

Estudio de la complejidad de los estados resonantes del átomo de Helio a través de cuantificadores de la teoría de la información y del entrelazamiento cuántico.

Juan Pablo Restrepo-Cuartas y José Luis Sanz-Vicario
 Instituto de Física, Universidad de Antioquia, AA1226, Medellín, Colombia
gomejp@fisica.udea.edu.co, sanjose@fisica.udea.edu.co

Las distribuciones de densidad de átomos y moléculas son en principio objetos físicos observables, si bien sólo contienen información espacial proyectada de la propia función de onda. Estas densidades pueden pensarse como funciones de distribución de probabilidad sujetas al escrutinio de los métodos de análisis de la teoría de la información, como medidas de entropías y cuantificadores de complejidad. Los estados resonantes en átomos y moléculas presentes en espectros de colisiones electrónicas o fotónicas son estados de scattering metaestables embebidos en el continuo electrónico, cuya densidad electrónica, aún siendo estados del continuo, muestra una fuerte localización en zonas cercanas al núcleo. Su caracterización en energía y anchura ha sido motivo de estudio intenso en las últimas décadas. Sin embargo, la clasificación de estas resonancias en términos de etiquetas o números cuánticos aproximados no ha estado exenta de controversias.

En este átomo de dos electrones las etiquetas de la forma configuracional $(n_1 l_1, n_2 l_2)$ pueden ser buenas aproximaciones para los estados simplemente excitados $(1s, nl)$, pero no así para los estados doblemente excitados, debido a la fuerte correlación electrónica que hace que la función de onda para un estado resonante venga descrita por una mezcla compleja de configuraciones. Han surgido así varios métodos de clasificación de estados doblemente excitados o resonantes [1], destacando la propuesta de Herrick y Sinagoglu que rotula estos estados en términos de números cuánticos aproximados K, T generando series del tipo $n_1(K, T) n_2^A$ dentro de la serie de Rydberg de resonancias. En este trabajo se pretende hallar una justificación de estas clasificaciones a partir del análisis topológico de las distribuciones de densidad $\rho(r)$ y $\rho(r_1, r_2)$ de la parte localizada de las resonancias, con cuantificadores de entropía tanto globales (entropía de Shannon, de Tsallis, de Rényi) como locales (información de Fisher),

medidas de distancia de similitud entre ellas [2], así como la magnitud de entrelazamiento cuántico a través de entropías de von Neumann y entropía lineal calculadas con la matriz de densidad reducida [3]. Como ilustración, en la figura 1 puede observarse que la información de Fisher aplicada a las distribuciones de densidad radial $\rho(r)$ muestra un comportamiento diferente para estados ligados y estados resonantes. Adicionalmente, dentro de la serie de Rydberg de estados resonantes, la información de Fisher es capaz de discriminar notablemente el comportamiento de las tres diferentes series $n_1(K, T) n_2^A$ presentes en la simetría $^1P^o$ del Helio, antes de colapsar en el segundo umbral de ionización.

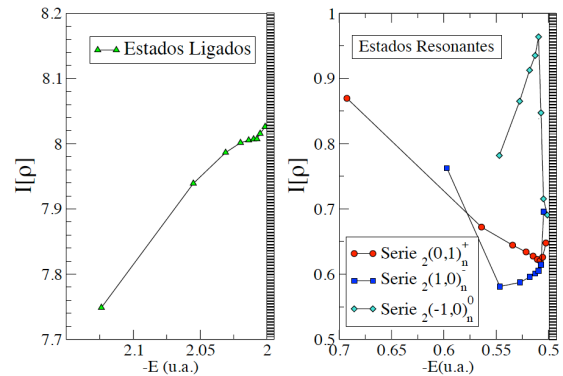


Figura 1. Entropía o información de Fisher $I[\rho(r)]$ para las densidades de los estados ligados y resonantes de la simetría $^1P^o$ en el átomo de Helio, localizados energéticamente por debajo del primer umbral ($E=-2.0$ a.u.) y del segundo umbral de ionización ($E=-0.5$ a.u.), respectivamente.

Referencias

- [1] J.W. Cooper, U. Fano y F. Prats, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 518 (1963); D.R. Herrick y O. Sinagoglu, *Phys. Rev. A* **11**, 97 (1975); C.D. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1348 (1983)
- [2] S. López-Rosa, J. Antolín, J.C. Angulo y R.O. Esquivel, *Phys. Rev. A* **80**, 012505 (2009)
- [3] D. Manzano *et al*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 275301 (2010); J.S. Dehesa *et al*, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 015504 (2012)