

Descripción de los estados cuánticos electrónicos, en el problema de colisión de electrones a una impureza: Más allá de la aproximación Born-Oppenheimer.

Description of the electronic quantum states, in the scattering problem of electrons to an impurity: Beyond the Born-Oppenheimer approximation.

**Otto Rendón.**

## **RESUMEN**

Se estudia el problema de colisión de electrones sobre una impureza en un sistema unidimensional. La impureza es modelada a través de un potencial tipo delta de Dirac,  $V(x) = b V_0 \delta(x-a)$ , donde  $a$  y  $b$  son parámetros cada uno con dimensión de longitud y  $V_0$  es la intensidad del potencial con dimensión de energía. Para obtener el estado cuántico electrónico, función de onda  $\Psi$ , la literatura especializada (Ferry y Goodnick, 2001; Phillips, 2003) considera la impureza completamente localizada: Aproximación Born-Oppenheimer (ABO). Es evidente que ABO contrasta con el principio de Heisenberg. En este trabajo, se libera la restricción de localidad de la impureza a través de la información asociada al parámetro  $a$ . En este contexto, el operador matriz densidad caracteriza el estado de los electrones, y una entropía en el estado cuántico de los electrones es originada por la desinformación en la posición de la impureza.

## **SUMMARY**

The scattering problem of electrons is studied on an impurity in a system one-dimensional. The impurity is modeled through a potential type delta of Dirac,  $V(x) = b V_0 \delta(x-a)$ , where  $a$  and  $b$  are parameters each one with dimension of length and  $V_0$  it is the intensity of the potential with energy dimension. To obtain the electronic quantum state, wave function  $\Psi$ , the specialized literature (Ferry y

Goodnick, 2001; Phillips, 2003) considers the totally localized impurity: Born-Oppenheimer approximation (BOA). It is evident that BOA contrasts with the Heisenberg uncertainty principle. In this work, the restriction of one localized impurity is liberated through the information associated to the parameter  $a$ . In this context, the density matrix characterizes the state of the electrons, and its entropy in the electronic quantum state is originated by the information at the position of the impurity.

**PALABRAS CLAVE / Colisión de partículas / Impureza móvil / Aproximación Born-Oppenheimer / Matriz densidad / Entropía de Shanon /**

**Otto Rendón.** Licenciado en Física, Universidad Simón Bolívar (USB), Venezuela. Magíster en Física, Universidad Simón Bolívar (USB), Venezuela. Doctorando en Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), Venezuela. Profesor, Universidad de Carabobo (UC), Venezuela. Dirección: Departamento de Física, Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología, Universidad de Carabobo, Sector Bárbula, Naguanagua 2005, Edo. Carabobo, Venezuela. E-mail: [orendon@uc.edu.ve](mailto:orendon@uc.edu.ve).

El entendimiento de las propiedades de transporte electrónico, tanto en sistemas macroscópicos o mesoscópicos, se basa en el análisis de los procesos de colisión de los portadores de cargas (Ferry y Goodnick, 2001; Phillips, 2003).

Un problema de gran interés básico y tecnológico, ha sido el estudio de los mecanismos de producción de correlación cuántica del tipo Einstein-Podolski-Rosen en un ambiente de estado sólido (López et al, 2007). Muchos de esos estudios se fundamentan en los procesos de colisión de electrones de conducción a impureza (Costa y Bose, 2001). Estos artículos modelan la impureza como

obstáculo fijos, o situados en un punto determinado, en contraste con el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Al considerar la impureza localizada se está trabajando en un contexto donde la aproximación de Born-Oppenheimer (ABO) es válida. La validez de la aproximación de Born-Oppenheimer (Phillips, 2003; Doltsinis, 2006), aproximación adiabática, consiste en que la velocidad de la impureza (ion), está relacionada con la velocidad de Fermi de los electrones por el cociente  $(m_e/M_{imp})^{3/4} = 3 \times 10^{-3}$ , siendo la masa de la impureza,  $M_{imp}$ , típicamente 2000 veces mayor a la masa del electrón,  $m_e$ .

Como resultado de la aproximación de ABO (Phillips, 2003; Doltsinis, 2006), la función de onda del electrón es expresada como  $\Psi(x, a_{min})$ , donde  $x$  es la coordenada de posición del electrón y  $a_{min}$  denota la posición de equilibrio de la impureza.

El valor determinado de  $a_{min}$  es obtenido por la condición de equilibrio estático sobre la impureza,

$$\left. \frac{\partial}{\partial a} V_{imp}(a) \right|_{a=a_{min}} = 0$$

siendo  $V_{imp}(a)$  el potencial efectivo que siente la impureza por el sistema de estado sólido. El inconveniente en esta aproximación ABO surge cuando el mínimo del potencial no define un único mínimo, y su solución es definida por un conjunto  $I$  con cardinalidad mayor a uno.

Para resolver el inconveniente de poseer más de un punto de equilibrio estático para la impureza, se define una distribución de probabilidad asociada a la posición  $a$  de la impureza,  $P(a)$ , a través de:

$$P(a) = \Phi^*(a) \Phi(a)$$

donde  $\Phi(a)$  es la función de onda de la impureza, obtenida de la ecuación de Schrödinger efectiva para el ion en la aproximación ABO (Phillips, 2003; Doltsinis, 2006).

En este contexto, para caracterizar el estado cuántico electrónico se debe usar la matriz densidad  $\rho$ :

$$\rho(x', x) = \int da P(a) \Psi^*(x', a) \Psi(x, a)$$

la interpretación física del estado mixto  $\rho$  es directa, para una impureza en la posición  $a$  con una densidad de probabilidad  $P(a)$  el electrón está en un estado cuántico  $\Psi(x, a)$  con la misma densidad de probabilidad. Es claro que aún se está manteniendo la condición adiabática, el electrón “siente” a la impureza de manera estática.

Para dar una prescripción del método se desarrollara un ejemplo que consiste en la colisión de un electrón sobre una impureza en un sistema unidimensional.

### **Prescripción del método.**

Se estudia el problema de colisión de electrones sobre una impureza en un sistema unidimensional. La impureza es modelada a través de un potencial tipo delta de Dirac,  $V(x) = b V_0 \delta(x-a)$ , donde  $a$  y  $b$  son parámetros cada uno con dimensión de longitud y  $V_0$  es la intensidad del potencial con dimensión de energía. El Hamiltoniano del problema viene dado por:

$$-\frac{\hbar^2}{2M_{imp}} \frac{\partial^2}{\partial a^2} \Xi(x, a) + V_{imp}(a) \Xi(x, a) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Xi(x, a) + b V_0 \delta(x-a) \Xi(x, a) = E_{Total} \Xi(x, a)$$

siendo  $\Xi(x,a)$  la función de onda del sistema electrón–impureza,  $V_{imp}(a)$  el potencial que siente la impureza,  $a$  la coordenada de la impureza y  $x$  la del electrón. El tamaño de la impureza es dado por la interacción tipo delta de Dirac y en este caso es puntual, condición que puede ser generalizada. En la aproximación ABO ordinaria la posición de la impureza es fija, pero si el pozo de potencial sobre la impureza es de piso plano, ésta puede “moverse “ en un intervalo I.

**Aproximación Born-Oppenheimer con pozo de potencial para la impureza piso plano.**

En la aproximación ABO (Phillips, 2003; Doltsinis, 2006), el problema reducido para el electrón colisionando con la impureza es :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_k(x, a) + bV_0 \delta(x-a) \Psi_k(x, a) = E_{elec} \Psi_k(x, a)$$

siendo  $k$  el número cuántico asociado a un electrón con “momentum”  $k$ . Para fijar idea se supone al pozo de potencial de la impureza igual a:

$$V_{imp}(a) = \begin{cases} 0 & \text{si } a \in [0, L] \\ \infty & \text{si } a \notin [0, L] \end{cases}$$

Luego el estado cuántico mixto del electrón a una temperatura  $T \neq 0K$ , es:

$$\rho(x', x) = \sum_n \frac{e^{-\frac{E_n}{KT}}}{Z} \int da P_n(a) \Psi_k^*(x', a) \Psi_k(x, a)$$

con  $Z$  como la función de partición, donde  $E_n$  es la energía cuantizada de la impureza,  $n$  su número cuántico y  $P_n(a)$  la distribución de probabilidad de la posición  $a$  de la impureza cuando está en el estado cuántico  $n$ . Siendo, además,  $\Psi_k(x,a)$  la función de onda del electrón en el problema de colisión para  $E_{elec} < E_2 - E_1$ , igual a:

$$\Psi_k(x, a) = e^{ik(x-a)} + R_k e^{ik|x-a|}$$

donde  $R_k = z_k / (i - z_k)$  y  $z_k = m b V_0 / \hbar^2 k$ .

## Conclusiones

Se presenta un novel método para analizar problema de transporte electrónico bajo impureza no estática en materia condensada. En esta primera presentación se mostró una situación sencilla, pero aplicaciones a casos con más riqueza física es posible. Por ejemplo:

- Generalizar a procesos inelásticos.
- Estudiar colisiones con más de una partícula, y así poder analizar el comportamiento de la correlación cuántica en función con la temperatura.

## Referencias

Costa AT, Bose S (2001) Impurity Scattering Induced Entanglement of Ballistic Electrons. *Phys. Rev. Lett.* 87: 277900-277904.

Doltsinis NL (2006) Molecular Dynamics Beyond the Born-Oppenheimer Approximation: Mixed Quantum-Classical Approaches. *Computational Nanoscience: Do it Yourself!*. NIC Series. 31:389-409.

Ferry DK, Goodnick SM (2001) Transport in Nanostructure. Cambridge University Press. Cambridge U.K. pp. 91-444.

López A, Villalba VM, Medina E (2007) Two-electron-entanglement enhancement by an inelastic scattering process. *Phys. Rev. B.* 76: 115107-115113.

Phillips P (2003) *Advanced Solid State Physics*. Westview Press. Oxford U.K. pp. 9-15.