuentran ambas en la eigenbase de $\hat{\lambda}$), y de la condición global se generan $N - 1$ condiciones de compatibilidad locales por cada eigenvalor de $\hat{\lambda}$. Dado que las condiciones de compatibilidad restringen los valores que pueden tomar los parámetros del sistema, la expresión analítica para la energía, los coeficientes \mathbf{A}_k y por consiguiente las funciones dadas por (4.5) quedan sujetas a su cumplimiento. Para cada valor de n hay una condición de compatibilidad global que genera seis condiciones de compatibilidad locales, dos por cada eigenvalor λ_i . En este trabajo se estudiaron los casos $n = 0, 1, 2$ y se calcularon sus respectivas condiciones.

Por otro lado, las condiciones de compatibilidad locales no son independientes entre sí en el sentido que si se escoge un conjunto de parámetros adecuado donde se satisfagan las que están asociadas al mismo eigenvalor λ_i , esto nos aseguraría al menos una energía y una eigenfunción válida del sistema de transbordador calculados analíticamente. Para tener un punto de referencia que indicara que los resultados obtenidos analíticamente fueran correctos, se escribió un código en PYTHON que diagonalizara numéricamente el hamiltoniano linealizado del TQDS y arrojara sus eigenvalores y eigenvectores, los cuales fueron tomados como la solución exacta del sistema para fines comparativos. La forma de verificar los resultados fue simple, si el resultado obtenido analíticamente se reproducía en el cálculo numérico, se validaba como solución de \hat{H}_{TQDS} .

Uno de los resultados importantes del estudio de este método es que aunque se escogieran inicialmente los parámetros del sistema de tal forma que se cumplieran específicamente las condiciones de compatibilidad para $n = 1$ (al menos las del mismo eigenvalor), se obtuvo que de manera implícita se estaban cumpliendo simultáneamente a ellas las condiciones para toda n , a pesar de que, en principio, todas son distintas. Esto nos hizo pensar en una posible recursión, que las condiciones de compatibilidad para una n dada involucraran todas las condiciones asociadas a $n's$ anteriores, pero la idea se descartó al estudiar el caso $n = 0$.

Las condiciones de compatibilidad para $n = 0$ son contundentes: $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ deberán compartir eigenvectores. Si consideramos los parámetros típicos (como se vio en la sección 5.1.4), para $n = 1$ se dio una satisfacción total de las condiciones de compatibilidad en $\epsilon_b = 0$, de modo que la elección de $x_0 = 5$, $V_0 = 0.5$, $\alpha = 0.2$ y $\epsilon_l = \epsilon_r$ lleva a $\hat{\Omega}$ a su forma diagonal en la base de $\hat{\lambda}$. Que ambos operadores se diagonalicen simultáneamente asegura el cumplimiento de las condiciones de compatibilidad para cualquier valor de n y esto nos conduce a la solución total del sistema, puesto que se validan todas las energías que pueden ser generadas por (4.4) y sus respectivas eigenfunciones (4.5). En el caso del conjunto de parámetros que se escogió aquí para trabajar: $x_0 = 5$, $V_0 = 0.7$, $\alpha = 0.01$, $\epsilon_l = 1$ y $\epsilon_r = 0.579417$, esta elección permitió que $\hat{\lambda}$ y $\hat{\Omega}$ tuvieran al menos un eigenvector en común, el asociado a λ_2 , eigenvalor para el cual justamente se cumplen las condiciones de compatibilidad. Esto nos conduce a

una solución parcial del sistema, ya que se validan solamente las energías generadas por (4.4) que involucren a λ_2 (un tercio del número total de eigenvalores de \hat{H}_{TQDS}) y sus respectivas eigenfunciones.

Otro resultado importante es que se desarrolló una propuesta para la traducción de las eigenfunciones (4.5) en el espacio de Bargmann a eigenvectores en el espacio de Fock, esto para que fuera posible la comparación y se verificara consistencia entre los resultados analíticos y numéricos.

El presente trabajo provee un análisis amplio del método desarrollado por M. Kus en 1986 para hamiltonianos del tipo (4.1) y particularmente aplicado al hamiltoniano del transbordador de triple punto cuántico linealizado, de modo que al final es posible determinar un criterio de aplicabilidad o no aplicabilidad del método. Esto es, si se permite diagonalización parcial o total del operador $\hat{\Omega}$ trabajando en la eigenbase de $\hat{\Lambda}$ por medio de la elección adecuada de los parámetros del sistema, el hamiltoniano que se trabaje será elegible para ser solucionado ya sea parcial o totalmente.

Referencias

- [1] R. Tripathi y A. Kumar (2017) Application of nanorobotics for cancer treatment. *Materials Today: Proceedings*, 5(3), 9114-9117.
- [2] G. V. da Silva Luz, K. V. Gomes Barros, F. V. Calixto de Araújo, G. Barbosa da Silva, P. A. Ferreira da Silva, R. C. Iquize Condori y L. Mattos Brasil (2016). Nanorobotics in drug delivery systems for treatment of cancer: a review. *J Mat Sci Eng A*, 6, 167-180.
- [3] V. Pott, G. L. Chua, R. Vaddi, J. M-L. Tsai y T. T-H Kim (2012). The shuttle nanoelectromechanical nonvolatile memory. *IEEE transactions on electron devices*, 59(4), 1137-1143.
- [4] C. Ke y H. D. Espinosa (2005). Nanoelectromechanical systems and modeling. *Handbook of theoretical and computational nanotechnology*, 1, 1-38.
- [5] K. L. Ekinici (2005). Electromechanical transducers at the nanoscale: actuation and sensing of motion in nanoelectromechanical systems (NEMS). *small*, 1(8-9), 786-797.
- [6] K. L. Ekinici, X. M. H. Huang y M. L. Roukes (2004). Ultrasensitive nanoelectromechanical mass detection. *Applied Physics Letters*, 84(22), 4469-4471.
- [7] C. Kloeffer y D. Loss, (2013). Prospects for Spin-Based Quantum Computing in Quantum Dots. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 4(1), 51-81.
- [8] L. Y. Gorelik, A. Isacsson, M.V. Voinova, B. Kasemo, R. I. Shekhter y M. Jonson (1998). Shuttle mechanism for charge transfer in Coulomb Blockade nanostructures. *Physical Review Letters*, 80(20), 4526.
- [9] A. V. Moskalenko, S. N. Gordeev, O. F. Koentjoro, P. R. Raithby y R. W. French (2009). Nanomechanical electron shuttle consisting of a gold nanoparticle embedded within the gap between two gold electrodes. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 79(24): 241403.

- [10] K. W. Chan, M. Möttönen, A. Kemppinen, N. S. Lai, K. Y. Tan, W. H. Lim y A. S. Dzurak (2011). Single-electron shuttle based on a silicon quantum dot. *Applied Physics Letters*, 98(21): 212103.
- [11] L. Gaudreau, A. Kam, G. Granger, S. A. Studenikin, P. Zawadzki y A. S. Sachrajda (2009). A tunable few electron triple quantum dot. *Applied Physics Letters*, 95(19): 193101.
- [12] A. D. Armour y A. MacKinnon (2002). Transport via a quantum shuttle. *Physical Review B*, 66: 035333.
- [13] R. H. Blick, A. Erbe, H. Kmmmer, A. Kraus, y J. P. Kotthaus (2000). Charge detection with nanomechanical resonators. *Physica E (Amsterdam)* 6, 821.
- [14] I. Maldonado, J. Villavicencio, E. Cota y G. Platero (2007). Transport in an ac-driven triple dot quantum shuttle. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 40(5), 1105-1107.
- [15] J. Villavicencio, I. Maldonado, R. Sánchez, E. Cota y G. Platero (2008). Tunnel spectroscopy in ac-driven quantum dot nanoresonators. *Applied Physics Letters*, 92(19), 192102.
- [16] J. Villavicencio, I. Maldonado, E. Cota y G. Platero (2011). Quasienergy spectrum and tunneling current in ac-driven triple quantum dot shuttles. *New Journal of Physics*, 13: 023032.
- [17] J. Qu, S. Duan y N. Yang (2012). Dynamical localization of two electrones in triple-quantum-dot shuttles. *Physics Letters A*, 376(19), 1636-1640.
- [18] C. E. Creffield y G. Platero (2002). ac-driven localization in a two-electron quantum dot molecule. *Physical Review B*, 65(11), 113304.
- [19] J. Villavicencio, I. Maldonado, E. Cota y G. Platero (2013). Spin-orbit effects in a triple quantum dot shuttle. *Physical Review B*, 88(24), 245305.
- [20] J. Mora, E. Cota y F. Rojas (2014). Hybrid entanglement in a triple-quantum-dot shuttle device. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 90(4): 042323.
- [21] K. Y. Chagollán. Efectos no lineales en el entrelazamiento cuántico híbrido en sistemas nanoelectromecánicos. Tesis de maestría CICESE, 2018.
- [22] I. I. Rabi (1936). On the process of space quantization. *Physical Review*, 49(4), 324.

- [23] Q. Xie, H. Zhong, M. T. Batchelor, y C. Lee (2017). The quantum Rabi model: solution and dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 50(11), 113001.
- [24] C. Gerry y P. Knight. *Introductory Quantum Optics* 90-92, 2004.
- [25] A. Auffeves, D. Gerace, R. Maxime, S. Portolan, M. F. Santos, ‘ L. C. Kwek y C. Miniatura. *Strong Light-Matter Coupling: From Atoms to Solid-State Physics* (World Scientific, Singapore, 2013).
- [26] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [27] E. T. Jaynes y F. W. Cummings (1963). Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, 51(1), 89–109.
- [28] Yao-Zhong Zhang (2014). Z_n symmetric chiral Rabi model: a new N -level system. *Annals of Physics*, 347, 122-129.
- [29] R. L. Fulton y M. Gouterman (1961). Vibronic Coupling. I. Mathematical Treatment for Two Electronic States. *The Journal of Chemical Physics*, 35(3), 1059–1071.
- [30] M. Kus y M. Lewenstein (1986). Exact isolated solutions for the class of quantum optical systems. *Journal of physics A: mathematical and general*, 19(2), 305.
- [31] J. M. Robinson y S. L. Trubatch (1971). Dynamical Applications of Bargmann Space I. Pure Bose Systems. *American Journal of Physics*, 39(8), 886-892.

Apéndice A

Eigenvectores de la matriz $\hat{\lambda}$

Serán etiquetados por γ_i donde el subíndice i denotará al eigenvalor λ_i al que el eigenvector corresponde y se encuentran debidamente normalizados.

$$\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{4V_0^2\alpha^2}{(\frac{\epsilon_b}{4X_0} + B)^2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2V_0\alpha}{(\frac{\epsilon_b}{4x_0} + B)} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_3 = \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{4V_0^2\alpha^2}{(B - \frac{\epsilon_b}{4X_0})^2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-2V_0\alpha}{(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})} \\ -1 \end{pmatrix}$$

Apéndice B

Matriz de transformación

La matriz de transformación o de cambio de base se construye con los eigenvectores de la base a la cual se quiere transformar (en este caso, los eigenvectores de $\hat{\lambda}$) pero escritos en la base que se encuentren actualmente y esto nos permite expresar a $\hat{\Omega}$ en su forma inicial en la base donde $\hat{\lambda}$ es diagonal. Esto es:

$$\hat{C}^\dagger \hat{\Omega} \hat{C} = \hat{\Omega}^{(\lambda)}$$

Donde,

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{(\frac{\epsilon_b}{4X_0} + B)}{\sqrt{2(\frac{\epsilon_b}{4X_0} + B)^2 + 4V_0^2 \alpha^2}} & \frac{(B - \frac{\epsilon_b}{4X_0})}{\sqrt{2(B - \frac{\epsilon_b}{4X_0})^2 + 4V_0^2 \alpha^2}} \\ 0 & \frac{2V_0 \alpha}{\sqrt{2(\frac{\epsilon_b}{4X_0} + B)^2 + 4V_0^2 \alpha^2}} & \frac{-2V_0 \alpha}{\sqrt{2(B - \frac{\epsilon_b}{4X_0})^2 + 4V_0^2 \alpha^2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-(\frac{\epsilon_b}{4X_0} + B)}{\sqrt{2(\frac{\epsilon_b}{4X_0} + B)^2 + 4V_0^2 \alpha^2}} & \frac{-(B - \frac{\epsilon_b}{4X_0})}{\sqrt{2(B - \frac{\epsilon_b}{4X_0})^2 + 4V_0^2 \alpha^2}} \end{pmatrix}$$

Apéndice C

Operador $\hat{\Omega}^{(\lambda)}$ en su forma matricial

Después de aplicar la transformación de cambio de base a la matriz $\hat{\Omega}$, tenemos que ésta se ve en la eigenbase de $\hat{\lambda}$ como sigue:

$$\hat{\Omega}^{(\lambda)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\epsilon_l + \epsilon_r) & \frac{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0V_1\alpha}{\sqrt{4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2\alpha^2}} & \frac{(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0V_1\alpha}{\sqrt{4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2\alpha^2}} \\ \frac{(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b - 4V_0V_1\alpha}{\sqrt{4(B + \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2\alpha^2}} & \frac{1}{2}(\epsilon_l + \epsilon_r) & 0 \\ \frac{(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})\epsilon_b + 4V_0V_1\alpha}{\sqrt{4(B - \frac{\epsilon_b}{4x_0})^2 + 8V_0^2\alpha^2}} & 0 & \frac{1}{2}(\epsilon_l + \epsilon_r) \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

Apéndice D

Algoritmo para el cálculo numérico

Algoritmo para resolver el hamiltoniano numéricamente y comparar con los resultados analíticos en Python usando la librería *QuTiP*:

- Llamar a las librerías:
 - Llamar a *QuTiP* (librería para simulación de sistemas cuánticos).
 - Llamar a *Matplotlib* (librería para graficar).
 - Llamar a *Numpy* (librería con arreglos numéricos y funciones matemáticas).
- Especificar los parámetros fijos del sistema:
 - Definir la dimensión del subespacio de modos de oscilación: $D = 10$.
 - Especificar \hbar , ω , ϵ_l , ϵ_r , ϵ_b , Δx_{zp} , V_0 , α y x_0 .
- Definir a los operadores del subespacio electrónico en la base de $\hat{\lambda}$:
 - Declarar las matrices de los operadores $\hat{\Omega}$ (C.1) y $\hat{\lambda}$ (4.3) como objetos “Qobj” de *QuTiP*.
- Definir a los operadores del subespacio de modos de oscilación:
 - Utilizar los operadores de aniquilación y creación ya definidos en *QuTiP* para calcular $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger + \hat{a}$.
- Calcular el hamiltoniano del sistema:
 - Usar la función “tensor” de *QuTiP* para multiplicar los correspondientes operadores de los dos subespacios en (1.14).
 - Sumar las partes para obtener el hamiltoniano completo del sistema: \hat{H}_{TQDS} .
- Obtener energías numéricas:
 - Usar la función “eigenenergies” de *QuTiP* en el hamiltoniano para calcular sus eigenvalores.

- Guardar las energías en un arreglo de *Numpy*.
- Calcular energías analíticas:
 - Usar la expresión obtenida analíticamente para calcular los valores de energía (4.4).
 - Guardar las energías en un arreglo de *Numpy*.
- Comparar el espectro numérico y analítico gráficamente:
 - Usar la función “subplots” de *Matplotlib* para crear una gráfica compuesta de dos sub-gráficas.
 - Añadir los datos de las energías numéricas a la primer sub-gráfica.
 - Añadir los datos de las energías analíticas a la segunda sub-gráfica.
- Cálculo de eigenestados numéricos:
 - Usar la función “eigenstates” de *QuTiP* en el hamiltoniano para calcular sus eigenestados.
- Cálculo de eigenestados analíticos:
 - Declarar los vectores A_{ij} obtenidos analíticamente como objetos “Qobj” de *QuTiP*.
 - Usar la función “coherent” de *QuTiP* para escribir la parte del subespacio de modos de oscilación de los eigenestados analíticos.
 - Usar la función “tensor” de *QuTiP* para unir los 2 subespacios que componen a los eigenestados.
 - Sustituir los 3 puntos anteriores en la expresión global para los eigenestados del sistema (5.18).
- Comparar eigenestados analíticos con eigenvectores numéricos que corresponden a la misma eigenenergía:
 - Usar la función “overlap” de *QuTiP* para calcular el producto interno entre estados numéricos y analíticos con la misma energía.
 - Si el resultado del producto interno es 1 ó -1 se concluye que los estados son iguales.

Apéndice E

Condición de compatibilidad global para $n = 2$

Dado que las condiciones de compatibilidad globales (y locales) son distintas para cada valor de n que se escoge, se calculan para cada caso. Las condiciones para $n = 0$ y $n = 1$ se incluyen en el texto, aquí se presenta adicionalmente la de $n = 2$:

$$\begin{aligned}
& (2 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 - \lambda_i \lambda_j) \left[\frac{(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i \lambda_j)}{\lambda_j - \lambda_i} \left(\frac{-\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i} \right) - \frac{\sum_{k \neq i} \Omega_{jk} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right)}{\lambda_j - \lambda_i} \right. \\
& - \frac{\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i} \left(\sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i \right) - \sum_{k \neq i} \Omega_{jk} \left[\frac{(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i \lambda_k)}{\lambda_j - \lambda_i} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) \right. \\
& \left. - \frac{\sum_{m \neq i} \Omega_{km} \left(\frac{-\Omega_{mi}}{\lambda_m - \lambda_i} \right)}{\lambda_k - \lambda_i} - \frac{\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \left(\sum_{m \neq i} \Omega_{im} \left(\frac{-\Omega_{mi}}{\lambda_m - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i \right) \right] - \lambda_j \left(\frac{-\Omega_{ji}}{\lambda_j - \lambda_i} \right) \\
& \left. - \frac{\Omega_{ji}}{2} \left[\sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left[\frac{(1 + \Omega_{ii} - \lambda_i^2 + \lambda_i \lambda_k)}{\lambda_k - \lambda_i} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) - \frac{\sum_{m \neq i} \Omega_{km} \frac{-\Omega_{mi}}{\lambda_m - \lambda_i}}{\lambda_k - \lambda_i} \right. \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \left(\sum_{m \neq i} \Omega_{im} \left(\frac{-\Omega_{mi}}{\lambda_m - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i \right) \right] + \lambda_i \sum_{k \neq i} \Omega_{ik} \left(\frac{-\Omega_{ki}}{\lambda_k - \lambda_i} \right) + 2\lambda_i^2 \right] = 0 \quad (\text{E.1})
\end{aligned}$$