



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA

CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

TESIS

**CORRELACIONES ESTADÍSTICAS DE  
ÓRDENES ALTOS EN SISTEMAS  
CUÁNTICOS DE TRES PARTÍCULAS**

Posgrado en Ciencias (Química)

Saúl Juan Carlos Salazar Samaniego

---

Asesor

Dr. Robin Preenja Sagar

Coasesor

Dr. Humberto Laguna Galindo

Enero 2022

# Dedicatoria

A mi madre por su incondicional apoyo y amor que siempre han sido fundamentales en todo este trayecto.

A mi hermana que me ha acompañado y ha sostenido su convicción en mi trabajo.

A mi sobrina que tiene la curiosidad necesaria para seguir los pasos que conducen al conocimiento científico.

... y a todos aquellos que de manera involuntaria ayudaron en este proyecto.

# Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mis asesores Dr. Robin Sagar y Dr. Humberto Laguna quienes además de ser mentores son amigos. Durante estos años sus conocimientos y enseñanzas me han guiado a través de cada una de las etapas de mi formación académica. Sobre todo las charlas de café y por *meet* han sido siempre estimulantes y enriquecedoras de manera personal y profesional.

Un agradecimiento especial a Dr. Vinod Prasad que durante su estancia en el grupo coadyuvo en mi desarrollo académico por el trabajo que se realizó en conjunto.

Por otra parte quiero agradecer a la Red Mexicana de Fisicoquímica Teórica por su apoyo durante las reuniones anuales en las cuales el encuentro de ideas y colegas fue importante para el desarrollo de la investigación científica.

También quiero agradecer a la Universidad Autónoma Metropolitana en especial al Departamento de Química de la Unidad Iztapalapa por brindarme todos los recursos y herramientas que fueron necesarios para llevar a cabo el proyecto de investigación. No hubiera podido llegar a estos resultados de no haber sido por la beca de CONACyT otorgada durante el doctorado. Y aunque se sobrevinieron eventos inesperados como un sismo, una huelga y una pandemia durante mi estancia doctoral todo contribuyó a construir un proyecto de vida para el futuro.

# Índice general

Índice de figuras	V
Índice de tablas	XVI
Nomenclatura	XVII
Lista de artículos	XVII
Introducción	1
<b>1. Antecedentes</b>	<b>4</b>
1.1. La ecuación de Schrödinger	4
1.2. Interacción física y correlaciones estadísticas	6
1.2.1. Correlación de variables en la mecánica cuántica	7
1.2.2. Energía de correlación vs correlación estadística	8
1.3. Densidades probabilísticas y la correlación estadística	9
<b>2. Modelos de estudio para tres partículas</b>	<b>12</b>
2.1. $N$ -Osciladores acoplados	12
2.1.1. Potenciales e interacciones	13
2.2. 3- Osciladores acoplados	14
2.2.1. Osciladores acoplados sin espín	16
2.2.2. Osciladores acoplados con espín	16
2.3. Osciladores no acoplados	18
2.4. La distribución Gaussiana multivariada y los modelos de osciladores	20
2.5. Relación funcional entre los parámetros de los potenciales $(\omega_{\pm}, \lambda_{\pm})$ en espacios opuestos	23
2.6. Potencial efectivo	25

<b>3. Medidas de localización</b>	<b>27</b>
3.1. Entropía de Shannon	27
3.1.1. Entropía de Shannon multivariada	28
3.1.2. Entropía relativa	30
3.2. Desviación estándar	30
3.3. Suma entrópica	31
3.4. Entropías basadas en densidades acumulativas	32
3.4.1. Entropías de distribuciones acumulativas de una variable	33
3.4.2. Entropías de distribuciones acumulativas de dos variables	33
3.4.3. Entropías de distribuciones acumulativas de tres variables	35
<b>4. Medidas de correlación estadística: de pares</b>	<b>36</b>
4.1. Información mutua	36
4.2. El coeficiente de correlación y la matriz de correlación	37
4.3. Medidas de correlación estadística de pares basadas en distribuciones acumulativas	39
4.4. Medidas de correlación estadística de pares basadas en momentos de orden superior	39
<b>5. Medidas de correlación estadística: de tres variables y de órdenes altos</b>	<b>42</b>
5.1. Información mutua de tres variables	42
5.1.1. Correlación de orden alto	43
5.2. Medidas de correlación estadística de tres variables basadas en distribuciones acumulativas	44
5.3. Medidas de correlación estadística de tres variables basadas en momentos de orden superior	44
5.3.1. Correlación de orden alto	46
<b>6. Medidas informacionales en los estados basales</b>	<b>49</b>
6.1. Osciladores no acoplados	49
6.2. Osciladores acoplados	51
6.3. Conclusiones	58
<b>7. Medidas informacionales vs. Medidas basadas en momentos de la densidad: estados basales y estados excitados</b>	<b>60</b>
7.1. Osciladores no acoplados	60
7.2. Osciladores acoplados	63
7.2.1. Estados basales	67
7.2.1.1. Medidas de información de orden alto	69

7.2.1.2. Espacio de momentos . . . . .	73
7.2.2. Estados excitados . . . . .	76
7.2.2.1. Medidas de información de orden alto . . . . .	85
7.3. Conclusiones . . . . .	89
<b>8. Medidas informacionales de Shannon vs. Medidas basadas en densidades acumulativas: estados basales</b>	<b>91</b>
8.1. Osciladores no acoplados . . . . .	91
8.2. Osciladores acoplados para la función de onda simétrica . . . . .	95
8.3. Osciladores acoplados para la función de onda antisimétrica . . . . .	100
8.4. Sumas entrópicas . . . . .	104
8.5. Conclusiones . . . . .	106
<b>9. Medidas informacionales en la presencia de interacción entre tres cuerpos: estado basal</b>	<b>108</b>
9.1. Potenciales efectivos . . . . .	109
9.2. Entropías de Shannon . . . . .	110
9.3. Medidas de información de orden alto . . . . .	113
9.3.1. Altura del potencial . . . . .	113
9.3.2. Ancho del potencial . . . . .	117
9.4. Potencial producto y potencial Gaussiano alternativo . . . . .	119
9.5. Conclusiones . . . . .	122
<b>Conclusiones generales</b>	<b>123</b>
<b>Perspectivas</b>	<b>125</b>
<b>Apéndice A. Coeficiente de correlación para la distribución Gaussiana del estado basal <math> 000\rangle</math></b>	<b>126</b>
<b>Apéndice B. Relación funcional entre los parámetros de los potenciales <math>(\omega_{\pm}, \lambda_{\pm})</math> en espacios opuestos: 2- Osciladores acoplados</b>	<b>130</b>
<b>Apéndice C. Distribuciones de fase cuánticas y medidas basadas en densidades acumulativas</b>	<b>136</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>148</b>

# Índice de figuras

1.1. Interacción entre dos partículas $x_i$ y $x_j$ separadas a una distancia $d_{ij}$ sometidas a un potencial de interacción donde existe correlación por lo que se cumple la condición $P(x_i, x_j) \neq P(x_i)P(x_j)$ . . . . .	7
2.1. Gráficas de contornos de la función de densidad reducida $ 000\rangle$ no interactuante con potencial $\lambda = 0$ (izquierda), con potencial atractivo $\lambda = 5$ (centro) y con potencial repulsivo $\lambda = 0,57$ (derecha). En espacio de posición y $\omega = 1$ . . . . .	22
2.2. Gráficas de contorno de la función de densidad de pares para el estado $ 001\rangle$ con $\omega_{\pm} = 1$ . Primera fila: potencial atractivo $\lambda_+ = 2,236$ en espacio de posición y potencial repulsivo $\lambda_- = 0,559$ en espacio de momentos (izquierda-derecha) . Segunda fila: potencial repulsivo $\lambda_- = 0,553$ en espacio de posición y potencial atractivo $\lambda_+ = 1,936$ en espacio de momentos (izquierda-derecha). . . . .	25
6.1. Izquierda: gráficas de las entropías en espacio de posición $S_{\Psi}$ (rojo) y en espacio de momentos $S_{\Phi}$ (azul) contra $\frac{1}{\omega}$ . Derecha: gráficas de la suma entrópica $S_T^D$ contra $\frac{1}{\omega}$ para $D = 3$ (verde), $D = 2$ (rojo) y $D = 1$ (azul). Ambas figuras para el estado $ 012\rangle$ . . . . .	50
6.2. Izquierda: gráficas de la información mutua ( $I_x = I_p$ ) contra $\frac{1}{\omega}$ para funciones de onda simétricas (azul) y antisimétricas (rojo). Derecha: gráficas de la información de tercer orden ( $I_x^3 = I_p^3$ ) contra $\frac{1}{\omega}$ para funciones de onda simétricas (azul) y antisimétricas (rojo). Ambas figuras para el estado $ 012\rangle$ . . . . .	51
6.3. Arriba a la izquierda: gráficas de las entropías en espacio de posición $S_{\Psi}$ (rojo) y en espacio de momentos $S_{\Phi}$ (azul) contra el potencial $\lambda$ para el estado $ 001\rangle$ potencial atractivo. Arriba a la derecha: gráficas de la suma entrópica $S_T^3$ (verde) contra el potencial $\lambda$ . Fila inferior: gráficas de las sumas de entrópicas $S_T^2$ (rojo) y $S_T^1$ (azul) contra el potencial $\lambda$ . . . . .	52

<p>6.4. Arriba a la izquierda: gráficas de las entropías en espacio de posición <math>S_{\Psi}</math> (rojo) y en espacio de momentos <math>S_{\Phi}</math> (azul) contra el potencial <math>\lambda</math> para el estado <math> 001\rangle</math> potencial repulsivo. Arriba a la derecha: gráficas de la suma entrópica <math>S_T^3</math> (verde) contra el potencial <math>\lambda</math>. Fila inferior: gráficas de las sumas de entrópicas <math>S_T^2</math> (rojo) y <math>S_T^1</math> (azul) contra el potencial <math>\lambda</math>. La línea vertical discontinua indica el valor límite de <math>\lambda</math>. . . . .</p>	<p>53</p>
<p>6.5. Fila superior: gráficas de las densidades de una variable <math>\rho(x)</math> (rojo) contra <math>x</math> para un potencial repulsivo con <math>\lambda = 0,1</math> (izquierda) y <math>\lambda = 0,4</math> (derecha). Fila inferior: gráficas de las densidades de una variable <math>\pi(p)</math> (azul) contra <math>p</math> para un potencial repulsivo con <math>\lambda = 0,1</math> (izquierda) y <math>\lambda = 0,4</math> (derecha). En ambos casos para el estado <math> 001\rangle</math>. . . . .</p>	<p>54</p>
<p>6.6. Columna izquierda: gráficas de la información mutua <math>I_x</math> (rojo) e <math>I_p</math> (azul) vs <math>\lambda</math> con potencial atractivo para el estado simétrico <math> 000\rangle</math> (primera fila) y el estado antisimétrico <math> 001\rangle</math> (segunda fila). Columna derecha: gráficas de la información de tercer orden <math>I_x^3</math> (rojo) e <math>I_p^3</math> (azul) vs <math>\lambda</math> con potencial atractivo para el estado simétrico <math> 000\rangle</math> (primera fila) y el estado antisimétrico <math> 001\rangle</math> (segunda fila). . . . .</p>	<p>55</p>
<p>6.7. Columna izquierda: gráficas de la información mutua <math>I_x</math> (rojo) e <math>I_p</math> (azul) vs <math>\lambda</math> con potencial repulsivo para el estado simétrico <math> 000\rangle</math> (primera fila) y el estado antisimétrico <math> 001\rangle</math> (segunda fila) <math>I_x</math> (rojo) e <math>I_p</math> (azul). Columna derecha: gráficas de la información de tercer orden <math>I_x^3</math> (rojo) e <math>I_p^3</math> (azul) vs <math>\lambda</math> con potencial repulsivo para el estado simétrico <math> 000\rangle</math> (primera fila) y el estado antisimétrico <math> 001\rangle</math> (segunda fila). La línea vertical discontinua indica el valor límite de <math>\lambda</math>. . . . .</p>	<p>56</p>
<p>6.8. Izquierda: gráficas de los componentes de sinergia <math>S</math> (rojo) y de redundancia <math>R</math> (azul) de <math>I_x^3</math> contra la energía de interacción <math>E_{int}</math> para el estado <math> 001\rangle</math> potencial atractivo. Derecha: gráficas de los componentes de sinergia <math>S</math> (rojo) y de redundancia <math>R</math> (azul) de <math>I_p^3</math> contra la energía de interacción <math> E_{int} </math> para el estado <math> 001\rangle</math> potencial repulsivo. La línea vertical discontinua indica el valor límite de <math>\lambda</math>. . . . .</p>	<p>58</p>
<p>7.1. Medidas de correlación de pares vs <math>\omega</math> para el estado simétrico <math> 100\rangle</math> sin interacción en el espacio de posición. Primera fila: <math>\tau_x</math> e <math>I_x</math> vs. <math>\omega</math>. Segunda fila: (izquierda) valores propios <math>\nu_1 = 1 + 2\tau(\omega)</math> (rojo) y <math>\nu_2 = 1 - \tau(\omega)</math> (azul), (derecha) <math>Cok(x_1, x_2)</math>. . . . .</p>	<p>61</p>
<p>7.2. Medidas de correlación entre tres partículas vs <math>\omega</math> para el estado simétrico <math> 100\rangle</math> sin interacción en el espacio de posición. . . . .</p>	<p>62</p>

- 7.3. Primera fila: gráficas de contornos de la función de densidad reducida para el estado simétrico  $|100\rangle$  en espacio de posición con potencial  $\omega = 1, 5$ . Segunda fila: gráficas de contornos de la función de densidad reducida  $|100\rangle$  en espacio de momentos con potencial  $\omega = 1, 5$ . . . . . 62
- 7.4. Primera fila: gráficas de la desviación estándar  $\sigma_x$  (línea continua),  $\sigma_{x^2}$  (línea discontinua) y entropía de Shannon de una variable  $S_x$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de la desviación estándar  $\sigma_x$  (línea continua),  $\sigma_{x^2}$  (línea discontinua) y entropía de Shannon de una variable  $S_x$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . . 63
- 7.5. Izquierda: gráficas de kurtosis  $kur(x)$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Derecha: gráficas de kurtosis  $kur(x)$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Las líneas rojas corresponden al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$  mientras que las curvas azules corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . La línea vertical discontinua corresponde al valor límite del potencial repulsivo. . . . . 65
- 7.6. Primera fila: gráficas de la densidad reducida de una variable para el potencial atractivo con valores  $\lambda = 0, 1, 2, 20$ . Segunda fila: gráficas de la densidad reducida de una variable para el potencial repulsivo con valores  $\lambda = 0, 0,1, 0,3, 0,57$ . Las densidades de  $|000\rangle$  se presentan en rojo mientras que las de  $|001\rangle$  en azul.  $\omega$  se fija a uno en ambos casos. . . . . 66
- 7.7. Primera fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Las gráficas corresponden al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . . 67
- 7.8. Primera fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Las gráficas corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ .  $Cok^G(x_1, x_2) = 1 + 2\tau_x^2$  (línea de puntos roja) se muestra junto con  $Cok(x_1, x_2)$  en el caso del potencial atractivo. Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . . 68

7.9. Primera fila: gráficas de $\mu_{x^2}, I_3^N$ y $Cok(x_1, x_2, x_3)$ contra $\lambda$ para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de $\mu_{x^2}, I_3^N$ y $Cok(x_1, x_2, x_3)$ contra $\lambda$ para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado $ 000\rangle$ con $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . .	69
7.10. Primera fila: gráficas de $\mu_{x^2}, I_3^N$ y $Cok(x_1, x_2, x_3)$ contra $\lambda$ para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de $\mu_{x^2}, I_3^N$ y $Cok(x_1, x_2, x_3)$ contra $\lambda$ para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado $ 001\rangle$ con $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . .	70
7.11. Primera fila: gráficas de $\mu_{x^2}^2, I_x^3$ y $\eta_x$ contra $\lambda$ para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de $\mu_{x^2}^2, I_x^3$ y $\eta_x$ contra $\lambda$ para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado $ 000\rangle$ con $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . .	71
7.12. Primera fila: gráficas de $\mu_{x^2}^2, I_x^3$ y $\eta_x$ contra $\lambda$ para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de $\mu_{x^2}^2, I_x^3$ y $\eta_x$ contra $\lambda$ para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado $ 001\rangle$ con $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . .	72
7.13. Primera fila: gráficas de $\eta_x^r$ contra $\lambda$ para el potencial atractivo (izquierda) y el potencial repulsivo (derecha), correspondientes al estado $ 000\rangle$ con $\omega = 1$ . Segunda fila: gráficas de $\eta_x^r$ contra $\lambda$ para el atractivo potencial (izquierda) y potencial repulsivo (derecha), correspondientes al estado $ 001\rangle$ con $\omega = 1$ . Las líneas horizontales azules corresponden a $\eta_x^r = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo. . . . .	73
7.14. Gráficas del comportamiento de las medidas de correlación por pares contra la intensidad de un potencial de interacción atractivo y repulsivo en el espacio de momentos, para el estado $ 001\rangle$ (primera, tercera filas) y el estado $ 000\rangle$ (segunda, cuarta filas). La línea discontinua magenta corresponde al valor límite del potencial repulsivo, mientras que la línea discontinua negra ( $\lambda = 0,5$ ) corresponde al punto de transición en el coeficiente de correlación. . . . .	74
7.15. Gráficas del comportamiento de las medidas de correlación de tercer orden contra la intensidad para un potencial de interacción atractivo y repulsivo en el espacio de momentos, para el estado $ 001\rangle$ (primera, tercera filas) y el estado $ 000\rangle$ (segunda, cuarta filas). La línea vertical discontinua corresponde al valor límite del potencial repulsivo. . . . .	75
7.16. Gráficas de contorno de la función de densidad de pares para el estado $ 011\rangle$ con potencial atractivo $\lambda = 0, 10$ (izquierda-derecha), en el espacio de posición (fila superior) y en el espacio de momentos (fila inferior). . . . .	76

- 7.17. Gráficas de  $g_x(x_1)$  frente a  $x_1$  y  $x \cdot \rho(x)$  frente a  $x$  para el estado  $|011\rangle$  (rojo, filas superiores). Gráficos de  $g_p(p_1)$  vs  $p_1$  y  $p \cdot \pi(p)$  vs  $p$  para el estado 100 (azul, filas inferiores). Primera columna ( $\lambda = 1$ ), segunda columna ( $\lambda = 1,63$ ), tercera columna ( $\lambda = 2$ ). . . . . 77
- 7.18. Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|011\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea vertical discontinua muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación. . . . . 79
- 7.19. Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|011\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea discontinua magenta indica el valor límite de  $\lambda$ , mientras que la línea discontinua negra muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación. . . . . 81
- 7.20. Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|100\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea vertical discontinua muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación. . . . . 83
- 7.21. Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|100\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea discontinua magenta indica el valor límite de  $\lambda$ , mientras que la línea discontinua negra muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación. . . . . 84
- 7.22. Gráficas que muestran el comportamiento de las medidas de correlación de tercer orden en función de la intensidad del potencial de interacción atractivo en espacio de posición (rojo) y en espacio de momentos (azul). La primera y tercera fila corresponden al estado  $|011\rangle$  mientras que la segunda y cuarta fila al estado  $|100\rangle$ . . . . . 85

<p>7.23. Gráficas que muestran el comportamiento de las medidas de correlación de tercer orden en función de la intensidad del potencial de interacción repulsivo en espacio de posición (rojo) y en espacio de momentos (azul). La primera y tercera fila corresponden al estado <math> 011\rangle</math> mientras que la segunda y cuarta fila al estado <math> 100\rangle</math>. La línea vertical discontinua indica el valor límite de <math>\lambda</math>. . . . .</p>	87
<p>7.24. Gráficas que muestran el comportamiento de las medidas de orden superior basadas en la cokurtosis contra la intensidad del potencial de interacción atractivo o repulsivo en espacio de posición y en espacio de momentos para el estado <math> 011\rangle</math> (primera (<math>x</math>) y tercera (<math>p</math>) filas) y el estado <math> 100\rangle</math> (segunda (<math>x</math>) y cuarta (<math>p</math>) filas). Los dos valores propios distintos de cero más pequeños de la matriz de cokurtosis se presentan en la cuarta columna con <math>2Cok(\lambda)</math> (rojo) y <math>kur(\lambda) - Cok(\lambda)</math>(azul). La línea vertical discontinua indica el valor límite de <math>\lambda</math>. . . . .</p>	88
<p>8.1. Primera fila: gráficas de las entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y <math>TCRE</math>, <math>JCRE</math> y <math>CRE</math> (líneas discontinuas) en el espacio de posición contra <math>\omega</math>. Segunda fila: gráficas de <math>I_3^x, I_x</math> y <math>I_x^3</math> (líneas continuas) y <math>TcCCRE</math>, <math>CCRE</math> y <math>TCCRE</math> (líneas discontinuas) en el espacio de posición contra <math>\omega</math>. Las líneas discontinuas (verde) son <math>0,2 * TcCCRE/CCRE</math>, <math>CCRE/CRE</math> y <math>0,3 * TCCRE/CCRE</math> respectivamente. Función de onda antisimétrica estado <math> 012\rangle</math>. . . . .</p>	92
<p>8.2. Primera fila: gráficas de entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y <math>TCRE</math>, <math>JCRE</math> y <math>CRE</math> (líneas discontinuas) en el espacio de momentos contra <math>\omega</math>. Segunda fila: gráficas de <math>I_3^p, I_p</math> e <math>I_p^3</math> (líneas continuas) y <math>TcCCRE</math>, <math>CCRE</math> y <math>TCCRE</math> (líneas discontinuas) en el espacio de momentos contra <math>\omega</math>. Las líneas discontinuas (verde) son <math>0,2 * TcCCRE/CCRE</math>, <math>CCRE/CRE</math> y <math>0,3 * TCCRE/CCRE</math> respectivamente. Función de onda antisimétrica estado <math> 012\rangle</math>. . . . .</p>	93
<p>8.3. Gráficas de <math>JCRE</math>, <math>CCRE</math> (línea continua) y <math>mJCRE</math>, <math>mCCRE</math> (línea discontinua) contra el potencial <math>\omega</math>. Función de onda antisimétrica estado <math> 012\rangle</math>, espacio de posición (rojo) y espacio de momentos (azul). . . . .</p>	94
<p>8.4. Gráficas de las entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y <math>TCRE</math>, <math>JCRE</math> y <math>CRE</math> (líneas discontinuas) contra el potencial <math>\lambda</math>. En espacio de posición para el estado <math> 000\rangle</math> con potencial atractivo y <math>\omega = 1,0</math>. . . . .</p>	95

- 8.5. Gráficas de las densidades principales reducidas a una variable y las densidades acumulativas de supervivencia en espacio de posición (columna izquierda) y en espacio de momentos (columna derecha) para potenciales atractivos  $\lambda = 0,1$  (azul),  $\lambda = 2$  (rojo) y  $\lambda = 5$  (verde) en el estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1,0$ . . . . . 96
- 8.6. Gráficas de  $I_3^x$ ,  $I_x$  e  $I_x^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de posición para el estado  $|000\rangle$  con potencial atractivo y  $\omega = 1,0$ . . . . . 96
- 8.7. Primera fila: gráficas de entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y  $TCRE$ ,  $JCRE$  y  $CRE$  (líneas discontinuas) en espacio de momentos contra  $\lambda$ . Segunda fila: gráficas de  $I_3^p$ ,  $I_p$  e  $I_p^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) en espacio de momentos contra  $\lambda$ . Todas las gráficas corresponden a la función de onda simétrica del estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1,0$ . . . . . 97
- 8.8. Primera y segunda fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial atractivo  $\lambda$ . Tercera y cuarta fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial repulsivo  $\lambda$ . Función de onda simétrica estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1,0$ , espacio de posición (rojo) y espacio de momentos (azul). . . . . 99
- 8.9. Gráficas de  $I_3^x$ ,  $I_x$  e  $I_x^3$  (línea continua) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de posición para el estado  $|001\rangle$  con potencial atractivo y  $\omega = 1,0$ . . . . . 100
- 8.10. Gráficas del coeficiente de correlación  $\tau$  contra el potencial  $\lambda$  para el estado  $|001\rangle$ . Con potencial atractivo en el espacio de posición (izquierda) y potencial repulsivo en el espacio de momentos (derecha) con  $\omega = 1,0$ . La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ . . . . . 101
- 8.11. Gráficas de  $I_3^p$ ,  $I_p$  e  $I_p^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de momentos para el estado  $|001\rangle$  con potencial repulsivo y  $\omega = 1,0$ . La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ . . . . . 101
- 8.12. Primera y segunda fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial atractivo  $\lambda$ . Tercera y cuarta fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial repulsivo  $\lambda$ . Función de onda antisimétrica estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1,0$ , espacio de posición (rojo) y espacio de momentos (azul). La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ . . . . . 103

8.13. Gráficas de las sumas entrópicas de Shannon (líneas continuas) para una variable ( $S_T^1$ ), dos variables ( $S_T^2$ ) y tres variables ( $S_T^3$ ), junto con las correspondientes sumas entrópicas acumulativas (líneas discontinuas), ( $CRE_T$ ,  $JCRE_T$  y  $TCRE_T$ ) contra el potencial armónico  $\omega$ . Para tres osciladores no interactuantes en el estado antisimétrico  $|012\rangle$ . . . . . 104

8.14. Gráficas de las sumas entrópicas de Shannon (líneas continuas) para una variable ( $S_T^1$ ), dos variables ( $S_T^2$ ) y tres variables ( $S_T^3$ ), junto con las correspondientes sumas entrópicas acumulativas (líneas discontinuas), ( $CRE_T$ ,  $JCRE_T$  y  $TCRE_T$ ) contra el potencial de interacción  $\lambda$ . Para tres osciladores interactuantes en el estado antisimétrico  $|001\rangle$ . La primera fila corresponde a medidas en presencia de potenciales atractivos mientras que la segunda fila corresponde a potenciales repulsivos. La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ . . . . . 105

8.15. Gráfica de la suma entrópica de Shannon  $S_T^1$  (línea roja) y suma entrópica acumulativa  $CRE_T$  (línea azul) para un oscilador armónico en el estado fundamental contra el potencial  $\omega$ . . . . . 106

9.1. Gráficas de parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos (azul) positivo y (rojo) negativo con  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potenciales de pares atractivos). . . . . 109

9.2. Gráficas de  $E'/E$  contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos  $\kappa_{\pm}$  (azul) positivo y (rojo) negativo con  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potenciales de pares atractivos). . . . . 110

9.3. Gráficas de las entropías de Shannon para una, dos y tres partículas en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo) contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos positivo (primera fila) y negativo (tercera fila). Las sumas entrópicas correspondientes se presentan debajo de cada par de componentes.  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial de pares atractivo). . . 111

9.4. Gráficas de las entropías de Shannon para una, dos y tres partículas en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo) contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos positivo (primera fila) y negativo (tercera fila). Las sumas entrópicas correspondientes se presentan debajo de cada par de componentes.  $\omega = \alpha = 1$  y  $\lambda = 0,4$  (potencial de pares repulsivo). 112

9.5. Gráficas de las densidades de probabilidad de una variable  $\rho(x)$  en el espacio de posición (azul) y  $\pi(p)$  en el espacio de momentos (rojo) para diferentes valores del parámetro  $\kappa = 1$  (primera columna),  $\kappa = 5$  (segunda columna) y  $\kappa = 10$  (tercera columna). Las primeras dos filas corresponden a  $\kappa_+$  y las últimas dos a  $\kappa_-$ .  $\omega = \alpha = 1$  con  $\lambda = 0,4$  (potencial de pares repulsivo). . . 114

- 9.6. Gráficas de la información mutua (columna izquierda) y de la información de orden alto (columna derecha), espacio de posición (azul) y espacio de momentos (rojo) como función del parámetro  $\kappa_{\pm}$ . Para un valor positivo (fila superior) y un valor negativo (fila inferior).  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial de pares atractivo). . . . . 115
- 9.7. Gráficas de la información mutua (columna izquierda) y de la información de orden alto (columna derecha), espacio de posición (azul) y espacio de momentos (rojo) como función del parámetro  $\kappa_{\pm}$ . Para un valor positivo (fila superior) y un valor negativo (fila inferior).  $\omega = \alpha = 1$  y  $\lambda = 0,4$  (potencial de pares repulsivo). . . . . 116
- 9.8. Gráficas de las componentes sinérgica ( $S$ ) y redundante ( $R$ ) de la información de orden alto en el espacio de posición (columna izquierda) y en el espacio de momentos (columna derecha) como función del parámetro  $\kappa_{\pm}$ . Caso positivo (fila superior) y caso negativo (fila inferior).  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial de pares atractivo). . . . . 117
- 9.9. Gráficas de las entropías de Shannon para una, dos y tres partículas (primera fila) contra el parámetro  $\kappa_+$  en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo). Para  $\alpha = 0,1$  (línea continua),  $\alpha = 1,0$  (línea punteada) y  $\alpha = 5,0$  (línea discontinua). La segunda fila muestra las sumas entrópicas correspondientes.  $\omega = \lambda = 1$  (potencial de pares atractivo). . . . . 118
- 9.10. Gráficas de la información mutua (primera fila) y la información de alto orden (segunda fila) como función del parámetro  $\kappa_+$  en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo). Para  $\alpha = 0,1$  (línea continua),  $\alpha = 1,0$  (línea punteada) y  $\alpha = 5,0$  (línea discontinua).  $\omega = \lambda = 1$  (potencial de pares atractivo). . . . . 119
- 9.11. Gráficas de los parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  contra el parámetro  $\kappa_+$ . Para potencial de pares positivo (azul) con  $\omega = \lambda = 1$  y potencial de pares negativo (rojo) con  $\omega = 1$  y  $\lambda = 0,5$ . . . . . 120
- 9.12. Gráficas de los parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  contra el parámetro  $\kappa_+$ . Para potenciales de tres cuerpos positivo (azul) y negativo (rojo). Se establece que  $\kappa_-$  con  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial atractivo de pares) y  $\kappa_+$  con  $\omega = \alpha = 1$  y  $\lambda = 0,01$  (potencial repulsivo de pares). El valor límite de  $\lambda' = 1/\sqrt{3}$  para  $\kappa_+$  se muestra como una línea discontinua horizontal. . . . . 121

A1.	Gráficas de contornos de la función de densidad reducida estado $ 000\rangle$ con potencial atractivo y $\omega = 1$ . Primera fila: espacio de posición $\Gamma(x_1, x_2)$ con potencial $\lambda = 0, 1, 5$ y excentricidad $\epsilon = 0, 0,22, 0,52$ de izquierda a derecha. Segunda fila: espacio de momentos $\Pi(p_1, p_2)$ con potencial $\lambda = 0, 1, 5$ y excentricidad $\epsilon = 0, 0,22, 0,52$ de izquierda a derecha. El color rojo indica una región de mayor densidad y el color verde una región de menor densidad.	128
A2.	Gráficas de contornos de la función de densidad reducida estado $ 000\rangle$ con potencial repulsivo y $\omega = 1$ . Primera fila: espacio de posición $\Gamma(x_1, x_2)$ con potencial $\lambda = 0, 0,4, 0,57$ y excentricidad $\epsilon = 0, 0,06, 0,11$ de izquierda a derecha. Segunda fila: espacio de momentos $\Pi(p_1, p_2)$ con potencial $\lambda = 0, 0,4, 0,57$ y excentricidad $\epsilon = 0, 0,06, 0,11$ de izquierda a derecha. El color rojo indica una región de mayor densidad y el color verde una región de menor densidad.	129
B1.	Gráficas del coeficiente de correlación y valores propios $1 + \tau$ (rojo) y $1 - \tau$ (azul) estado $ 01\rangle$ . Primera fila espacio de posición y segunda fila espacio de momentos. Línea vertical magenta valor límite de $\lambda_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .	132
B2.	Gráficas de contorno de la función de densidad de pares estado $ 01\rangle$ . Espacio de posición $\lambda_+ = 0, 10$ (primera fila de izquierda a derecha). Espacio de momentos $\lambda_- = 0, 0,7$ (segunda fila de izquierda a derecha).	133
B3.	Gráficas del coeficiente de correlación y valores propios $1 + \tau$ (rojo) y $1 - \tau$ (azul) estado $ 10\rangle$ . Primera fila espacio de momentos y segunda fila espacio de posición. Línea vertical magenta valor límite de $\lambda_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .	134
B4.	Gráficas de contorno de la función de densidad de pares estado $ 10\rangle$ . Espacio de momentos $\lambda_+ = 0, 10$ (primera fila de izquierda a derecha). Espacio de posición $\lambda_- = 0, 0,7$ (segunda fila de izquierda a derecha).	135
C1.	Primera fila: gráficas de la función de Wigner $W(x, p)$ . Segunda fila: gráficas de la función de Husimi $H(x, p)$ . En ambos casos con $\omega = 1$ y valores de $n = 1, 5$ (de izquierda a derecha).	142
C2.	Primera fila: gráficas de las marginales $\rho(x)$ para la función de Wigner. Segunda fila: gráficas de las marginales $h(x)$ para la función de Husimi. En espacio de posición con $\omega = 1$ , para diferentes valores de $n = 1, 5, 10$ (de izquierda a derecha).	143
C3.	Primera fila: gráficas de funciones survival $su_x^W(a)$ para la función de Wigner. Segunda fila: gráficas de funciones survival $su_x^H(a)$ para la función de Husimi. En espacio de posición con $\omega = 1$ , para diferentes valores de $n = 1, 5, 10$ (de izquierda a derecha).	143

- C4. Primera fila: gráficas de funciones survival  $su_x^W(a, a)$  para la función de Wigner. Segunda fila: gráficas de funciones survival  $su_x^H(a, a)$  para la función de Husimi. En espacio de posición con  $\omega = 1$ , para diferentes valores de  $n = 1, 5, 10$  (de izquierda a derecha). . . . . 144
- C5. Izquierda: gráficas del valor absoluto de la entropía de Wigner  $|S_W|$  (rojo), parte real de la entropía de Wigner  $\text{Re}[S_W]$  (verde) y la entropía de Husimi  $S_H$  (azul). Centro: gráficas del valor absoluto de la entropía residual acumulativa conjunta de Wigner  $|JCRE_W^x|$  (rojo), parte real de la entropía residual acumulativa conjunta de Wigner  $\text{Re}[JCRE_W^x]$  (verde) y la entropía residual acumulativa conjunta de Husimi  $JCRE_H^x$  (azul). Derecha: gráficas de la entropía residual acumulativa conjunta modificada de Wigner  $mJCRE_W^x$  (rojo) y la entropía residual acumulativa conjunta modificada de Husimi  $mJCRE_H^x$  (azul). . . . . 145
- C6. Izquierda: gráficas del valor absoluto de la información de Wigner  $|I_W^{xp}|$  (rojo), parte real de la información de Wigner  $\text{Re}[I_W^{xp}]$  (verde) y la información de Husimi  $I_H^{xp}$  (azul). Centro: gráficas del valor absoluto de la entropía residual acumulativa cruzada de Wigner  $|CCRE_W^x|$  (rojo), parte real de la entropía residual acumulativa cruzada de Wigner  $\text{Re}[CCRE_W^x]$  (verde) y la entropía residual acumulativa cruzada de Husimi  $CCRE_H^x$  (azul). Derecha: gráficas de la entropía residual acumulativa cruzada modificada de Wigner  $mCCRE_W^x$  (rojo) y la entropía residual acumulativa cruzada modificada de Husimi  $mCCRE_H^x$  (azul). . . . . 145
- C7. Primera fila: gráficas de la parte imaginaria de la entropía de Wigner  $\text{Im}[S_W]$  y de la parte imaginaria de la entropía residual acumulativa conjunta  $\text{Im}[JCRE_W]$ . Segunda fila: gráficas de la parte imaginaria de la información mutua de Wigner  $\text{Im}[I_W^{xp}]$  y de la parte imaginaria de la entropía residual acumulativa cruzada  $\text{Im}[CCRE_W]$ . . . . . 146
- C8. Gráficas de las entropías reducidas de Wigner  $S_W^x$  y de Husimi  $S_H^x$  (rojo). Gráficas de las entropías residuales acumulativas de Wigner  $CRE_W^x$  y de Husimi  $CRE_H^x$  (azul). . . . . 147

# Índice de cuadros

7.1. Tabla comparativa para los valores de $\lambda$ donde ocurren los puntos de máximos (max) y mínimos (min) en $\eta^r$ , y los valores donde están presentes los cruces de los valores propios de las matrices $\nu$ y $\mu$ para los estados $ 011\rangle$ y $ 100\rangle$ . . . . .	89
---	----

# Nomenclatura

$Cok(x_1, x_2)$	Cokurtosis de dos variables.
$Cok^G(x_1, x_2)$	Cokurtosis para una distribución Gaussiana de dos variables.
$Cok(x_1, x_2, x_3)$	Cokurtosis de tres variables.
$\tau(x_1, x_2), \tau_x$	Coefficiente de correlación.
$\tau_{x^2}$	Coefficiente de correlación en términos de la covarianza generalizada.
$M, N$	Constantes de normalización.
$\hbar$	Constante de Planck.
$x_i, p_i$	Coordenadas canónicas (espacio de posición y espacio de momentos).
$Q, q_i$	Coordenadas de Jacobi (centro de masa y relativas en espacio de momentos).
$R, r_i$	Coordenadas de Jacobi (centro de masa y relativas en espacio de posición).
$Cov(x_1, x_2)$	Covarianza.
$Cov(x_1^2, x_2^2)$	Covarianza generalizada.
$kur(x)$	Kurtosis.
$ \phi(p) ^2, \pi(p)$	Densidad de probabilidad de una variable en espacio de momentos.
$ \psi(x) ^2, \rho(x)$	Densidad de probabilidad de una variable en espacio de posición.
$cu_x(a)$	Densidad acumulativa.
$su_x(a)$	Densidad acumulativa residual o de supervivencia.
$\sigma_x, \sigma_p$	Desviación estándar en espacio de posición y en espacio de momentos.
$\det[\cdot]$	Determinante.
$KL$	Distancia de Kullback-Leibler.
$\Pi(p_1, p_2)$	Distribución de dos variables o marginal en espacio de momentos.
$\Gamma(x_1, x_2)$	Distribución de dos variables o marginal en espacio de posición.

$ \Phi(p_1, p_2, p_3) ^2$	Distribución de tres variables en espacio de momentos.
$ \Psi(x_1, x_2, x_3) ^2$	Distribución de tres variables en espacio de posición.
$cu_x(a, b)$	Distribución de probabilidad acumulativa conjunta.
$su_x(a, b)$	Distribución de probabilidad acumulativa residual conjunta.
$G(x \mu, M_{Cov})$	Distribución Gaussiana multivariada.
$\hat{E}, E$	Energía.
$E_{corr}$	Energía de correlación.
$E'$	Energía del Hamiltoniano efectivo.
$S(x_1 x_2)$	Entropía condicional de Shannon.
$S_\pi$	Entropía de Shannon de una variable en espacio de momentos.
$S_\rho$	Entropía de Shannon de una variable en espacio de posición.
$S_{\Pi}$	Entropía de Shannon de dos variables en espacio de momentos.
$S_{\Gamma}$	Entropía de Shannon de dos variables en espacio de posición.
$S_{\Phi}$	Entropía de Shannon de tres variables en espacio de momentos.
$S_{\Psi}$	Entropía de Shannon de tres variables en espacio de posición.
$CRE, \epsilon_a$	Entropía residual acumulativa.
$JCRE$	Entropía residual acumulativa conjunta.
$mJCRE$	Entropía residual acumulativa conjunta modificada.
$CCRE$	Entropía residual acumulativa cruzada.
$mCCRE$	Entropía residual acumulativa cruzada modificada.
$\epsilon_{ab}$	Entropía residual acumulativa de pares.
$TCRE$	Entropía residual acumulativa de tres variables.
$TcCCRE$	Correlación acumulativa total en términos de densidades acumulativas.
$TCCRE$	Correlación acumulativa de tercer orden en términos de densidades acumulativas.
$S_H$	Entropía de Husimi.
$S_W$	Entropía de Wigner.
$ \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle,$	Espín.
$ \pm, \pm, \pm\rangle$	
$\epsilon$	Excentricidad.
$P(x_i, x_j)$	Función de distribución conjunta.
$H(x, p)$	Función de Husimi.
$H_n(x, p)$	Función de Husimi para $n$ -estados excitados.
$\phi(p)$	Función de onda en espacio de momentos.
$\psi(x)$	Función de onda en espacio de posición.
$\Phi(p_1, p_2, p_3)$	Función de onda de tres variables en espacio de momentos.
$\Psi(x_1, x_2, x_3)$	Función de onda de tres variables en espacio de posición.

$ n_1, n_2, n_3\rangle$	Función de onda en términos del número cuántico $n_i$ .
$W(x, p)$	Función de Wigner.
$W_n(x, p)$	Función de Wigner para $n$ -estados excitados.
$\hat{H}, H$	Hamiltoniano.
$H_e$	Hamiltoniano efectivo en coordenadas canónicas.
$I(x_1, x_2), I_x$	Información mutua.
$I_x^N$	Información mutua normalizada.
$I_3(x_1, x_2, x_3), I_3^x$	Información de correlación total.
$I_3^N$	Información de correlación total normalizada.
$I_3^3(x_1, x_2, x_3), I_x^3$	Información mutua de tercer orden.
$I_H^{xp}$	Información mutua de la función de Husimi.
$I_W^{xp}$	Información mutua de la función de Wigner.
$m$	Masa.
$M_c$	Matriz de cokurtosis.
$M_\tau$	Matriz de correlación.
$M_{Cov}$	Matriz de covarianza.
$\rho(x, x')$	Matriz de densidad.
$M^{-1}$	Matriz inversa.
$M^T$	Matriz transpuesta.
$\mu$	Media.
$H_n(z)$	$n$ -ésimo polinomio de Hermite.
$L_n(z)$	$n$ -ésimo polinomio de Laguerre.
$\mu_{x^2}$	Nueva medida relacionada con la información de correlación total en términos de momentos de orden superior.
$\mu_{x^2}^2$	Nueva medida relacionada con la información mutua de tercer orden en términos de momentos de orden superior.
$\eta_x$	Nueva medida basada en la diferencia de la cokurtosis de dos y tres variables.
$\eta_x^r$	Nueva medida basada en el cociente entre la cokurtosis de tres y dos variables.
$n_i$	Número cuántico principal.
$\hat{A}$	Operador.
$\alpha$	Parámetro relacionado con el ancho del potencial de tres cuerpos.
$\alpha_j, \frac{1}{\alpha_j}$	Parámetros de potencial de interacción en espacio de posición y espacio de momentos.
$\omega_+, \omega_-$	Parámetros de potencial central atractivo y repulsivo.
$\lambda_+, \lambda_-$	Parámetros de potencial de pares atractivo y repulsivo.
$\kappa_+, \kappa_-$	Parámetros de potencial de tres cuerpos atractivo y repulsivo.

$\{a, b, c\},$ $\{\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}\}$	Parámetros variacionales no lineales en espacio de posición y espacio de momentos.
$\hat{V}, V$	Potencial.
$V_T$	Potencial definido como la suma del término armónico de un cuerpo, dos cuerpos y de tres cuerpos.
$\lambda', \omega'$	Potenciales efectivos.
$p_i$	Probabilidad del $i$ -ésimo evento.
$P(x_i x_j)$	Probabilidad condicional.
$CRE_T, JCRE_T,$ $TCRE_T$	Sumas de las medidas acumulativas.
$S_T^D$	Suma entrópica.
$K_3$	Tercer cumulante conjunto.
$\langle \cdot \rangle, E[\cdot]$	Valor esperado.
$E[S(x_1 x_2)]$	Valor esperado de la entropía condicional.
$E[S(x_3 x_1x_2)]$	Valor esperado de la entropía condicional de tres variables.
$E[\epsilon(b x_1)]$	Valor esperado de la entropía residual acumulativa.
$E[\epsilon(c x_1x_2)]$	Valor esperado de la entropía residual acumulativa de tres variables.
$\nu_i, \mu_i, \lambda_i$	Valores propios.
$X, Y$	Variaciones aleatorias continuas.
$\sigma_x^2, \sigma_p^2$	Varianza en espacio de posición y en espacio de momentos.
$e_i, f_i, u_i$	Vectores propios.
$\mathbf{u}, \mathbf{x}$	Vectores.
$\mathbf{x}^T$	Vector transpuesto.

# Lista de artículos

Saúl J.C. Salazar and Robin P. Sagar. Numerical transforms from position to momentum space via Gaussian quadrature in the complex plane. *Comput. Theor. Chem.* 2017, 1113, 24-31, doi: 10.1016/j.comptc.2017.05.003

Saúl J.C. Salazar and Robin P. Sagar. Numerical calculation of the Spherical Bessel Transform from Gaussian quadrature in the complex-plane. *Comput. Theor. Chem.* 2018, 1143, 43-51, doi: 10.1016/j.comptc.2018.09.007

Humberto G. Laguna, Saúl J.C. Salazar and Robin P. Sagar. Entropic Kullback-Leibler type distance measures for quantum distributions. *Int. J. Quantum Chem.* 2019, 119:e25984, doi: 10.1002/qua.25984

Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna, V. Prasad and Robin P. Sagar. Shannon-information entropy sum in the confined hydrogenic atom. *Int. J. Quantum Chem.* 2020, 120:e26188, doi: 10.1002/qua.26188

**Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna and Robin P. Sagar. Higher-order statistical correlations in three-particle quantum systems with harmonic interactions. *Phys. Rev. A.* 2020, 101, 4:042105, doi: 10.1103/PhysRevA.101.042105**

**Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna and Robin P. Sagar. Higher-Order Information Measures from Cumulative Densities in Continuous Variable Quantum Systems. *Quantum Rep.* 2020, 2, 560-578, doi: 10.3390/quantum2040039**

**Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna and Robin P. Sagar. Statistical correlations in quantum systems with explicit three-body interactions. *Eur. Phys. J. D.* 2020, 74, 241, doi: 10.1140/epjd/e202010435-6**

**Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna and Robin P. Sagar. Statistical Correlation Measures From Higher-Order Moments in Quantum Oscillator Systems. *Adv. Theory Simul.* 2021, 4:2000322, doi: 10.1002/adts.202000322**

Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna, B. Dahiya, V. Prasad and Robin P. Sagar. Shannon information entropy sum of the confined hydrogenic atom under the influence of an electric field. *Eur. Phys. J. D.* 2021, 75, 127, doi: 10.1140/epjd/s10053-021-00143-2

**Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna and Robin P. Sagar. Pairwise and higher-order statistical correlations in excited states of quantum oscillator systems. *Eur. Phys. J. Plus.* 2022 137, 19, doi: 10.1140/epjp/s13360-021-02215-z**

# Introducción

La interacción entre partículas y sus efectos es un tema de interés tanto en la química cuántica como en otras áreas de la ciencia donde se estudian interacciones entre distintos cuerpos u objetos. Por lo que la relevancia en estudiar este tema radica en la existencia de diversos fenómenos que se manifiestan como resultado del efecto no aditivo de la interacción entre partículas, dicha situación la encontramos en fenómenos colectivos de sistemas complejos tales como los efectos cooperativos.

Como una aproximación al estudio de sistemas con muchos cuerpos podemos considerar el caso de un sistema de tres partículas interactuantes. En este trabajo estudiamos sistemas cuánticos de tres partículas (variables continuas) donde el objeto matemático de interés es la función de onda la cual contiene toda la información del sistema físico. Usamos la densidad para construir una función de densidad de probabilidad asociada con los observables del sistema, por medio de la densidad obtenemos las correlaciones que vienen de la interacción entre partículas.

En particular examinamos osciladores acoplados [1, 2] ya que son de los pocos modelos con soluciones analíticas donde la interacción entre sus partículas es de tipo armónica. La trascendencia del modelo se debe a que el oscilador armónico es uno de los potenciales más importantes en mecánica cuántica, además, este tiene aplicaciones en química cuántica para modelar interacciones entre dos o tres partículas [3, 4, 5, 6, 7]. Así tenemos que los sistemas de partículas interactuantes atrapadas en pozos de potencial (clústeres atómicos o puntos cuánticos) están descritos en forma teórica como sistemas confinados armónicamente con parámetros de control ajustables [8]. Estos sistemas se consideran candidatos prometedores para la construcción de computadoras cuánticas. Lo anterior muestra la importancia de estudiar la información cuántica que poseen los sistemas sometidos a potenciales armónicos.

Además debido a la naturaleza del problema mecánico cuántico las variables posición y momento están correlacionadas [9]. Por lo que el estudio de las correlaciones estadísticas entre partículas en el espacio de posición, en el espacio de momentos y la correlación entre sus posiciones y momentos en espacio fase es fundamental.

Las herramientas matemáticas que se utilizan en la estadística son la primera apro-

ximación natural para intentar resolver el problema de medir correlación estadística en sistemas cuánticos [10]. Sin embargo, la teoría de la información [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] en principio ha probado ser una herramienta útil para abordar problemas relacionados con la medición de la incertidumbre de variables y propiedades en sistemas cuánticos [18, 19, 20, 21]. Examinar la densidad del sistema utilizando medidas estadísticas e informacionales nos permite interpretar los fenómenos de interacción relacionados con la localización y la correlación entre variables y partículas [22, 23, 24, 25]. En este sentido las interacciones son estudiadas usando medidas de correlación a través del cambio en las intensidades de los potenciales de un cuerpo y de dos cuerpos atractivos o repulsivos. Por otro lado también consideramos analizar como influye el tipo de simetría de la función de onda en diferentes estados.

La existencia de varias formulaciones matemáticas para abordar el problema de medir las interacciones entre partículas hace imprescindible plantear la pregunta de ¿cuál es la mejor manera de medir correlaciones? Así cuando hablamos de correlación la primera aproximación es entre pares de partículas o variables, pero existen correlaciones de órdenes superiores. Por lo que otras preguntas son ¿cómo medir correlaciones de orden superior en sistemas cuánticos? y ¿cuáles son los efectos de estas correlaciones en el comportamiento de los sistemas cuánticos? Además cuando se tiene un gran número de partículas interactuando se incorpora una mayor complejidad al problema, entonces resulta otra pregunta de sí ¿es factible e inmediata la construcción de medidas para estudiar sistemas complejos?

En la literatura han sido exploradas nuevas medidas [26, 27] que permiten capturar efectos de orden superior debidas a interacciones entre partículas por su potencial aplicación en experimentos de sistemas cuánticos con varios cuerpos [28, 29, 30].

La teoría de la información proporciona diversas medidas informacionales que son sensibles a la correlación estadística de los sistemas. Sin embargo, en este trabajo estudiamos y contrastamos medidas estadísticas como el coeficiente de correlación, y proponemos la construcción de nuevas medidas basadas en momentos de orden alto. Dichas medidas son comparadas con sus respectivos equivalentes de la teoría de la información. En esta misma línea de investigación examinamos medidas relacionadas con la información mutua y la correlación total donde extendemos su estudio a nuevas formulaciones de orden superior como es el caso de la correlación de tercer orden.

Asimismo, con referencia a lo anterior proponemos nuevas definiciones de medidas basadas en densidades acumulativas que son capaces de captar las correlaciones de orden superior.

En otra aplicación particular de las medidas basadas en densidades acumulativas hacemos un estudio informacional de las funciones en espacio fase de Wigner y de Husimi para un oscilador armónico cuántico.

También se estudiarán las diferencias en los patrones de correlación cuando hay un

potencial de interacción de dos cuerpos y cuando hay un potencial de interacción de tres cuerpos en el modelo de tres osciladores acoplados (partículas interactuantes).

# Capítulo 1

## Antecedentes

### 1.1. La ecuación de Schrödinger

Existen diferentes formulaciones de la mecánica cuántica tales como la de Schrödinger, Heisenberg, Wigner y Feynman que corresponden a esquemas lógicamente independientes de cuantización [31]. Sin embargo, en este trabajo empleamos la formulación basada en la función de onda para describir los sistemas cuánticos y sus interacciones. En este sentido resumimos las definiciones y consideraciones más relevantes de la mecánica cuántica de operadores en espacios de Hilbert.

- Un sistema físico se describe mediante un espacio de Hilbert o espacio de estados (vectores unitarios).
- El espacio de Hilbert para los estados de posición y momento está constituido por funciones de onda de  $N$ - variables  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  de cuadrado integrable  $L^2(\mathbb{R}^N)$

$$\int \Psi^*(x_1, \dots, x_N) \Psi(x_1, \dots, x_N) dx_1 \cdots dx_N < \infty, \quad (1.1)$$

tal que la integral existe y es finita.

- En mecánica cuántica la cantidad fundamental es la función de onda donde su módulo al cuadrado define la densidad de probabilidad

$$\rho(x_1, \dots, x_N) = \Psi^*(x_1, \dots, x_N) \Psi(x_1, \dots, x_N) = |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2, \quad (1.2)$$

por lo que la información se puede extraer de la función de onda a través de la densidad de probabilidad [32].

- La densidad de probabilidad es una función no negativa y que integra a la unidad

$$\rho(x_1, \dots, x_N) \geq 0, \quad \int \rho(x_1, \dots, x_N) dx_1 \cdots dx_N = 1. \quad (1.3)$$

- Las propiedades del sistema que se pueden medir se denominan observables (posición, momento, energía, entre otros) y se describen mediante operadores autoadjuntos  $\hat{A}$  en el espacio de Hilbert.
- El valor esperado del operador  $\hat{A}$  se define como

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^*(x_1, \dots, x_N) \hat{A} \Psi(x_1, \dots, x_N) dx_1 \cdots dx_N. \quad (1.4)$$

La ecuación de onda de Schrödinger describe el comportamiento estadístico de las partículas en algún sistema

$$\hat{H}\Psi(x_1, \dots, x_N) = \hat{E}\Psi(x_1, \dots, x_N), \quad (1.5)$$

donde se definen los operadores de energía y el Hamiltoniano

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (1.6)$$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \right) + \hat{V}(x_1, \dots, x_N), \quad (1.7)$$

en términos de las variables de posición  $x_i$  y momentos  $p_i$ . Además, dichos operadores actúan sobre las correspondientes funciones de onda  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ . Es así como nos restringimos al estudio de la ecuación estacionaria y no relativista de Schrödinger para  $N$ -partículas idénticas

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \Psi(x_1, \dots, x_N) + V(x_1, \dots, x_N) \Psi(x_1, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, \dots, x_N). \quad (1.8)$$

Una vez que se define el modelo físico a estudiar éste queda especificado a través de la ecuación de Schrödinger mediante la selección de la función de energía potencial que depende de la posición de las partículas

$$V(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N V_1(x_i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V_2(x_i, x_j) + \cdots, \quad (1.9)$$

donde usualmente se considera hasta la interacción de dos cuerpos. El primer término del potencial es el que experimenta cada partícula y el segundo término del potencial es el que experimentan los pares de partículas. Usando esta forma funcional del potencial es posible estudiar los efectos de alto orden a través de un Hamiltoniano de dos cuerpos, es decir, se pueden estudiar correlaciones de órdenes más altos. Los efectos de potenciales de tres o más cuerpos se pueden analizar como potenciales efectivos de uno y dos cuerpos.

Cuando los potenciales de dos cuerpos son armónicos la ecuación de Schrödinger es separable y tiene solución analítica. En este caso la ecuación de Schrödinger se puede resolver por lo que se obtienen las correspondientes funciones propias  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ , esto significa que la función propia  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  cumple con la ecuación de valores propios (1.5).

Las dos representaciones más importantes de la mecánica cuántica son las coordenadas en espacio de posición  $(x_1, \dots, x_N)$  y las coordenadas en espacio de momentos  $(p_1, \dots, p_N)$ . El cambio de representación se efectúa aplicando la respectiva transformada de Fourier a las funciones de onda  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  y  $\Phi(p_1, \dots, p_N)$

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int \Phi(p_1, \dots, p_N) e^{i(x_1 p_1 + \dots + x_N p_N)/\hbar} dp_1 \dots dp_N, \quad (1.10)$$

$$\Phi(p_1, \dots, p_N) = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int \Psi(x_1, \dots, x_N) e^{-i(p_1 x_1 + \dots + p_N x_N)/\hbar} dx_1 \dots dx_N. \quad (1.11)$$

## 1.2. Interacción física y correlaciones estadísticas

En un sentido físico una interacción es un proceso de acción que requiere dos o más partículas u objetos y que se describe a través de un campo fundamental o fuerza fundamental. Así la interacción viene de la física del problema a causa de los potenciales aplicados y las propiedades de las partículas. En el principio de causalidad observamos que a la causa determinada por el potencial le corresponde un efecto determinado sobre las partículas.

En razón de lo anterior es que estamos interesados en medir el efecto del potencial sobre las partículas mediante la correlación. La propiedad de correlación es fundamentalmente una construcción estadística (matemática) que mide la magnitud y el tipo de relación (lineal, no-lineal) entre variables aleatorias. En términos generales si existe interacción entre partículas entonces la correlación depende de la distancia ya que los potenciales son funciones dependientes de la posición. Ahora si consideramos las variables de posición como variables aleatorias entonces podemos asociarles una medida de probabilidad que puede examinarse usando su función de distribución conjunta  $P(x_i, x_j)$ .

La relación entre variables aleatorias se puede estudiar a través de la definición de independencia y dependencia de eventos. En términos de probabilidades un sistema físico estadísticamente independiente implica distribuciones independientes por lo que no existe correlación si se cumple la relación

$$P(x_i, x_j) = P(x_i)P(x_j). \quad (1.12)$$

Además un sistema físico estadísticamente dependiente implica distribuciones dependientes por lo que existe correlación cuando se cumple la relación

$$P(x_i, x_j) \neq P(x_i)P(x_j) \Rightarrow P(x_i, x_j) = P(x_i|x_j)P(x_j), \quad (1.13)$$

donde  $P(x_i|x_j)$  corresponde a la probabilidad condicional del evento  $x_i$  dado el evento  $x_j$ .

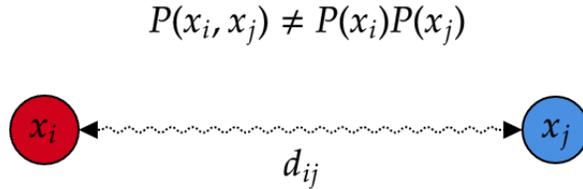


Figura 1.1: Interacción entre dos partículas  $x_i$  y  $x_j$  separadas a una distancia  $d_{ij}$  sometidas a un potencial de interacción donde existe correlación por lo que se cumple la condición  $P(x_i, x_j) \neq P(x_i)P(x_j)$ .

La probabilidad condicional también se conoce como probabilidad de causas la cual puede contener una relación real de causa-efecto del sistema. De acuerdo con la idea anterior la definición de probabilidad condicional tiene un sentido intuitivo ya que implica recurrir a las características de los fenómenos físicos que describe.

### 1.2.1. Correlación de variables en la mecánica cuántica

En la teoría de la mecánica cuántica la función de onda de  $N$ -partículas  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  contiene la información del sistema físico en estudio. Sin embargo, se usa  $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$  que define una función de densidad de probabilidad. Así en principio obtenemos una probabilidad de ocurrencia sobre las variables en la representación de posición o momentos. Por lo anterior el estudio de la correlación de varias variables o partículas requiere de la existencia de una función de distribución conjunta no separable (1.13). Por otro lado, la interacción entre partículas debida al efecto de potenciales y de su confinamiento puede controlarse mediante el ajuste de los parámetros en los potenciales. Aquí vemos como

la aparición de un potencial de interacción provoca la no separabilidad de la ecuación de Schrödinger en las coordenadas originales (canónicas). Por lo que es conveniente usar un sistema de coordenadas que permita separar el problema original. Además, se debe mantener la indistinguibilidad ante el intercambio de las variables canónicas. Asimismo es importante considerar los efectos a causa de la simetrización de la función de onda por la indistinguibilidad entre partículas y la aparición de huecos de simetría que se explican por el principio de exclusión de Pauli.

En mecánica cuántica las variables canónicas conjugadas  $(\hat{x}, \hat{p})$  cumplen las siguientes reglas de conmutación

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad (1.14)$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar, \quad (1.15)$$

donde el último conmutador no se anula, por lo que las dos variables dinámicas son canónicas conjugadas. Además, dichas reglas de conmutación son fundamentales en mecánica cuántica. Lo anterior es debido a la naturaleza estocástica de los sistemas cuánticos, ya que no es posible medir de manera simultánea y con precisión arbitraria la posición y el momento asociados a una partícula individual. Para cuantificar la propiedad de no conmutatividad de dos variables canónicas conjugadas se utiliza el principio de incertidumbre o la desigualdad de Heisenberg [33, 34]

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.16)$$

la desigualdad de Heisenberg establece que el producto de las dispersiones de dos variables conjugadas no conmuta y no puede ser menor que cierta cota. En la **sección 3.2** se introduce la definición de la desviación estándar  $\sigma_x$ .

### 1.2.2. Energía de correlación vs correlación estadística

El concepto de correlación estadística en mecánica cuántica ha sido examinado en diversos contextos [10, 35]. Tal como se ha visto las partículas en los sistemas cuánticos están representadas por las variables aleatorias asociadas con la densidad de probabilidad. Debido a esto el estudio de la correlación a partir de la densidad de probabilidad es distinto de otras alternativas como la energía de correlación en química cuántica [36] que utiliza criterios energéticos. En este caso la energía de correlación para cierto estado se define como la diferencia entre el valor propio del Hamiltoniano y su valor esperado en la aproximación de Hartree-Fock [37]

$$E_{corr} = \langle \hat{H} \rangle_{exacto} - \langle \hat{H} \rangle_{HF}, \quad (1.17)$$

dicha ecuación corresponde a la energía de correlación, pero se ocupa como criterio de calidad de la función de onda aproximada variacional cuando el primer término se reemplaza por  $\langle \hat{H} \rangle_{approx}$ , donde a mayor energía de correlación tenemos una mejor función de onda. La energía de correlación utiliza como referencia un sistema de partículas independientes, distinto al sistema de interés, mientras que las medidas estadísticas no utilizan una referencia externa. Además, esta energía de correlación se emplea en química cuántica para medir los efectos de correlación en funciones de onda aproximadas. En este sentido debemos enfatizar que las funciones de onda que conducen a buenas energías no predicen otras propiedades con la misma precisión.

La diferencia fundamental entre ambos enfoques es que en el caso de la correlación estadística el énfasis se pone en el análisis de las características de las densidades de probabilidad relacionadas con las funciones propias del Hamiltoniano más que en los valores propios del Hamiltoniano.

Actualmente existe un interés por comprender la naturaleza de las correlaciones estadísticas en sistemas cuánticos debido a la interpretación del módulo al cuadrado de la función de onda como una densidad de probabilidad. Con referencia a lo anterior sabemos que la densidad electrónica es un observable fundamental que se puede medir [38, 39, 40]. Asimismo existen técnicas de imágenes que pueden determinar simultáneamente las posiciones de todos los átomos en redes ópticas dentro de una sola trampa aislada donde puede existir información relevante del sistema. Sin embargo, las correlaciones espaciales de orden superior que son difíciles de detectar en la densidad reducida de una variable pueden manifestarse a partir de la densidad de probabilidad de  $N$ -partículas [41, 42, 43].

De igual manera para la medición de la densidad en espacio de momentos encontramos un soporte coincidente con los experimentos de espectroscopía (e,2e) [44] en una partícula y (e,3e) en pares de partículas [45, 46, 47].

Ahora bien, en el caso de fermiones el estudio del origen y tipo de correlaciones en especial de órdenes superiores es fundamental para entender sistemas complejos de muchos cuerpos [28, 29, 48]. Recientemente con la observación experimental de los cristales de Pauli [49, 50] la atención se centra en la detección de correlaciones de  $N$ -partículas en las posiciones relativas o bien en los momentos de dichas partículas.

### 1.3. Densidades probabilísticas y la correlación estadística

Las medidas de correlación estadística se utilizan para cuantificar la interacción de partículas en las densidades y funciones de onda de los sistemas cuánticos, ya que estas contienen la información del sistema. En ese sentido encontramos la razón del porqué

existe interés en examinar diferentes medidas de correlación estadística.

Como puede observarse, una característica fundamental de la mecánica cuántica es el principio de incertidumbre de Heisenberg el cual relaciona el comportamiento de la densidad de probabilidad en la representación del espacio de posición con la densidad de probabilidad en el espacio de momentos. Aquí se pueden plantear varias preguntas con respecto a las correlaciones estadísticas en los sistemas cuánticos, tales como ¿cuáles son las diferencias o similitudes entre las correlaciones estadísticas entre partículas observadas en una representación en comparación con la otra? Es decir, ¿cómo se correlacionan las posiciones de las partículas y en qué se diferencia esto de las correlaciones entre sus momentos? ¿Existen simetrías en el comportamiento de las medidas de correlación en un espacio en comparación con el otro?

Otro aspecto de los sistemas cuánticos con múltiples partículas es la simetría de la función de onda, donde la pregunta fundamental es ¿qué papel tiene la simetría de la función de onda en las correlaciones estadísticas entre partículas? ¿Es lo mismo en las representaciones de posición y momento?

Por último está la cuestión de la naturaleza de las interacciones presentes en los sistemas cuánticos de múltiples partículas y sus manifestaciones en las densidades de probabilidad multivariada y las correlaciones estadísticas. ¿Cómo se traduce la intensidad de las interacciones en el Hamiltoniano en las correlaciones estadísticas? ¿Aumentan estas correlaciones con una intensidad creciente de interacciones? ¿Existe una semejanza entre las correlaciones en el estado fundamental en oposición a los estados excitados? ¿Surgen patrones o cada estado posee sus propias características particulares con respecto a la correlación? ¿Existen diferencias entre las características de la correlación por pares y las de las correlaciones de orden superior?

A continuación presentamos la estructura de la tesis. En el **Capítulo 2** se introducen los modelos de tres osciladores no interactuantes e interactuantes estudiados en la tesis. En el **Capítulo 3** se presentan las medidas de localización estadística usadas en los modelos. Posteriormente en el **Capítulo 4** se abordan las medidas de correlación de pares, y en el **Capítulo 5** se tratan las medidas de correlación de tres variables y de orden alto. En estos tres capítulos se introducen nuevas medidas informacionales.

En el **Capítulo 6** se presentan los resultados de las medidas informacionales aplicadas a los estados basales de osciladores interactuantes. En el **Capítulo 7** se muestran los resultados de las medidas informacionales en comparación con las medidas basadas en momentos de la densidad para los estados basales y estados excitados. En estos dos capítulos se introducen las nuevas medidas de correlación de tres variables y de orden alto para las medidas informacionales de Shannon y las medidas basadas en momentos de la densidad. En el **Capítulo 8** se comparan los resultados de las medidas informacionales de Shannon contra las medidas basadas en densidades acumulativas para los estados basales.

## CAPÍTULO 1

---

Además en este capítulo se introducen las nuevas medidas de correlación de tres variables y de orden alto basadas en densidades acumulativas. Finalmente en el **Capítulo 9** se estudian las medidas informacionales en presencia de la interacción entre tres cuerpos para el estado basal. Estos son algunos de los temas que proponemos abordar en las siguientes secciones.

## Capítulo 2

# Modelos de estudio para tres partículas

A continuación presentamos los modelos de tres partículas no interactuantes e interactuantes para sistemas sin espín y con espín en el caso de potenciales de interacción atractivo y repulsivo.

### 2.1. $N$ -Osciladores acoplados

El modelo de osciladores acoplados se puede definir en términos del siguiente Hamiltoniano unidimensional con potenciales armónicos

$$H = \sum_{i=1}^N \left( \frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} \omega^2 m \hat{x}_i^2 \right) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \lambda^2 (\hat{x}_i - \hat{x}_j)^2, \quad (2.1)$$

donde  $\hat{x}_i = x_i$ ,  $\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ ,  $m$  es la masa de los osciladores,  $\omega$  y  $\lambda$  corresponden a las frecuencias armónicas. La interacción entre pares de partículas está dada por el potencial de un oscilador armónico entre pares  $(x_i, x_j)$ , como se ve en el tercer término de la ecuación (2.1).

Para resolver la ecuación de Schrödinger asociada a la ecuación del Hamiltoniano (2.1) es necesario transformar las coordenadas canónicas  $(x_i, p_i)$  a un nuevo sistema de coordenadas  $(r_i, q_i)$ . Lo anterior con la finalidad de cambiar el problema original que no es separable a uno que es separable. Así introducimos las nuevas coordenadas de Jacobi [51] en términos de las coordenadas del centro de masa

$$R = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{j=1}^N x_j, \quad (2.2)$$

y de las  $N - 1$  coordenadas relativas

$$r_i = [i(i + 1)]^{-\frac{1}{2}} \left( \sum_{j=1}^i x_j - ix_{i+1} \right). \quad (2.3)$$

Debido a la importancia de este modelo enfatizamos la siguiente característica del potencial armónico. En sistemas reales cualquier potencial atractivo considerado como una función suave  $V(x)$  presenta un mínimo en su posición de equilibrio. Asimismo alrededor del mínimo el potencial se aproxima por una expansión en serie de Taylor

$$V(x) = V(0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=0} x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=0} x^2 + \dots, \quad (2.4)$$

donde  $x$  es la distancia al mínimo, el primer coeficiente se puede fijar como el valor constante  $V(0) = 0$  y el segundo coeficiente  $\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=0} = 0$  toma éste valor en la posición de equilibrio. Debido a lo anterior el oscilador armónico aproxima a cualquier potencial atractivo en una región cercana al mínimo. Por lo que la energía potencial de cualquier sistema se puede escribir como

$$V(x; k) = \frac{1}{2} k x^2, \quad (2.5)$$

definiendo el tercer coeficiente como  $\left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=0} \equiv k$ , donde  $k = \omega^2 m$  con  $m$  la masa y  $\omega$  la frecuencia [52].

### 2.1.1. Potenciales e interacciones

Las interacciones en sistemas mecánico cuánticos están descritas a través de la función potencial  $V(x; k)$  que en general depende de las coordenadas en el espacio de posición  $x$  y de un parámetro  $k = \{\lambda, \omega\}$  que mide la intensidad de la interacción. Para el caso de tres partículas sometidas a un potencial de tipo armónico con interacción como una suma de pares

$$V(x_1, x_2, x_3; \omega, \lambda) = \omega^2 \sum_{i=1}^3 x_i^2 \pm \lambda^2 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=i+1}^3 (x_i - x_j)^2, \quad (2.6)$$

donde  $x_1, x_2$  y  $x_3$  corresponden a las coordenadas canónicas en el espacio de posición y  $\omega$  describe la intensidad de interacción del oscilador mientras que  $\lambda$  es la intensidad de la interacción de pares entre las partículas interactuantes. Además la energía del sistema depende en los valores de los parámetros  $\omega$  y  $\lambda$  que se pueden controlar para modificar los valores de este observable y del sistema en general.

## 2.2. 3- Osciladores acoplados

El modelo de tres osciladores acoplados lo escribimos a partir del Hamiltoniano (2.1) en coordenadas canónicas en el espacio de posición considerando unidades ( $m = \hbar = 1$ )

$$H = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + \frac{1}{2} \omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \pm \frac{1}{2} \lambda^2 [(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - x_3)^2 + (x_2 - x_3)^2], \quad (2.7)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia natural del oscilador y  $\lambda$  el potencial de interacción siendo el signo positivo para el caso atractivo y el signo negativo para el caso repulsivo.

Las coordenadas canónicas en el espacio de posición de las tres partículas  $(x_1, x_2, x_3)$  se transforman en las coordenadas de Jacobi  $(R, r_1, r_2)$  aplicando las ecuaciones (2.2-2.3)

$$R = \frac{1}{\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3), \quad (2.8)$$

corresponde a las coordenadas del centro de masa y

$$r_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3), \quad r_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2), \quad (2.9)$$

son las coordenadas relativas. Al sustituir las nuevas coordenadas en la ecuación (2.7) tenemos que el Hamiltoniano se escribe como

$$H = \frac{1}{2} \left[ \left( -\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \alpha_1 R^2 \right) + \left( -\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \alpha_2 r_1^2 \right) + \left( -\frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \alpha_3 r_2^2 \right) \right], \quad (2.10)$$

donde consideramos  $\alpha_1 = \omega^2$  y  $\alpha_2 = \alpha_3 = \omega^2 \pm 3\lambda^2$  con el signo positivo para la interacción atractiva y el signo negativo para la interacción repulsiva. Además se impone la restricción  $\lambda < \frac{\omega}{\sqrt{3}}$  sobre el potencial de interacción en el caso repulsivo [7] para obtener estados ligados.

La ecuación de Schrödinger se resuelve en las nuevas coordenadas usando el Hamiltoniano (2.10) lo cual transforma el problema en uno separable respecto a las coordenadas de Jacobi

$$H\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2) = E\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2), \quad (2.11)$$

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \alpha_1 R^2 + \alpha_2 r_1^2 + \alpha_3 r_2^2 \right) \right] \Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2) = E\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2), \quad (2.12)$$

## CAPÍTULO 2

---

donde el número cuántico principal  $n_R$  corresponde a la coordenada del centro de masa  $R$  y los números cuánticos  $n_{r_1}$  y  $n_{r_2}$  corresponden a las coordenadas relativas, y la función propia se escribe como un producto de tres funciones propias

$$\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2) = \psi_{n_R}(R) \psi_{n_{r_1}}(r_1) \psi_{n_{r_2}}(r_2) = |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle, \quad (2.13)$$

donde tenemos

$$\psi_{n_R}(R) = \left( \frac{\alpha_1^{\frac{1}{4}}}{2^{n_R} n_R! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \sqrt{\alpha_1} R^2} H_{n_R} \left( \alpha_1^{\frac{1}{4}} R \right), \quad (2.14)$$

$$\psi_{n_{r_1}}(r_1) = \left( \frac{\alpha_2^{\frac{1}{4}}}{2^{n_{r_1}} n_{r_1}! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \sqrt{\alpha_2} r_1^2} H_{n_{r_1}} \left( \alpha_2^{\frac{1}{4}} r_1 \right), \quad (2.15)$$

$$\psi_{n_{r_2}}(r_2) = \left( \frac{\alpha_3^{\frac{1}{4}}}{2^{n_{r_2}} n_{r_2}! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \sqrt{\alpha_3} r_2^2} H_{n_{r_2}} \left( \alpha_3^{\frac{1}{4}} r_2 \right), \quad (2.16)$$

donde  $H_n(x)$  es el polinomio de Hermite de orden  $n$ . Además el correspondiente valor propio es

$$\begin{aligned} E &= E_R + E_{r_1} + E_{r_2}, \\ E &= \omega \left( n_R + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\omega^2 \pm 3\lambda^2} (n_{r_1} + n_{r_2} + 1). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Es importante resaltar que la permutación de  $x_1, x_2$  o  $x_3$  no resulta necesariamente en un estado indistinguible del original  $|n_R, n_{r_1}, n_{r_2}\rangle$ . Esto se puede ver en la definición de las coordenadas relativas en (2.9).

Por otro lado para obtener la función de onda en el espacio de momentos  $\Phi(p_1, p_2, p_3)$  podemos aplicar la transformada de Fourier a la función de onda en el espacio de posición  $\Psi(x_1, x_2, x_3)$  correspondiente a las ecuaciones (2.14-2.15)

$$\Phi(p_1, p_2, p_3) = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int \Psi(x_1, x_2, x_3) e^{-i(p_1 x_1 + p_2 x_2 + p_3 x_3)/\hbar} dx_1 dx_2 dx_3. \quad (2.18)$$

Otra alternativa para conseguir dicha función de onda es reescribir el Hamiltoniano de la ecuación (2.10) en términos de la variable canónica  $p$  en el espacio de momentos [53]

$$H = \frac{1}{2} \left[ \left( Q^2 - \alpha_1 \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) + \left( q_1^2 - \alpha_2 \frac{\partial^2}{\partial q_1^2} \right) + \left( q_2^2 - \alpha_3 \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} \right) \right], \quad (2.19)$$

donde las coordenadas  $(Q, q_1, q_2)$  corresponden a las coordenadas de Jacobi en el espacio de momentos las cuales se obtienen usando las ecuaciones (2.2-2.3) respecto a las coordenadas

canónicas  $(p_1, p_2, p_3)$ . Por lo que la función de onda en el espacio de momentos corresponde a

$$\Phi_{n_Q n_{q_1} n_{q_2}}(Q, q_1, q_2) = \phi_{n_Q}(Q) \phi_{n_{q_1}}(q_1) \phi_{n_{q_2}}(q_2) = |n_Q n_{q_1} n_{q_2}\rangle, \quad (2.20)$$

donde tenemos

$$\phi_{n_Q}(Q) = \left( \frac{1}{\alpha_1^{\frac{1}{4}} 2^{n_Q} n_Q! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\sqrt{\alpha_1}} Q^2} H_{n_Q} \left( \frac{Q}{\alpha_1^{\frac{1}{4}}} \right), \quad (2.21)$$

$$\phi_{n_{q_1}}(q_1) = \left( \frac{1}{\alpha_2^{\frac{1}{4}} 2^{n_{q_1}} n_{q_1}! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\sqrt{\alpha_2}} q_1^2} H_{n_{q_1}} \left( \frac{q_1}{\alpha_2^{\frac{1}{4}}} \right), \quad (2.22)$$

$$\phi_{n_{q_2}}(q_2) = \left( \frac{1}{\alpha_3^{\frac{1}{4}} 2^{n_{q_2}} n_{q_2}! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\sqrt{\alpha_3}} q_2^2} H_{n_{q_2}} \left( \frac{q_2}{\alpha_3^{\frac{1}{4}}} \right). \quad (2.23)$$

### 2.2.1. Osciladores acoplados sin espín

Para construir funciones de onda simétricas consideramos que la función de onda toma la forma  $|n_R, 0, 0\rangle$  donde se cumple que  $n_R \geq 0$ , la cual es indistinguible

$$\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2) = |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle, \quad (2.24)$$

así la densidad simétrica es

$$|\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2)|^2 = M^2 |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle \langle n_R n_{r_1} n_{r_2}|, \quad (2.25)$$

donde  $M$  es la constante de normalización. Para generar las correspondientes funciones de onda y densidades en el espacio de momentos usamos  $|n_Q n_{q_1} n_{q_2}\rangle$ . A continuación veremos cómo la inclusión del espín permite generar funciones de onda antisimétricas.

### 2.2.2. Osciladores acoplados con espín

Las funciones de onda antisimétricas en el espacio de posición con espín  $|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle = (\pm, \pm, \pm)$  se pueden construir usando la permutación cíclica de las coordenadas de Jacobi  $(R, r_1, r_2)$  [7]

$$R = R' = R'' = \frac{1}{\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3), \quad (2.26)$$

$$r'_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 - 2x_2 + x_3), \quad r''_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(-2x_1 + x_2 + x_3), \quad (2.27)$$

$$r'_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_3 - x_1), \quad r''_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_3), \quad (2.28)$$

## CAPÍTULO 2

donde los números cuánticos están definidos como  $n_R = n_{R'} = n_{R''}$  para las coordenadas de centro de masa  $R$ ,  $n_{r_1} = n_{r'_1} = n_{r''_1}$  y  $n_{r_2} = n_{r'_2} = n_{r''_2}$  para las correspondientes coordenadas relativas  $r_1$  y  $r_2$ .

Las funciones de onda antisimétricas se construyen para partículas indistinguibles considerando el espín como

$$\begin{aligned} \Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2) = N [ & (|n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle - |n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}\rangle) |++-\rangle + \\ & (|n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}\rangle - |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle) |+-+\rangle + \\ & (|n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}\rangle - |n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}\rangle) |-++\rangle ], \end{aligned} \quad (2.29)$$

para valores de  $n_{r_2}$  par siendo  $N$  la constante de normalización adecuada.

Por otro lado tenemos

$$\begin{aligned} \Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2) = N' [ & (|n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}\rangle |++-\rangle + |n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}\rangle |+-+\rangle + \\ & |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle |-++\rangle) ], \end{aligned} \quad (2.30)$$

para valores de  $n_{r_2}$  impar siendo  $N'$  la constante de normalización.

Usando la función de onda antisimétrica adecuada generamos la función de densidad por lo cual integramos con respecto al espín  $|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle$ , donde existen términos que se hacen cero debido a la ortogonalidad de las funciones de espín, para  $n_{r_2}$  par

$$\begin{aligned} |\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2)|^2 = N^2 [ & 2 |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle \langle n_R n_{r_1} n_{r_2}| + 2 |n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}\rangle \langle n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}| \\ & + 2 |n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}\rangle \langle n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}| - 2 |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle \langle n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}| \\ & - 2 |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle \langle n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}| - 2 |n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}\rangle \langle n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}| ], \end{aligned} \quad (2.31)$$

y para  $n_{r_2}$  impar

$$\begin{aligned} |\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2)|^2 = N'^2 [ & |n_R n_{r_1} n_{r_2}\rangle \langle n_R n_{r_1} n_{r_2}| + |n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}\rangle \langle n_{R'} n_{r'_1} n_{r'_2}| \\ & + |n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}\rangle \langle n_{R''} n_{r''_1} n_{r''_2}| ]. \end{aligned} \quad (2.32)$$

La función de densidad reducida a dos partículas o marginal  $\Gamma(x_1, x_2)$  se obtiene integrando la función de densidad  $|\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2)|^2$  con respecto a una partícula en las coordenadas originales. Finalmente la función de densidad reducida a una partícula  $\rho(x)$  se consigue integrando la densidad  $|\Psi_{n_R n_{r_1} n_{r_2}}(R, r_1, r_2)|^2$  con respecto a dos partículas en las coordenadas originales.

En el espacio de momentos se define la función de onda antisimétrica

$$\begin{aligned} \Phi_{n_Q n_{q_1} n_{q_2}}(Q, q_1, q_2) = N [ & (|n_Q n_{q_1} n_{q_2}\rangle - |n_{Q'} n_{q'_1} n_{q'_2}\rangle) |++-\rangle + \\ & (|n_{Q''} n_{q''_1} n_{q''_2}\rangle - |n_Q n_{q_1} n_{q_2}\rangle) |+-+\rangle + \\ & (|n_{Q'} n_{q'_1} n_{q'_2}\rangle - |n_{Q''} n_{q''_1} n_{q''_2}\rangle) |-++\rangle ], \end{aligned} \quad (2.33)$$

para  $n_{q_2}$  par y  $N$  la constante de normalización.

$$\Phi_{n_Q n_{q_1} n_{q_2}}(Q, q_1, q_2) = N' [ (|n_{Q'} n_{q_1'} n_{q_2'}\rangle |++-\rangle + |n_{Q'} n_{q_1'} n_{q_2'}\rangle |+-+\rangle + |n_Q n_{q_1} n_{q_2}\rangle |-++\rangle ) ], \quad (2.34)$$

para  $n_{q_2}$  impar y  $N'$  la constante de normalización. Por un procedimiento análogo al anterior se obtienen las funciones de densidad correspondientes.

### 2.3. Osciladores no acoplados

Como comparativo con el modelo interactuante ahora consideramos el estudio del Hamiltoniano asociado con tres osciladores armónicos isotrópicos no interactuantes. En este caso las funciones de onda del oscilador no interactuante se pueden obtener fijando  $\lambda = 0$  en el Hamiltoniano de la ecuación (2.7). Por lo que la ecuación es separable en coordenadas canónicas y cuya solución corresponde a productos de la función de onda del oscilador armónico en espacio de posición.

Por otro lado este modelo lo podemos definir a partir de tres osciladores armónicos independientes en un sistema de coordenadas canónicas  $(\hat{x}, \hat{p})$  tal que los correspondientes Hamiltonianos son

$$H_{x_1} = \frac{1}{2m} \hat{p}_{x_1}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}_1^2, \quad (2.35)$$

$$H_{x_2} = \frac{1}{2m} \hat{p}_{x_2}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}_2^2, \quad (2.36)$$

$$H_{x_3} = \frac{1}{2m} \hat{p}_{x_3}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}_3^2, \quad (2.37)$$

donde el Hamiltoniano total se escribe como la suma

$$H = H_{x_1} + H_{x_2} + H_{x_3}, \quad (2.38)$$

por lo que resolvemos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el oscilador armónico en coordenadas canónicas en el espacio de posición  $x$  para un sistema de tres partículas no interactuantes (osciladores no acoplados)

$$H\Psi_{n_{x_1} n_{x_2} n_{x_3}}(x_1, x_2, x_3) = E\Psi_{n_{x_1} n_{x_2} n_{x_3}}(x_1, x_2, x_3), \quad (2.39)$$

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + \frac{1}{2} \omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \right] \Psi_{n_{x_1} n_{x_2} n_{x_3}}(x_1, x_2, x_3) = E\Psi_{n_{x_1} n_{x_2} n_{x_3}}(x_1, x_2, x_3), \quad (2.40)$$

así podemos escribir la función propia total asociada a la ecuación anterior

$$\Psi_{n_{x_1} n_{x_2} n_{x_3}}(x_1, x_2, x_3) = \phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_3), \quad (2.41)$$

con

$$\phi_{n_1}(x_1) = \left( \frac{\omega^{\frac{1}{2}}}{2^{n_1} n_1! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega x_1^2}{2}} H_{n_1} \left( \omega^{\frac{1}{2}} x_1 \right), \quad (2.42)$$

$$\phi_{n_2}(x_2) = \left( \frac{\omega^{\frac{1}{2}}}{2^{n_2} n_2! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega x_2^2}{2}} H_{n_2} \left( \omega^{\frac{1}{2}} x_2 \right), \quad (2.43)$$

$$\phi_{n_3}(x_3) = \left( \frac{\omega^{\frac{1}{2}}}{2^{n_3} n_3! \pi^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega x_3^2}{2}} H_{n_3} \left( \omega^{\frac{1}{2}} x_3 \right), \quad (2.44)$$

donde cada función es la solución de un oscilador armónico.

El correspondiente valor propio es

$$\begin{aligned} E &= E_{x_1} + E_{x_2} + E_{x_3}, \\ E &= \omega \left( n_{x_1} + n_{x_2} + n_{x_3} + \frac{3}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Como (2.41) no es una función indistinguible construimos el determinante de Slater para conseguir funciones de onda indistinguibles simétricas y antisimétricas para tres osciladores

$$|n_{x_1}, n_{x_2}, n_{x_3}\rangle = N^{\pm} |\phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_3)|^{\pm}, \quad (2.46)$$

tenemos que cada factor en el producto se considera como un orbital donde se pueden formar productos simetrizados (S) y antisimetrizados (A). Así obtenemos la función de densidad antisimétrica en el espacio de posición

$$\begin{aligned} |\Psi_A|^2 &= \left[ \frac{1}{\sqrt{6}} \left( \phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_3) - \phi_{n_3}(x_2)\phi_{n_2}(x_3) - \phi_{n_1}(x_2)\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_3}(x_3) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_2}(x_3) + \phi_{n_1}(x_3)\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_3}(x_2) - \phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_2}(x_2) \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (2.47)$$

y la función de densidad simétrica en el espacio de posición

$$\begin{aligned} |\Psi_S|^2 &= \left[ \frac{1}{\sqrt{6}} \left( \phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_3) + \phi_{n_3}(x_2)\phi_{n_2}(x_3) + \phi_{n_1}(x_2)\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_3}(x_3) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_2}(x_3) + \phi_{n_1}(x_3)\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_3}(x_2) + \phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_2}(x_2) \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (2.48)$$

También definimos las funciones de densidades reducidas a dos partículas

$$\begin{aligned} \Gamma_A = \frac{1}{\sqrt{6}} & \left( \phi_{n_1}^2(x_1)\phi_{n_2}^2(x_2) + \phi_{n_2}^2(x_1)\phi_{n_1}^2(x_2) + \phi_{n_2}^2(x_1)\phi_{n_3}^2(x_2) + \phi_{n_3}^2(x_1)\phi_{n_2}^2(x_2) \right. \\ & + \phi_{n_1}^2(x_1)\phi_{n_3}^2(x_2) + \phi_{n_3}^2(x_1)\phi_{n_1}^2(x_2) - 2\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_2) \\ & \left. - 2\phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_1}(x_2)\phi_{n_3}(x_2) - 2\phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_1}(x_2)\phi_{n_2}(x_2) \right), \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_S = \frac{1}{\sqrt{6}} & \left( \phi_{n_1}^2(x_1)\phi_{n_2}^2(x_2) + \phi_{n_2}^2(x_1)\phi_{n_1}^2(x_2) + \phi_{n_2}^2(x_1)\phi_{n_3}^2(x_2) + \phi_{n_3}^2(x_1)\phi_{n_2}^2(x_2) \right. \\ & + \phi_{n_1}^2(x_1)\phi_{n_3}^2(x_2) + \phi_{n_3}^2(x_1)\phi_{n_1}^2(x_2) + 2\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_2) \\ & \left. + 2\phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_3}(x_1)\phi_{n_1}(x_2)\phi_{n_3}(x_2) + 2\phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_1)\phi_{n_1}(x_2)\phi_{n_2}(x_2) \right). \end{aligned} \quad (2.50)$$

La función de densidad de una partícula

$$\rho_A = \rho_S = \frac{1}{3} \left( \phi_{n_1}^2(x) + \phi_{n_2}^2(x) + \phi_{n_3}^2(x) \right). \quad (2.51)$$

En el espacio de momentos la función de un oscilador armónico es

$$\tilde{\phi}_n(p) = \left( \frac{1}{2^n n! (\omega\pi)^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{p^2}{2\omega}} H_n \left( \frac{p}{\omega^{\frac{1}{2}}} \right), \quad (2.52)$$

con los orbitales (2.52) se construye el determinante de Slater para obtener las funciones de densidad en el espacio de momentos  $|\Phi_A|^2$  y  $|\Phi_S|^2$  usando (2.47 - 2.48) y las correspondientes funciones de densidad reducidas  $\Pi_A, \Pi_S, \pi_A$  y  $\pi_S$  usando (2.49 - 2.51).

## 2.4. La distribución Gaussiana multivariada y los modelos de osciladores

En los modelos propuestos como en el caso de los osciladores interactuantes para el estado  $|000\rangle$  se tiene asociada la función Gaussiana en su distribución de probabilidad. En este sentido dicho modelo se considera análogo a la distribución Gaussiana multivariada de tres variables  $(x_1, x_2, x_3)$ , (ver **Apéndice A**)

$$G(\mathbf{x} \mid \mu, M_{cov}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \det[M_{cov}]^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu)^T M_{cov}^{-1}(\mathbf{x} - \mu)\right), \quad (2.53)$$

donde  $\mathbf{x}$  es un vector en 3- dimensiones,  $\mu$  es el vector de medias en 3- dimensiones,  $M_{cov}$  es una matriz de covarianza  $3 \times 3$  y  $\det[M_{cov}]$  corresponde al determinante de la matriz de covarianza.

En este punto si consideramos la forma geométrica de la distribución Gaussiana entonces existe una dependencia funcional de la Gaussiana en  $\mathbf{x}$  mediante la forma cuadrática que aparece en el argumento de la función exponencial

$$(\mathbf{x} - \mu)^T M_{cov}^{-1} (\mathbf{x} - \mu), \quad (2.54)$$

así la distribución Gaussiana presenta un perfil de superficies en el espacio  $\mathbf{x}$  para determinada forma cuadrática.

Por otro lado, se puede escribir la ecuación del vector propio para la matriz de covarianza como

$$M_{cov} \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i, \quad (2.55)$$

ya que  $M_{cov}$  es una matriz simétrica con valores reales entonces sus valores propios son reales y sus vectores propios forman una base ortonormal, tal que, la matriz de covarianza se puede expresar como una expansión en términos de sus vectores propios [54]

$$M_{cov} = \sum_{i=1}^D \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T, \quad (2.56)$$

cuando todos los valores propios  $\lambda_i$  son positivos entonces (la matriz de covarianza es semi-definida positiva) las superficies representan elipsoides con centros en  $\mu$  y ejes orientados a lo largo de  $\mathbf{u}_i$  con factores de escala en las direcciones de los ejes dadas por  $\lambda_i^{\frac{1}{2}}$ .

Por todo lo anterior, tenemos que la matriz de covarianza describe la forma y la orientación de la distribución a través de sus varianzas y covarianzas. Para el caso de la distribución Gaussiana multivariada la matriz de covarianza define completamente la forma de la distribución.

Ahora extendemos esta idea al caso de variables continuas, como ejemplo, presentamos la densidad de contornos para el estado  $|000\rangle$  con diferentes valores del parámetro  $\lambda$  (ver **Figura 2.1**) en todos los casos la distribución Gaussiana está centrada en el origen por lo que  $\mu = \mathbf{0}$ . En la figura a la izquierda para  $\lambda = 0$  la densidad de contornos corresponde a círculos concéntricos. En la figura en el centro para un valor de potencial atractivo  $\lambda = 5$  tenemos elipses concéntricas que presentan una determinada orientación. En la figura a la derecha para un valor de potencial repulsivo  $\lambda = 0,57$  tenemos también elipses concéntricas pero con otra orientación. En este punto se puede apreciar la existencia de una relación entre el perfil de contornos y su correspondiente matriz de covarianza, por lo que, en este trabajo vamos a examinar dicha relación con detalle.

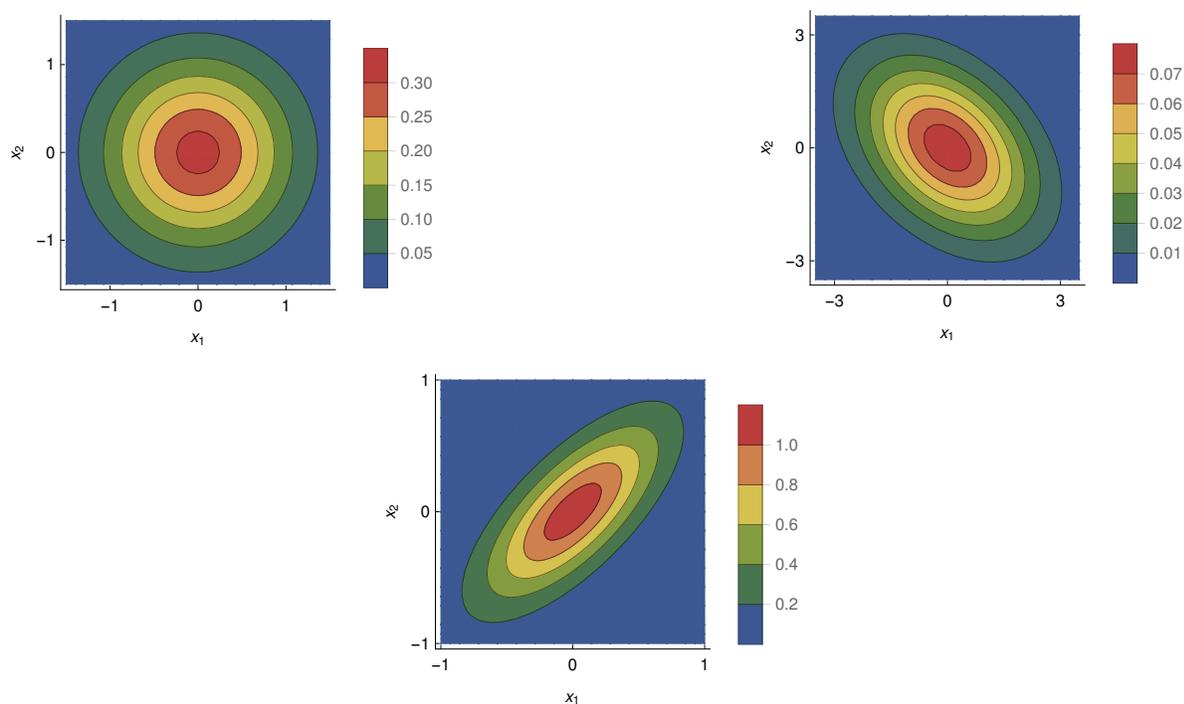


Figura 2.1: Gráficas de contornos de la función de densidad reducida  $|000\rangle$  no interactuante con potencial  $\lambda = 0$  (izquierda), con potencial atractivo  $\lambda = 5$  (centro) y con potencial repulsivo  $\lambda = 0,57$  (derecha). En espacio de posición y  $\omega = 1$ .

En el caso de funciones simétricas de estados excitados y funciones antisimétricas (estado basal y estados excitados) no tenemos solamente funciones Gaussianas asociadas a la función de distribución sino que tenemos combinaciones lineales entre polinomios de Hermite con funciones Gaussianas. Así, en este trabajo ampliaremos el uso y análisis de las densidades de contornos para dichos estados. En la **sección 7** se examinarán los contornos de densidad junto con las medidas de información para encontrar e interpretar rasgos significativos entre ambas representaciones. Además, estudiamos la covarianza y el coeficiente de correlación los cuales describen el grado de similitud entre dos variables aleatorias asumiendo la existencia de una relación lineal.

## 2.5. Relación funcional entre los parámetros de los potenciales $(\omega_{\pm}, \lambda_{\pm})$ en espacios opuestos

Las funciones de onda en espacio de momentos se pueden obtener aplicando la transformada de Fourier o resolviendo el Hamiltoniano en la representación  $p$ .

En este sentido, vemos que dichos procedimientos conducen a funciones de onda análogas a las ecuaciones (2.13-2.16) al hacer las siguientes sustituciones

$$R \rightarrow Q, r_1 \rightarrow q_1 \text{ y } r_2 \rightarrow q_2, \quad (2.57)$$

además las coordenadas de Jacobi  $Q, q_1$  y  $q_2$  se definen usando las ecuaciones (2.26-2.28), por lo que transformamos

$$x_i \rightarrow p_i, \quad (2.58)$$

$$\alpha_j \rightarrow \frac{1}{\alpha_j}, \quad (2.59)$$

esta relación inversa entre los parámetros  $\alpha_j$  para las funciones de onda en espacio de posición y espacio momentos es fundamental en la siguiente discusión. Si usamos la definición de los parámetros

$$\alpha_1 = \omega^2, \quad (2.60)$$

$$\alpha_2 = \alpha_3 = \omega^2 \pm 3\lambda^2, \quad (2.61)$$

junto con la relación de inversión entre los espacios de posición y momentos dada en ecuación (2.59) se obtienen funciones en espacio de posición para un conjunto particular de parámetros  $\alpha_j$  que son idénticas en su forma funcional a las del espacio de momentos para un conjunto distinto de parámetros. Es decir, la función de onda en el espacio de posición para el régimen atractivo ( $\alpha_{j+}$ ) es funcionalmente igual a la función de onda en el espacio de momentos para el régimen repulsivo ( $\alpha_{j-}$ ) y viceversa, si se cumplen las siguientes relaciones

$$\alpha_{1+} = \frac{1}{\alpha_{1-}}, \quad (2.62)$$

$$\alpha_{2+} = \frac{1}{\alpha_{2-}} \text{ y } \alpha_{3+} = \frac{1}{\alpha_{3-}}. \quad (2.63)$$

La formulación en términos de las intensidades de los potenciales de uno y dos cuerpos se puede obtener sustituyendo las correspondientes definiciones de los parámetros  $\alpha_j$ . Así la

primer expresión se obtiene sustituyendo la definición (2.60) en la ecuación (2.62)

$$\omega_+^2 = \frac{1}{\omega_-^2}, \quad (2.64)$$

$$\omega_-^2 \cdot \omega_+^2 = 1, \quad (2.65)$$

donde  $\omega_{\pm}$  se refiere a las magnitudes de los potenciales de un cuerpo cuando hay interacción atractiva o repulsiva en espacios opuestos (posición y momentos).

La segunda expresión se obtiene sustituyendo la correspondiente definición de (2.61) en la correspondiente ecuación (2.63), tal que

$$\omega_+^2 + 3\lambda_+^2 = \frac{1}{\omega_-^2 - 3\lambda_-^2}, \quad (2.66)$$

$$(\omega_+^2 + 3\lambda_+^2)(\omega_-^2 - 3\lambda_-^2) = 1, \quad (2.67)$$

$$\omega_+^2 \omega_-^2 - 3\omega_+^2 \lambda_-^2 + 3\omega_-^2 \lambda_+^2 - 9\lambda_+^2 \lambda_-^2 = 1, \quad (2.68)$$

si restamos la ecuación (2.65) a la ecuación anterior tenemos que

$$-3\omega_+^2 \lambda_-^2 + 3\omega_-^2 \lambda_+^2 - 9\lambda_+^2 \lambda_-^2 = 0, \quad (2.69)$$

$$\frac{\omega_-^2}{\lambda_-^2} - \frac{\omega_+^2}{\lambda_+^2} = 3, \quad (2.70)$$

donde  $\lambda_{\pm}$  son las magnitudes de los respectivos potenciales atractivos y repulsivos en espacios opuestos. En la **Figura 2.2** se muestra un ejemplo de la relación anterior. Aquí vemos como la gráfica de contornos de las densidades son iguales para diferentes valores del parámetro  $\lambda_{\pm}$ . Esto se debe a que se cumplen las relaciones de invariancia (2.65 y 2.70) para la primera fila

$$x/\lambda_+ \rightarrow p/\lambda_-, \quad (2.71)$$

y en la segunda fila

$$x/\lambda_- \rightarrow p/\lambda_+. \quad (2.72)$$

Lo anterior nos permite afirmar que para cualquier función de onda en espacio de posición existe una igualdad funcional con respecto a la función de onda en el espacio de momentos. Esta clase de igualdad funcional también existe en el caso de dos osciladores acoplados, (ver **Apéndice B**).

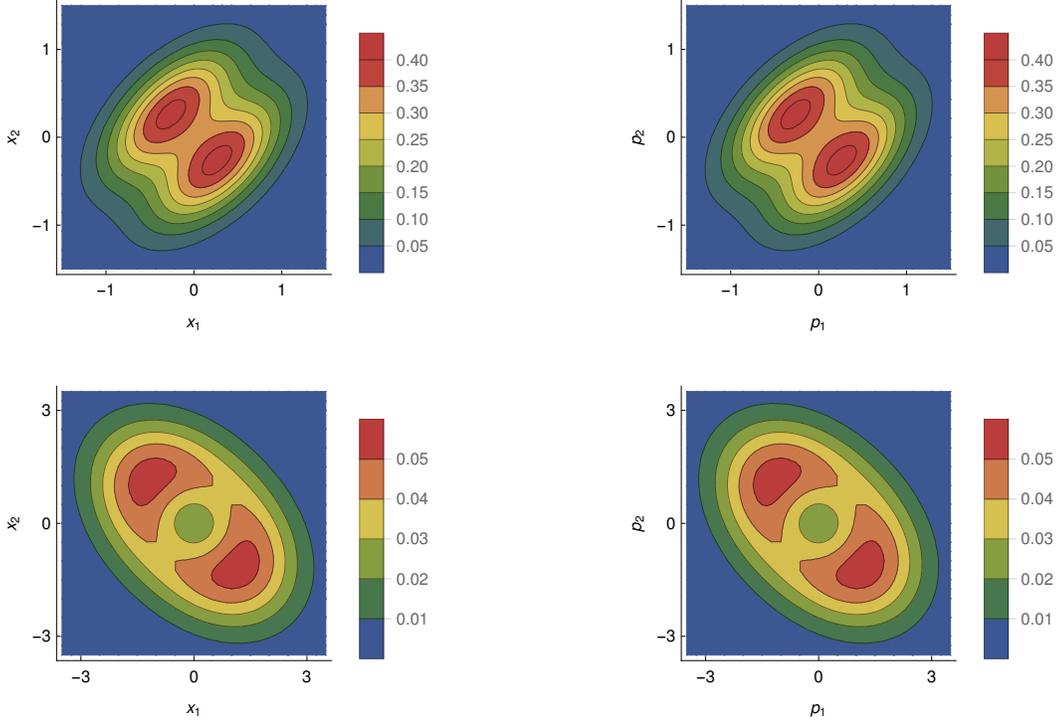


Figura 2.2: Gráficas de contorno de la función de densidad de pares para el estado  $|001\rangle$  con  $\omega_{\pm} = 1$ . Primera fila: potencial atractivo  $\lambda_{+} = 2,236$  en espacio de posición y potencial repulsivo  $\lambda_{-} = 0,559$  en espacio de momentos (izquierda-derecha) . Segunda fila: potencial repulsivo  $\lambda_{-} = 0,553$  en espacio de posición y potencial atractivo  $\lambda_{+} = 1,936$  en espacio de momentos (izquierda-derecha).

## 2.6. Potencial efectivo

Ahora presentamos el modelo de tres partículas sujetas a un potencial de tres cuerpos de tipo Gaussiano. En este punto el objetivo es usar un potencial Gaussiano para simular sistemas en los que hay interacciones explícitas de tres cuerpos, para evaluar la influencia de esta interdependencia en las medidas de información. Algunos aspectos de sistemas cuánticos sujetos a potenciales de tipo Gaussiano se han discutido y examinado en otros trabajos [55, 56].

Para abordar este modelo definimos el Hamiltoniano como

$$H = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + V_T, \quad (2.73)$$

donde el potencial  $V_T$  se define como la suma de los términos armónicos de uno, dos cuerpos y un término adicional de tres cuerpos el cual ha sido estudiado en otras aplicaciones [57, 58]

$$V_T = \frac{1}{2}\omega^2(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \pm \frac{1}{2}\lambda^2[(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - x_3)^2 + (x_2 - x_3)^2] \pm \kappa^2 e^{-\alpha(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}, \quad (2.74)$$

$\omega$  se asocia con la frecuencia natural de los osciladores mientras que  $\lambda$  controla la intensidad de interacción entre dos partículas. Para el parámetro  $\lambda$  el signo positivo corresponde a potenciales atractivos mientras que el signo negativo a repulsivos. Sin embargo, para el parámetro  $\kappa$  el signo tiene significado contrario. En este caso  $\kappa$  controla la fuerza de las interacciones positivas (repulsivas) o negativas (atractivas) de tres cuerpos. Por otro lado, el parámetro  $\alpha$  del potencial de tres cuerpos ajusta el ancho de dicho potencial. Cuando  $\kappa = 0$  (sin potencial de tres cuerpos) el potencial  $V_T$  tiene solamente términos de uno y dos cuerpos para los cuales existen soluciones analíticas usando las coordenadas de Jacobi  $(R, r_1, r_2)$ . Sin embargo, la inclusión del potencial de tres cuerpos  $\pm \kappa^2 e^{-\alpha(R^2 + r_1^2 + r_2^2)}$ , con  $\kappa \neq 0$  en la ecuación (2.10) hace que la ecuación de Schrödinger no sea separable en las coordenadas de Jacobi.

Por otro lado, si consideramos funciones de onda variacional de la forma dada por las ecuaciones (2.14-2.16) con  $\alpha_1, \alpha_2$  y  $\alpha_3$  donde se reemplazan por los parámetros variacionales no lineales  $a, b$  y  $c$ , que se obtienen optimizando la energía con el término de tres cuerpos en las ecuaciones (2.73) y (2.74). Las funciones son soluciones exactas a este Hamiltoniano cuando  $\kappa \rightarrow 0$ . Como estas funciones son soluciones exactas del Hamiltoniano en la ecuación (2.10) entonces los parámetros variacionales obtenidos de la optimización  $a = \omega'^2$  y  $b = c = \omega'^2 \pm 3\lambda'^2$  pueden relacionarse con los términos efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$ . La energía variacional, sin embargo, no es la misma que la obtenida por la sustitución de  $\omega'$  y  $\lambda'$  en la ecuación (2.17). De esta manera un Hamiltoniano efectivo con términos de uno y dos cuerpos puede definirse a partir del Hamiltoniano con términos de uno, dos y tres cuerpos. Este Hamiltoniano efectivo en coordenadas canónicas es

$$H_e = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right) + \frac{1}{2}\omega'^2(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \pm \frac{1}{2}\lambda'^2[(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - x_3)^2 + (x_2 - x_3)^2]. \quad (2.75)$$

Los cálculos variacionales se pueden realizar en las coordenadas canónicas o de Jacobi. Donde ambas representaciones en espacio de posición conducen a los mismos resultados.

Los potenciales efectivos en estos sistemas de osciladores han sido objeto de reciente interés [59, 60]. Por otro lado las funciones de onda en espacio de momentos se obtienen sustituyendo  $\alpha_i$  por  $\frac{1}{a}, \frac{1}{b}$  y  $\frac{1}{c}$  en las ecuaciones (2.14)-(2.15) respectivamente.

## Capítulo 3

# Medidas de localización

La teoría de información ofrece herramientas para el estudio de variables aleatorias  $(x, y)$  asociadas con una función de probabilidad conjunta o de densidad. Sin embargo, las dos medidas de localización más conocidas son la entropía y la desviación estándar. Además dichas definiciones se generalizan para estudiar sistemas  $n$ -dimensionales en espacio de posición y espacio de momentos.

### 3.1. Entropía de Shannon

C. E. Shannon [11] dio una interpretación de la cantidad

$$S(p) = - \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i, \quad (3.1)$$

como una medida de la incertidumbre o medida de la información. En donde  $p_i$  representa la probabilidad del  $i$ -ésimo evento. Es decir, los valores  $p_i$  provienen de una función que da la probabilidad de que una variable aleatoria discreta sea exactamente igual a algún valor. En este caso se cumple con la definición de probabilidad

$$0 \leq p_i \leq 1, \quad (3.2)$$

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1. \quad (3.3)$$

La ecuación (3.1) se utiliza en el contexto del estudio de variables discretas.

En un principio Shannon definió la cantidad de información asociada con  $p_i$  como

$$I(p_i) = \ln \frac{1}{p_i} = - \ln p_i, \quad (3.4)$$

por lo que podemos considerar que el valor esperado de  $I(p_i)$  corresponde a la cantidad promedio de información  $S(p)$  definida en la ecuación (3.1)

$$S(p) = \sum_{i=1}^N p_i I(p_i). \quad (3.5)$$

Por otro lado en el caso de variables continuas la definición de la entropía de Shannon diferencial esta dada por

$$S(f(x)) = - \int f(x) \ln[f(x)] dx, \quad (3.6)$$

donde la entropía diferencial  $S(f(x))$  queda definida por la función de densidad de probabilidad  $f(x)$  de la variable aleatoria continua  $X$ , tal que

$$f(x) \geq 0, \quad (3.7)$$

$$\int f(x) dx = 1. \quad (3.8)$$

Una observación importante es que el integrando  $f(x) \ln[f(x)]$  en la ecuación (3.6) debe ser Riemann integrable para que la integral exista y en consecuencia también la entropía diferencial. El espacio de integración (o intervalo de integración) que se conoce como el conjunto de soporte de la variable aleatoria depende del problema a estudiar.

Por definición tanto en la versión discreta como en la continua la entropía de Shannon cumple que

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} x \ln x = 0. \quad (3.9)$$

La interpretación de la entropía de Shannon es que para valores más grandes de la entropía la densidad está más deslocalizada, mientras que para valores más pequeños de la entropía la densidad está más localizada.

### 3.1.1. Entropía de Shannon multivariada

A continuación definimos las entropías de tres variables en espacio de posición  $(x_1, x_2, x_3)$  y en espacio de momentos  $(p_1, p_2, p_3)$  en términos de la función de onda como

$$S_x^3 = S_\Psi = - \int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 \ln [|\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2] dx_1 dx_2 dx_3, \quad (3.10)$$

$$S_p^3 = S_\Phi = - \int |\Phi(p_1, p_2, p_3)|^2 \ln [|\Phi(p_1, p_2, p_3)|^2] dp_1 dp_2 dp_3. \quad (3.11)$$

### CAPÍTULO 3

---

Estas distribuciones de tres variables pueden reducirse integrando sobre cualquiera de las tres variables debido a la indistinguibilidad. Por lo que, las distribuciones de dos variables o marginales son

$$\Gamma(x_1, x_2) = \int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_3, \quad (3.12)$$

$$\Pi(p_1, p_2) = \int |\Phi(p_1, p_2, p_3)|^2 dp_3, \quad (3.13)$$

y las correspondientes entropías de Shannon de las densidades reducidas

$$S_x^2 = S_\Gamma = - \int \Gamma(x_1, x_2) \ln [\Gamma(x_1, x_2)] dx_1 dx_2, \quad (3.14)$$

$$S_p^2 = S_\Pi = - \int \Pi(p_1, p_2) \ln [\Pi(p_1, p_2)] dp_1 dp_2. \quad (3.15)$$

Al realizar una reducción a la densidad de pares por integración obtenemos las densidades de una variable

$$\rho(x) = \int \Gamma(x_1, x_2) dx_2, \quad (3.16)$$

$$\pi(p) = \int \Pi(p_1, p_2) dp_2, \quad (3.17)$$

y las entropías de Shannon de las distribuciones de una variable

$$S_x = S_\rho = - \int \rho(x) \ln[\rho(x)] dx, \quad (3.18)$$

$$S_p = S_\pi = - \int \pi(p) \ln[\pi(p)] dp. \quad (3.19)$$

Las variables son indistinguibles entonces se cumple que  $\rho(x_1) = \rho(x_2) = \rho(x_3)$  y  $\Gamma(x_1, x_2) = \Gamma(x_1, x_3) = \Gamma(x_2, x_3)$ , lo mismo ocurre en el espacio de momentos. Por lo anterior el subíndice se ha suprimido en las densidades de una variable para enfatizar la indistinguibilidad. Los límites de integración no se especifican pero están en el rango  $[-\infty, \infty]$  por tratarse de sistemas con osciladores armónicos. Además todas las densidades están normalizadas a la unidad

$$\int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_1 dx_2 dx_3 = \int \Gamma(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int \rho(x) dx = 1, \quad (3.20)$$

$$\int |\Phi(p_1, p_2, p_3)|^2 dp_1 dp_2 dp_3 = \int \Pi(p_1, p_2) dp_1 dp_2 = \int \pi(p) dp = 1. \quad (3.21)$$

### 3.1.2. Entropía relativa

En el caso de variables continuas considerando dos distribuciones de probabilidad  $f(x)$  y  $g(x)$  la entropía relativa (clásica o conmutativa) se define como

$$S(f(x), g(x)) = \int f(x) \ln \left[ \frac{f(x)}{g(x)} \right] dx, \quad (3.22)$$

para que la medida esté bien definida el soporte de  $f(x)$  debe estar contenido en el soporte de  $g(x)$  y se deben compartir los mismos ceros en ambas funciones. El integrando en la ecuación (3.22) puede separarse en dos términos

$$S(f(x), g(x)) = \int f(x) \ln f(x) dx - \int f(x) \ln g(x) dx, \quad (3.23)$$

donde el primer término corresponde a la entropía de Shannon multiplicada por un signo negativo y el segundo término a la entropía cruzada o *surprisal*.

La entropía relativa es una medida de la distancia estadística entre dos estados en los casos discreto y continuo. El concepto de entropía relativa [61] que proviene de la teoría de la información se ha aplicado a otras disciplinas como la mecánica estadística, sistemas complejos y estructuras disipativas [62, 63, 64]. En el contexto de teoría de la información a la ecuación dada en (3.22) se le conoce también como divergencia de Kullback-Leibler [12].

La entropía relativa se puede definir para el caso multivariado, por lo que la siguiente definición se usará posteriormente

$$S(x|y) = - \int f(x, y) \ln[f(x|y)] dx dy, \quad (3.24)$$

esta es la entropía diferencial condicional, donde  $f(x|y) = \frac{f(x,y)}{g(y)}$  corresponde a la función de densidad condicional de  $X$  dado que  $Y$  toma el valor de  $y$ . Así  $S(x|y)$  representa la incertidumbre que tenemos sobre la variable  $x$  después de obtener información de la variable  $y$ .

## 3.2. Desviación estándar

La desviación estándar es una medida estadística que se utiliza para cuantificar la variación o la dispersión de una variable aleatoria

$$\sigma_x = \left( E[(x - \langle x \rangle)^2] \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.25)$$

en particular para una variable aleatoria  $x$  con función de densidad de probabilidad  $f(x)$

$$\sigma_x = \left( \int (x - \langle x \rangle)^2 f(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.26)$$

también se define la dispersión en el espacio de momentos con la respectiva densidad de probabilidad  $f(p)$

$$\sigma_p = \left( \int (p - \langle p \rangle)^2 f(p) dp \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.27)$$

En el caso de densidades de probabilidad cuando  $\sigma_x$  es pequeño indica que la densidad se concentra o tiende a localizarse, mientras que cuando  $\sigma_x$  es grande indica que la densidad se extiende o tiende a deslocalizarse. Debido a la interpretación de la desviación estándar esta es análoga a la entropía de Shannon para una variable.

La varianza es una medida del grado de dispersión de la variable aleatoria y se define en ambos espacios como

$$\sigma_x^2 = E[(x - \langle x \rangle)^2] \geq 0, \quad (3.28)$$

$$\sigma_p^2 = E[(p - \langle p \rangle)^2] \geq 0. \quad (3.29)$$

El principio de incertidumbre se define en términos de la desviación estándar [9], el cual se reformula en términos de las entropías (3.30).

### 3.3. Suma entrópica

Como se ha mencionado es fundamental examinar la propiedad de no conmutatividad de los operadores de posición  $\hat{x}$  y momento  $\hat{p}$  ya que esto conduce al principio de incertidumbre de Heisenberg (1.16) donde el producto de las dispersiones de dos variables canónicas conjugadas que no conmutan está acotado por cierta cantidad que depende del valor esperado de su conmutador.

Debido a lo anterior es posible realizar el estudio de la información en espacio de posición y/o momento mediante las relaciones de incertidumbre de Heisenberg y el principio de incertidumbre entrópico de una variable

$$S_x + S_p \geq 1 + \ln \pi, \quad (3.30)$$

así la relación de incertidumbre se expresa directamente en términos de las entropías  $S_x$  y  $S_p$  que son medidas de incertidumbre utilizadas en la teoría de la información [65]. El estudio de la relación de incertidumbre en términos de las entropías de Shannon [65, 66] ha llevado a las relaciones de incertidumbre entrópica en  $D$ - dimensiones [67, 68, 69]

$$S_T^D = S_x^D + S_p^D \geq D \ln(e\pi\hbar). \quad (3.31)$$

En este trabajo estamos interesados en sistemas con tres variables, por lo que definimos las sumas entrópicas asociadas a una, dos y tres variables. La suma entrópica para una variable

$$S_x + S_p = - \int \rho(x_1)\pi(p_1) \ln [\rho(x_1)\pi(p_1)] dx_1 dp_1, \quad (3.32)$$

donde se cumple la cota

$$S_x + S_p \geq 1 + \ln \pi. \quad (3.33)$$

La suma entrópica para dos variables

$$S_x^2 + S_p^2 = - \int \Gamma(x_1, x_2)\Pi(p_1, p_2) \ln [\Gamma(x_1, x_2)\Pi(p_1, p_2)] dx_1 dx_2 dp_1 dp_2, \quad (3.34)$$

donde se cumple la cota

$$S_x^2 + S_p^2 \geq 2(1 + \ln \pi). \quad (3.35)$$

La suma entrópica para tres variables

$$S_x^3 + S_p^3 = - \int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 |\Phi(p_1, p_2, p_3)|^2 \ln [|\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 |\Phi(p_1, p_2, p_3)|^2] \\ \times dx_1 dx_2 dx_3 dp_1 dp_2 dp_3, \quad (3.36)$$

donde se cumple la cota

$$S_x^3 + S_p^3 \geq 3(1 + \ln \pi). \quad (3.37)$$

### 3.4. Entropías basadas en densidades acumulativas

En la definición de la entropía de Shannon diferencial dada en (3.18) la densidad  $\rho(x)$  debe normalizar a la unidad, pero  $\rho(x)$  no necesariamente está acotada como en el caso discreto lo cual puede generar valores negativos en la entropía. Además, se ha debatido sobre la consistencia dimensional, en particular cuando la densidad dentro del argumento logarítmico contiene unidades [38, 70].

Un enfoque para superar las dificultades que presenta la entropía diferencial es examinar las densidades de probabilidad acumulativas en lugar de la densidad original  $\rho(x)$ . En este sentido las densidades acumulativas están acotadas por la unidad, son positivas-definidas y son adimensionales.

### 3.4.1. Entropías de distribuciones acumulativas de una variable

Las densidades residuales acumulativas o de supervivencia  $su_x(a)$  y las densidades acumulativas  $cu_x(a)$  se definen como

$$su_x(a) = P(x > a) = \int_a^{\infty} \rho(x)dx = 1 - cu_x(a), \quad (3.38)$$

donde

$$cu_x(a) = P(x \leq a) = \int_{-\infty}^a \rho(x)dx. \quad (3.39)$$

En particular, se puede definir una entropía para la densidad  $su_x(a)$  dada por

$$\epsilon_a = - \int_{-\infty}^{\infty} su_x(a) \ln su_x(a) da. \quad (3.40)$$

Esta definición se conoce como entropía residual acumulativa (CRE) [71]. Las definiciones entrópicas para la densidad acumulativa  $cu_x(a)$  también se han considerado [71]. Las interpretaciones obtenidas de  $\epsilon_a$  y  $S_x$  son de naturaleza consistente cuando se aplican a sistemas cuánticos de variables continuas aunque existen diferencias [72].

### 3.4.2. Entropías de distribuciones acumulativas de dos variables

Una distribución de probabilidad acumulativa conjunta se puede definir en términos de la distribución principal de dos variables como

$$cu_x(a, b) = P(x_1 \leq a, x_2 \leq b) = \int_{-\infty}^a \int_{-\infty}^b \Gamma(x_1, x_2) dx_1 dx_2, \quad (3.41)$$

mientras que la densidad acumulativa residual conjunta es

$$su_x(a, b) = P(x_1 > a, x_2 > b) = \int_a^{\infty} \int_b^{\infty} \Gamma(x_1, x_2) dx_1 dx_2. \quad (3.42)$$

Ahora usamos la densidad acumulativa residual para definir la entropía residual acumulativa de pares como análoga a la entropía de Shannon de pares

$$\epsilon_{ab} = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} su_x(a, b) \ln su_x(a, b) da db, \quad (3.43)$$

sin embargo, esta definición no se puede aplicar ya que la integral diverge en el caso de soporte infinito. En el caso de soporte finito dicha entropía sí es convergente.

En la definición de la entropía diferencial tenemos que las entropías de Shannon de una y dos variables están relacionadas por

$$S_\Gamma = S_x + S(x_2|x_1), \quad (3.44)$$

donde el segundo término es una entropía condicional o un valor esperado condicional

$$E[S(x_2|x_1)] = S(x_2|x_1) = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x_1, x_2) \ln \left[ \frac{\Gamma(x_1, x_2)}{\rho(x_1)} \right] dx_1 dx_2. \quad (3.45)$$

Así, por analogía para obtener una definición adecuada de la entropía residual acumulativa de pares usamos la entropía residual acumulativa conjunta (*JCRE*) [71] dada por la ecuación (3.44)

$$JCRE = \epsilon_a + E[\epsilon(b|x_1)], \quad (3.46)$$

donde el último término

$$E[\epsilon(b|x_1)] = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(x_1, x_2 > b) \ln \left[ \frac{P(x_1, x_2 > b)}{\rho(x_1)} \right] db dx_1, \quad (3.47)$$

es el valor esperado de

$$\epsilon(b|x_1) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(x_1, x_2 > b)}{\rho(x_1)} \ln \left[ \frac{P(x_1, x_2 > b)}{\rho(x_1)} \right] db, \quad (3.48)$$

con

$$P(x_1, x_2 > b) = \int_b^{\infty} \Gamma(x_1, x_2) dx_2, \quad (3.49)$$

$E[\epsilon(b|x_1)] = E[\epsilon(a|x_2)]$  por tratarse de partículas indistinguibles. Los comportamientos de  $S_\Gamma$  y *JCRE* han sido comparados y contrastados en sistemas cuánticos de dos partículas [72].

Una forma alternativa para definir entropías modificadas de dos variables es a través de la entropía residual acumulativa conjunta modificada (*mJCRE*)

$$mJCRE = - \int_{-\infty}^{\infty} su_x(a, a) \ln su_x(a, a) da, \quad (3.50)$$

donde  $su_x(a, b)$  se obtiene a partir de la densidad reducida de dos partículas  $\Gamma(x_1, x_2)$ . Así, *mJCRE* se considera una generalización de  $\epsilon_{ab}$  en ecuación (3.43) donde se fija  $b = a$ , lo cual evita la divergencia en la integral.

### 3.4.3. Entropías de distribuciones acumulativas de tres variables

Como este trabajo está orientado al estudio de la información en sistemas cuánticos de tres variables se propone construir una definición de la entropía de tres variables en términos de la densidad acumulativa. En este punto usamos una relación en cadena para la entropía de tres variables [12] similar a la ecuación (3.44)

$$S_{\Psi} = S_x + S(x_2|x_1) + S(x_3|x_1x_2) = S_{\Gamma} + S(x_3|x_1x_2), \quad (3.51)$$

donde el último término es un valor esperado condicional

$$E[S(x_3|x_1x_2)] = S(x_3|x_1x_2) = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 \times \ln \left[ \frac{|\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2}{\Gamma(x_1, x_2)} \right] dx_1 dx_2 dx_3. \quad (3.52)$$

la ecuación (3.51) se puede utilizar para obtener una expresión análoga para la entropía residual acumulativa de tres variables (*TCRE*)

$$TCRE = \epsilon_a + E[\epsilon(b|x_1)] + E[\epsilon(c|x_1x_2)] = JCRE + E[\epsilon(c|x_1x_2)], \quad (3.53)$$

donde

$$\epsilon(c|x_1x_2) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(x_1, x_2, x_3 > c)}{\Gamma(x_1, x_2)} \ln \left[ \frac{P(x_1, x_2, x_3 > c)}{\Gamma(x_1, x_2)} \right] dc, \quad (3.54)$$

y

$$E[\epsilon(c|x_1x_2)] = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(x_1, x_2, x_3 > c) \times \ln \left[ \frac{P(x_1, x_2, x_3 > c)}{\Gamma(x_1, x_2)} \right] dx_1 dx_2 dc, \quad (3.55)$$

con

$$P(x_1, x_2, x_3 > c) = \int_c^{\infty} |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_3. \quad (3.56)$$

Enfatizamos el hecho que la definición de *TCRE* no se ha presentado antes ni se ha estudiado en sistemas cuánticos de variables continuas.

## Capítulo 4

# Medidas de correlación estadística: de pares

El concepto de correlación estadística por pares es estándar y se ha utilizado en muchos campos de la ciencia. En este sentido tanto la información mutua como el coeficiente de correlación se han aplicado para estudiar la correlación en sistemas cuánticos [10, 35, 73, 74]. También se ha demostrado que las interpretaciones obtenidas de estas dos medidas no siempre son consistentes [74, 75]. En esta sección introducimos algunas definiciones de medidas de pares estudiadas y desarrolladas para entender los sistemas de osciladores a través de las medidas de correlación. En este capítulo y en el siguiente las definiciones se presentan en espacio de posición pero las correspondientes definiciones en espacio de momentos se obtienen sustituyendo las respectivas densidades de momentos.

### 4.1. Información mutua

La correlación por pares entre dos variables puede ser cuantificada en términos de la información mutua (IM) [12, 53, 73, 74, 76]

$$\begin{aligned} I_x = I(x_1, x_2) &= \int \Gamma(x_1, x_2) \ln \left[ \frac{\Gamma(x_1, x_2)}{\rho(x_1)\rho(x_2)} \right] dx_1 dx_2 \geq 0, \\ &= S_x - S(x_1|x_2) \\ &= 2S_x - S_\Gamma, \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde la entropía condicional se define como [12, 77]

$$S(x_1|x_2) = - \int \Gamma(x_1, x_2) \ln \left[ \frac{\Gamma(x_1, x_2)}{\rho(x_1)} \right] dx_1 dx_2, \quad (4.2)$$

en este punto la información mutua se puede interpretar como la diferencia entre la entropía reducida de una variable y la entropía condicional, es decir, la entropía con conocimiento de la otra variable. La información mutua es una medida que crece mientras las variables  $(x_1, x_2)$  están más correlacionadas. En el caso de partículas no interactuantes la información mutua es igual a cero ya que las partículas no se encuentran correlacionadas. Las correspondientes medidas de información mutua en el espacio de momentos se obtienen sustituyendo  $\Gamma(x_1, x_2)$  con  $\Pi(p_1, p_2)$  y  $\rho(x)$  con  $\pi(p)$ .

Por otro lado la forma normalizada de la información mutua se define como

$$I_x^N = \frac{2S_x - S_{x_1x_2}}{2S_x} = 1 - \frac{S_{x_1x_2}}{2S_x}. \quad (4.3)$$

dicha normalización se encuentra acotada entre  $0 \leq I_x^N \leq 1$ . El valor 0 indica que  $x_1$  y  $x_2$  no tienen correlación, el valor 1 indica que el conocimiento de  $x_1$  predice completamente el de  $x_2$ .

## 4.2. El coeficiente de correlación y la matriz de correlación

El coeficiente de correlación corresponde a una forma normalizada de la covarianza  $Cov(x_1, x_2)$  la cual se define como

$$Cov(x_1, x_2) = E[(x_1 - \langle x_1 \rangle)(x_2 - \langle x_2 \rangle)]. \quad (4.4)$$

En forma general se pueden estudiar las densidades de dos variables considerando el análisis de los eigenvalores de la matriz de covarianza. Por lo que definimos la matriz de covarianza para tres partículas indistinguibles (con densidades reducidas)

$$M_{Cov} = \begin{pmatrix} \sigma_x^2 & Cov(x_1, x_2) & Cov(x_1, x_3) \\ Cov(x_2, x_1) & \sigma_x^2 & Cov(x_2, x_3) \\ Cov(x_3, x_1) & Cov(x_3, x_2) & \sigma_x^2 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

de la cual obtenemos los vectores propios  $\{d_1, d_2, d_3\}$

$$\{d_1, d_2, d_3\} = \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (4.6)$$

y los valores propios en términos de la varianza  $\sigma_x^2$  y la covarianza  $Cov(x_1, x_2)$

$$\{v_1, v_2, v_3\} = \{\sigma_x^2 - Cov(x_1, x_2), \sigma_x^2 - Cov(x_1, x_2), \sigma_x^2 + 2Cov(x_1, x_2)\}. \quad (4.7)$$

El coeficiente de correlación se ha utilizado para cuantificar y examinar la correlación de sistemas cuánticos [10, 35]. Por otro lado los comportamientos y propiedades de la información mutua y el coeficiente de correlación se han estudiado en sistemas cuánticos de dos partículas [74]. El coeficiente de correlación también se define en términos de la desviación estándar

$$\tau_x = \frac{Cov(x_1, x_2)}{\sigma_{x_1}\sigma_{x_2}} = \frac{\langle x_1x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle}{\sqrt{\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2} \sqrt{\langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2}}, \quad -1 \leq \tau_x \leq 1, \quad (4.8)$$

$\tau_x$  es sensible a las correlaciones lineales entre pares de variables  $x_1$  y  $x_2$ . Sin embargo, la información mutua es una medida más general de correlación la cual es capaz de detectar dependencias no lineales. Este coeficiente está acotado por valores que se encuentran entre uno y menos uno. Los valores positivos del coeficiente de correlación corresponden a situaciones donde las variables cambian en la misma dirección (relación directa), mientras que los valores negativos indican que las variables cambian en direcciones opuestas (relación inversa).

El valor esperado en términos de la densidad de pares  $\Gamma(x_1, x_2)$  es

$$\langle x_1^n x_2^m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x_1^n x_2^m \Gamma(x_1, x_2) dx_1 dx_2. \quad (4.9)$$

El valor esperado para la densidad de una variable  $\rho(x)$  es

$$\langle x_1^n \rangle = \langle x_2^n \rangle = \langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^n \rho(x) dx, \quad (4.10)$$

los valores esperados con  $n$  y  $m$  par son positivos.

La ecuación (4.8) se reduce a

$$\tau_x = \frac{\langle x_1x_2 \rangle - \langle x \rangle^2}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad (4.11)$$

para variables indistinguibles, además si las distribuciones son simétricas o con media cero  $\langle x \rangle = 0$  se simplifica como

$$\tau_x = \frac{\langle x_1x_2 \rangle}{\langle x^2 \rangle}. \quad (4.12)$$

En este sentido una característica de los sistemas con osciladores es que poseen distribuciones simétricas.

La correlación por pares se puede estudiar considerando el análisis de los valores propios de la matriz de correlación correspondiente. En este caso la matriz de correlación para sistemas de tres partículas indistinguibles es

$$M_\tau = \begin{pmatrix} 1 & \tau(x_1, x_2) & \tau(x_1, x_3) \\ \tau(x_2, x_1) & 1 & \tau(x_2, x_3) \\ \tau(x_3, x_1) & \tau(x_3, x_2) & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

donde todos los elementos  $\tau$  son iguales. Los vectores propios son

$$\{e_1, e_2, e_3\} = \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (4.14)$$

los valores propios correspondientes expresados en términos del coeficiente de correlación  $\tau$  son

$$\{\nu_1, \nu_2, \nu_3\} = \{1 - \tau, 1 - \tau, 1 + 2\tau\}, \quad (4.15)$$

los dos valores propios diferentes son iguales cuando  $\tau$  es cero.

### 4.3. Medidas de correlación estadística de pares basadas en distribuciones acumulativas

La segunda expresión dada en la ecuación (4.1) se puede utilizar para establecer una definición análoga de la información mutua en términos de entropías acumulativas llamada la entropía residual acumulativa cruzada (*CCRE*) [71, 78, 79],

$$CCRE = \epsilon_a - E[\epsilon(b|x_1)]. \quad (4.16)$$

*CCRE* y *IM* se han comparado en sistemas cuánticos de dos partículas [72].

Además, una forma alternativa de la entropía residual acumulativa cruzada modificada (*mCCRE*) se define como

$$mCCRE = 2\epsilon_a - mJCRE. \quad (4.17)$$

### 4.4. Medidas de correlación estadística de pares basadas en momentos de orden superior

Con frecuencia se afirma que la información mutua es capaz de detectar correlaciones no lineales mientras que el coeficiente de correlación solo detecta correlaciones lineales. En este punto planteamos la siguiente pregunta ¿es posible capturar tendencias no lineales

considerando definiciones similares al coeficiente de correlación o covarianza pero basadas en momentos de orden superior de la distribución?

Bohm sugirió una definición de las covarianzas generalizadas [80] que puede reformularse de la siguiente forma

$$Cov(x_1^n, x_2^m) = \langle x_1^n x_2^m \rangle - \langle x_1^n \rangle \langle x_2^m \rangle, \quad (4.18)$$

esta nueva definición se usa para captar correlaciones sutiles. En nuestro caso por tratarse de variables indistinguibles tenemos que  $n = m = 2$ , por lo que el coeficiente de correlación basado en la definición de covarianza generalizada es

$$\tau_{x^2} = \frac{Cov(x_1^2, x_2^2)}{\sigma_{x_1^2} \sigma_{x_2^2}} = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 \rangle - \langle x_1^2 \rangle \langle x_2^2 \rangle}{\sqrt{\langle x_1^4 \rangle - \langle x_1^2 \rangle^2} \sqrt{\langle x_2^4 \rangle - \langle x_2^2 \rangle^2}} = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 \rangle - \langle x^2 \rangle^2}{\langle x^4 \rangle - \langle x^2 \rangle^2}, \quad (4.19)$$

donde la última igualdad corresponde a variables indistinguibles.

Uno de los objetivos en este trabajo es comparar y contrastar los comportamientos de  $\tau_x$ ,  $\tau_{x^2}$  y  $I_x$  como medidas de correlación por pares en sistemas cuánticos. Los denominadores de  $\tau_x$  y  $\tau_{x^2}$  son de interés ya que son medidas de las distribuciones marginales subyacentes. También estudiamos las relaciones entre la covarianza generalizada en el denominador de la ecuación (4.19) y otras medidas existentes.

La cokurtosis [81, 82] de dos variables se define como

$$Cok(x_1, x_2) = \frac{E\left[(x_1 - \langle x_1 \rangle)^n (x_2 - \langle x_2 \rangle)^m\right]}{\sigma_{x_1}^n \sigma_{x_2}^m}, \quad (4.20)$$

esta medida es de interés en diferentes contextos [83, 84, 85, 86, 87]. Expandiendo el numerador para  $n = m = 2$  tenemos

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 x_2^2 \rangle - Cov(x_1^2, x_2) \langle x_2 \rangle - Cov(x_1, x_2^2) \langle x_1 \rangle + 4Cov(x_1, x_2) \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle \\ - \langle x_1^2 x_2 \rangle \langle x_2 \rangle - \langle x_1 x_2^2 \rangle \langle x_1 \rangle + \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle^2, \end{aligned} \quad (4.21)$$

para distribuciones simétricas el primer término es el único que permanece

$$Cok(x_1, x_2) = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 \rangle}{\sigma_{x_1}^2 \sigma_{x_2}^2} = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle^2} > 0, \quad (4.22)$$

donde se ha utilizado la indistinguibilidad de variables. Esta expresión se puede relacionar con la covarianza generalizada en el numerador de la ecuación (4.19) como

$$\frac{Cov(x_1^2, x_2^2)}{\langle x^2 \rangle^2} = Cok(x_1, x_2) - 1. \quad (4.23)$$

Por lo tanto, existe una relación entre la covarianza generalizada y la cokurtosis. Además, se sabe que la cokurtosis para una distribución Gaussiana o normal [88] se puede expresar en términos del coeficiente de correlación como

$$Cok^G(x_1, x_2) = 1 + 2\tau_x^2, \quad (4.24)$$

esta ecuación muestra cómo la cokurtosis de pares está asociada con una medida de correlación entre pares. Por lo anterior la novedad del estudio de la cokurtosis está en su aplicación al utilizar partículas indistinguibles donde  $n = m$  en ecuación (4.20).

## Capítulo 5

# Medidas de correlación estadística: de tres variables y de órdenes altos

Las correlaciones de orden superior que representan las interacciones como grupo entre varias variables (partículas) y que van más allá de las interacciones por pares se han estudiado poco. Existe un gran interés en cuantificar las correlaciones de orden superior o triple en varias disciplinas, que van desde las neurociencias [89, 90, 91], hasta las aplicaciones en el análisis de big data [92]. Se han examinado medidas de orden superior en sistemas con distribuciones discretas [26, 93], pero se ha hecho poco para extender estos estudios a sistemas de variables continuas [27].

### 5.1. Información mutua de tres variables

También se puede considerar información de orden superior que mide la correlación entre tres variables. Existen diferentes formas de definir dicha medida, una de estas es la correlación total [94, 95]

$$\begin{aligned} I_3^x &= \int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 \ln \left[ \frac{|\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2}{\rho(x_1)\rho(x_2)\rho(x_3)} \right] dx_1 dx_2 dx_3, \\ &= 3S_x - S_\Psi \geq 0, \end{aligned} \quad (5.1)$$

y mide los distintos tipos de correlaciones en el sistema.  $I_3^x$  es una entropía relativa entre una distribución de tres variables y el producto de sus marginales de una variable. La correlación total también puede normalizarse

$$I_3^N = \frac{3S_x - S_{x_1 x_2 x_3}}{3S_x} = 1 - \frac{S_{x_1 x_2 x_3}}{3S_x}, \quad (5.2)$$

con cotas entre cero y uno.

### 5.1.1. Correlación de orden alto

Por otro lado la información mutua de tercer orden, también conocida como información de interacción [12, 26, 27, 93, 96, 97] mide la correlación o interacción compartida entre las tres partículas se define como

$$I_x^3 = I(x_1, x_2 | x_3) - I(x_1, x_2) \quad (5.3)$$

donde el primer término corresponde a la información mutua condicional con lo cual

$$\begin{aligned} I_x^3 &= \int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 \ln \left[ \frac{|\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 \rho(x_3)}{\Gamma(x_1, x_3) \Gamma(x_2, x_3)} \right] dx_1 dx_2 dx_3 - (2S_x - S_\Gamma), \\ &= 3S_\Gamma - 3S_x - S_\Psi, \end{aligned} \quad (5.4)$$

a diferencia de la información mutua de pares la información mutua de tercer orden puede ser negativa en el caso de variables continuas. Una pregunta abierta es sobre la naturaleza del signo de  $I_x^3$  y su relación con las propiedades del sistema. Se han utilizado versiones discretas en neurociencias para medir cómo se activan las neuronas como grupo [89, 90, 91] y también en el estudio de estructura de proteínas [98].

La información mutua de tercer orden puede reescribirse como

$$I_x^3 = I(x_1; x_2, x_3) - I(x_1, x_2) - I(x_1, x_3), \quad (5.5)$$

o

$$\begin{aligned} I_x^3 &= \int |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 \ln \left[ \frac{|\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2}{\rho(x_1) \Gamma(x_2, x_3)} \right] dx_1 dx_2 dx_3 \\ &\quad - I(x_1, x_2) - I(x_1, x_3), \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$I_x^3 = (S_\Gamma + S_x - S_\Psi) - 2I_x, \quad (5.7)$$

en este caso los tres términos en ecuación (5.5) corresponden a informaciones mutuas (entropías relativas) y por lo tanto deben ser mayores o iguales a cero por construcción. Los dos últimos términos en esta misma ecuación corresponden a interacciones entre pares que pueden considerarse redundantes (redundancia) en correlaciones de orden superior. Lo que resulta interesante es el primer término en ecuación (5.7) que contiene las correlaciones entre las tres variables y se denomina sinergia.

Uno puede escribir

$$I_x^3(x_1, x_2, x_3) = I_3^x(x_1, x_2, x_3) - 3I_x, \quad (5.8)$$

donde la información de tercer orden es la correlación total menos las correlaciones por pares. Es decir, tenemos una medida de correlación más allá de los pares que mide la correlación entre las tres variables. Tomando la diferencia ( $I_3^x - I_x^3$ ) obtenemos  $3I_x$ , aquí se muestra que las correlaciones incluidas en  $I_3^x$  no están presentes en  $I_x^3$  y son pares.

## 5.2. Medidas de correlación estadística de tres variables basadas en distribuciones acumulativas

Una medida de información de tres variables es la correlación acumulativa total ( $TcCCRE$ ) la cual corresponde al análogo de la correlación total (5.1). Esta se define en términos de la entropía residual acumulativa de una variable (3.40) y la entropía residual acumulativa de tres variables (3.53)

$$TcCCRE = 3CRE - TCRE. \quad (5.9)$$

Por otro lado se puede obtener una expresión para la correlación de orden superior o de tercer orden basada en densidades acumulativas ( $TCCRE$ ) sustituyendo las expresiones por  $S_\Psi$  y  $S_\Gamma$  de las ecuaciones (3.51) y (3.44) en la ecuación (5.7) tal que

$$\begin{aligned} TCCRE &= 2E[\epsilon(b|x_1)] - \epsilon_a - E[\epsilon(c|x_1x_2)], \\ &= (JCRE + CRE - TCRE) - 2CCRE. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Tanto  $TcCCRE$  como  $TCCRE$  no han sido discutidos previamente en la literatura.

## 5.3. Medidas de correlación estadística de tres variables basadas en momentos de orden superior

También es posible ampliar el concepto de coeficiente de correlación para considerar correlaciones de tercer orden utilizando momentos de la distribución. De acuerdo a lo anterior podemos definir la correlación en términos de cumulantes conjuntos. En este punto se establece que el tercer cumulante conjunto  $K_3$  es una extensión de la covarianza con tres variables

$$K_3 = K(x_1x_2x_3) = E\left[(x_1 - \langle x_1 \rangle)(x_2 - \langle x_2 \rangle)(x_3 - \langle x_3 \rangle)\right], \quad (5.11)$$

al expandir los términos para variables indistinguibles tenemos que

$$\begin{aligned} K_3 &= \langle x_1x_2x_3 \rangle - 3\langle x_1x_2 \rangle \langle x \rangle + 2\langle x \rangle^3, \\ &= [\langle x_1x_2x_3 \rangle - \langle x_1x_2 \rangle \langle x \rangle] - 2Cov(x_1, x_2) \langle x \rangle. \end{aligned} \quad (5.12)$$

La expresión anterior es de naturaleza similar por construcción a la ecuación (5.7). Tomando la diferencia entre  $\langle x_1x_2x_3 \rangle - \langle x \rangle^3$  y  $K_3$  se obtiene  $3Cov(x_1, x_2) \langle x \rangle$ . Esta expresión cuantifica la correlación de pares y se asemeja al término  $3I_x$  que se obtiene de la diferencia ( $I_3^x - I_x^3$ ).

Los valores esperados de órdenes altos se definen en términos de la función de onda para sistemas de tres partículas como

$$\langle x_1^n x_2^m x_3^l \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x_1^n x_2^m x_3^l |\Psi(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_1 dx_2 dx_3. \quad (5.13)$$

Lo más importante es que  $\kappa_3 = 0$  para distribuciones Gaussianas donde  $\langle x_1 x_2 x_3 \rangle$  y  $\langle x \rangle$  son cero. Por lo tanto, el cumulante conjunto no puede medir la correlación entre las tres variables, así la interpretación es que no existe correlación en este caso. Los cumulantes han sido estudiados en aplicaciones a la química cuántica [99].

En este punto queremos plantear si es posible utilizar definiciones con momentos de orden superior para construir medidas que son distintas de cero para distribuciones Gaussianas. Además, ¿existe una forma en la que se puedan encontrar medidas basadas en momentos de orden superior pero donde se utiliza la teoría de la información como guía para obtener nuevas medidas?

Las medidas basadas en momentos tienen beneficios ya que con frecuencia estos momentos se pueden obtener de forma analítica mientras que el cálculo de las entropías de Shannon suele requerir de una integración numérica.

La diferencia entre la distribución de tres variables y el producto de sus marginales representado por la correlación total ( $I_3^x$ ) puede reconstruirse con el uso de momentos de orden superior como

$$\mu_{x^2} = \langle x_1^2 x_2^2 x_3^2 \rangle - \langle x^2 \rangle^3, \quad (5.14)$$

para variables indistinguibles. Aquí,  $\mu_{x^2}$  es distinto de cero para distribuciones de tipo Gaussiano en contraste con el tercer cumulante conjunto.

La cokurtosis de tres variables es

$$Cok(x_1, x_2, x_3) = \frac{E\left[(x_1 - \langle x_1 \rangle)^n (x_2 - \langle x_2 \rangle)^m (x_3 - \langle x_3 \rangle)^l\right]}{\sigma_{x_1}^n \sigma_{x_2}^m \sigma_{x_3}^l}, \quad (5.15)$$

al expandir el numerador con  $n = m = l = 2$ , tenemos

$$\begin{aligned} & \langle x_1^2 x_2^2 x_3^2 \rangle - Cov(x_1^2, x_2) \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle^2 - \langle x_1^2 x_2 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle^2 - Cov(x_1, x_2^2) \langle x_1 \rangle \langle x_3 \rangle^2 \\ & - \langle x_1 x_2^2 \rangle \langle x_1 \rangle \langle x_3 \rangle^2 - Cov(x_2, x_3^2) \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle - \langle x_2 x_3^2 \rangle \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle - 5 \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle^2 \langle x_3 \rangle^2 \\ & - 8 \langle x_1 x_2 x_3 \rangle \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle + 4 \langle x_1 x_2 \rangle \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle^2 + 4 \langle x_1 x_3 \rangle \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle^2 \langle x_3 \rangle \\ & + 4 \langle x_2 x_3 \rangle \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle - 2 \langle x_1 x_2^2 x_3 \rangle \langle x_1 \rangle + \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2^2 x_3 \rangle - 2 \langle x_1^2 x_2 x_3 \rangle \langle x_2 \rangle + \langle x_2 \rangle^2 \langle x_1^2 x_3 \rangle \\ & - 2 \langle x_1^2 x_2^2 x_3 \rangle \langle x_3 \rangle + \langle x_3 \rangle^2 \langle x_1^2 x_2 \rangle + 4 \langle x_1^2 x_2 x_3 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle - 2 \langle x_1^2 x_3 \rangle \langle x_2 \rangle^2 \langle x_3 \rangle \\ & + 4 \langle x_1 x_2^2 x_3 \rangle \langle x_1 \rangle \langle x_3 \rangle - 2 \langle x_2^2 x_3 \rangle \langle x_1 \rangle^2 \langle x_3 \rangle + 4 \langle x_1 x_2 x_3^2 \rangle \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle - 2 \langle x_1 x_3^2 \rangle \langle x_2 \rangle^2 \langle x_1 \rangle. \end{aligned} \quad (5.16)$$

En distribuciones simétricas con variables indistinguibles el primer término es el único que permanece

$$Cok(x_1, x_2, x_3) = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 x_3^2 \rangle}{\sigma_{x_1}^2 \sigma_{x_2}^2 \sigma_{x_3}^2} = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 x_3^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle^3} > 0. \quad (5.17)$$

El numerador corresponde al primer término de  $\mu_{x^2}$ , mientras que el denominador corresponde al segundo término, por lo que

$$\frac{\mu_{x^2}}{\langle x^2 \rangle^3} = Cok(x_1, x_2, x_3) - 1, \quad (5.18)$$

donde la medida de momentos de orden superior que se modela con  $I_3^x$  usando la ecuación (5.14) está relacionada con la cokurtosis de tres variables.

### 5.3.1. Correlación de orden alto

En el intento de construir medidas de alto orden se han examinado medidas de asimetría multivariada y medidas de cokurtosis en alta dimensión para variables discretas [100, 101]. Además, en este caso se han introducido las matrices de información mutua [102, 103].

Sin embargo, nos planteamos la siguiente pregunta ¿es posible concebir una medida de correlación de orden alto usando momentos de orden superior y que sea similar en estructura a la ecuación (5.8)? En este sentido construimos la siguiente medida

$$\mu_{x^2}^2 = (\langle x_1^2 x_2^2 x_3^2 \rangle - \langle x^2 \rangle^3) - 3Cov(x_1^2, x_2^2), \quad (5.19)$$

en términos de momentos.

Una segunda propuesta se basa en tomar la diferencia entre la cokurtosis de dos variables y la cokurtosis de tres variables

$$\eta_x = 3Cok(x_1, x_2) - Cok(x_1, x_2, x_3) - 2, \quad (5.20)$$

se incluye el término constante  $-2$  para que la medida sea cero cuando la distribución es separable (sin correlación). Aquí vemos que los términos de dos y tres variables se invierten cuando se comparan con la ecuación (5.8).

La tercer propuesta es el cociente o razón entre la cokurtosis de tres variables y la

cokurtosis dos variables

$$\frac{E\left[(x_1 - \langle x_1 \rangle)^2(x_2 - \langle x_2 \rangle)^2(x_3 - \langle x_3 \rangle)^2\right]}{\sigma_{x_1}^2 \sigma_{x_2}^2 \sigma_{x_3}^2} / \left( \frac{E\left[(x_1 - \langle x_1 \rangle)^2(x_2 - \langle x_2 \rangle)^2\right]}{\sigma_{x_1}^2 \sigma_{x_2}^2} \frac{E\left[(x_1 - \langle x_1 \rangle)^2(x_3 - \langle x_3 \rangle)^2\right]}{\sigma_{x_1}^2 \sigma_{x_3}^2} \frac{E\left[(x_2 - \langle x_2 \rangle)^2(x_3 - \langle x_3 \rangle)^2\right]}{\sigma_{x_2}^2 \sigma_{x_3}^2} \right), \quad (5.21)$$

para el caso de distribuciones simétricas con variables indistinguibles tenemos

$$\eta_x^r = \frac{Cok(x_1, x_2, x_3)}{Cok(x_1, x_2)^3} = \frac{\langle x_1^2 x_2^2 x_3^2 \rangle \langle x^2 \rangle^3}{\langle x_1^2 x_2^2 \rangle^3}, \quad (5.22)$$

esta medida es mayor a uno cuando la cokurtosis de tres variables es mayor que la de dos variables y es menor a uno cuando la cokurtosis de dos variables es mayor.

Otra manera de abordar el análisis estadístico multivariado con momentos de orden superior es a través de las matrices de co-momentos [104]. También se han explorado las propiedades de la matriz de kurtosis y sus vectores propios como direcciones que muestran la estructura de grupo en conjuntos de datos [105]. Ahora basados en estas ideas pensamos que la correlación entre tres variables se puede estudiar usando el tensor de momentos de orden superior como una matriz de cokurtosis rectangular  $(n, n^3)$  [85, 106, 107, 108]. Por analogía con la matriz de correlación proponemos usar los bloques  $3 \times 3^3$  del tensor de cokurtosis para construir una matriz cuadrada de dimensión  $9 \times 9$  (matrización o despliegue del tensor). Cuyos elementos matriciales corresponden a momentos de orden superior como la kurtosis  $kur(x_i)$  y la cokurtosis  $Cok(x_i, x_j)$

$$M_C = \begin{pmatrix} kur(x) & 0 & 0 & 0 & Cok(x_1, x_2) & 0 & 0 & 0 & Cok(x_1, x_3) \\ 0 & Cok(x_2, x_2) & 0 & Cok(x_2, x_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Cok(x_3, x_3) & 0 & 0 & 0 & Cok(x_3, x_1) & 0 & 0 \\ 0 & Cok(x_1, x_2) & 0 & Cok(x_1, x_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ Cok(x_2, x_1) & 0 & 0 & 0 & kur(x) & 0 & 0 & 0 & Cok(x_2, x_3) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Cok(x_3, x_3) & 0 & Cok(x_3, x_2) & 0 \\ 0 & 0 & Cok(x_1, x_3) & 0 & 0 & 0 & Cok(x_1, x_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Cok(x_2, x_3) & 0 & Cok(x_2, x_2) & 0 \\ Cok(x_3, x_1) & 0 & 0 & 0 & Cok(x_3, x_2) & 0 & 0 & 0 & kur(x) \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

esta matriz es simétrica con  $\frac{n(n+1)(n+2)(n+3)}{24}$  elementos diferentes. Sin embargo, debido a la indistinguibilidad de las partículas solo necesitamos calcular dos términos  $kur(x)$  y

$Cok(x_1, x_2)$  para tener toda la información de la matriz. Además, los vectores propios son

$$\{f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7, f_8, f_9\} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (5.24)$$

y los correspondientes valores propios en términos de la kurtosis y la cokurtosis son

$$\{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6, \mu_7, \mu_8, \mu_9\} = \{0, 0, 0, 2Cok, 2Cok, 2Cok, kur - Cok, kur - Cok, 2Cok + kur\}. \quad (5.25)$$

Los dos valores propios distintos de cero y más pequeños se igualan

$$2Cok = kur - Cok, \quad (5.26)$$

y cumplen la siguiente relación

$$3Cok = kur. \quad (5.27)$$

## Capítulo 6

# Medidas informacionales en los estados basales

Como afirmamos anteriormente existe un gran interés por las correlaciones de orden superior que ocurren entre tres o más variables. Sin embargo, hay una escasez de las medidas que cuantifican correlaciones de orden superior, por otro lado las medidas disponibles se construyen a partir de la teoría de la información. Debido a esto uno de los objetivos en este apartado es explorar medidas de correlación basadas en momentos de la distribución de probabilidad y comparar con las ya existentes de la teoría de la información.

Debemos destacar que los sistemas interactuantes de osciladores tienen soluciones analíticas. Por lo tanto los resultados presentados son exactos y no dependen de la calidad de funciones de onda aproximadas. En la **sección 2.2** se presentan las funciones de onda para los tres osciladores no acoplados y acoplados.

Presentamos los resultados de osciladores no interactuantes en los cuales se muestra un análisis de la influencia debida a la simetría de la función de onda en las entropías y en las medidas de información de pares y de orden superior. Posteriormente, mostramos los osciladores interactuantes donde examinamos los efectos de la naturaleza (atractiva o repulsiva) del potencial de interacción sobre las entropías y las medidas de información.

### 6.1. Osciladores no acoplados

La **Figura 6.1** muestra el comportamiento de las entropías de tres variables, en espacio de posición y en espacio de momentos como función inversa del potencial de un cuerpo  $\frac{1}{\omega}$ . Las entropías de una y dos variables no se presentan, pero son muy similares en comportamiento a las de tres variables. Aquí, consideramos el estado  $|012\rangle$  como una función de onda antisimétrica. La función de onda simétrica correspondiente produce gráficas que

son muy similares a las antisimétricas. Sin embargo, los valores de las entropías de las funciones de onda simétricas y antisimétricas son diferentes.

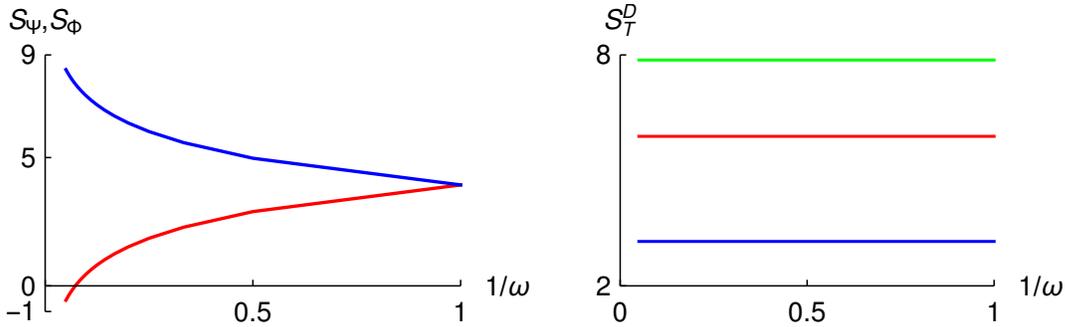


Figura 6.1: Izquierda: gráficas de las entropías en espacio de posición  $S_\Psi$  (rojo) y en espacio de momentos  $S_\Phi$  (azul) contra  $\frac{1}{\omega}$ . Derecha: gráficas de la suma entrópica  $S_T^D$  contra  $\frac{1}{\omega}$  para  $D = 3$  (verde),  $D = 2$  (rojo) y  $D = 1$  (azul). Ambas figuras para el estado  $|012\rangle$ .

Vemos que las entropías en espacio de posición aumentan con  $\frac{1}{\omega}$ , mientras que las entropías en espacio de momentos disminuyen. La interpretación es que las densidades en espacio de posición se localizan al aumentar  $\omega$ , mientras que las densidades en espacio de momentos se deslocalizan. Es importante notar que las tres sumas entrópicas son constantes con  $\frac{1}{\omega}$  y todas obedecen la cota  $S_T^D \geq D(1 + \ln \pi)$ . Tenemos que el incremento en el espacio de posición es igual en magnitud a la disminución en el espacio de momentos. Debemos considerar en este caso que no existe potencial de interacción entre pares ( $\lambda = 0$ ).

En la **Figura 6.2** se compara el comportamiento de la información mutua y la información de tercer orden para funciones de onda simétricas y antisimétricas con los mismos números cuánticos. En estos sistemas no interactuantes no existe potencial de interacción, por lo que toda la correlación se debe a la simetría particular de la función de onda.

Las magnitudes de la información mutua y la información de tercer orden son iguales tanto en espacio de posición como en espacio de momentos. Por lo tanto, la correlación debida a la indistinguibilidad de partículas no muestra alguna distinción entre ambos espacios. Estas magnitudes también son constantes con  $\frac{1}{\omega}$  ya que no está presente el potencial de interacción.

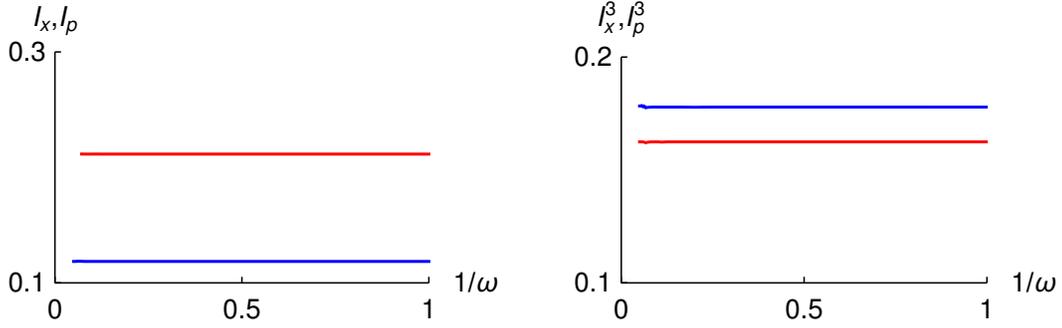


Figura 6.2: Izquierda: gráficas de la información mutua ( $I_x = I_p$ ) contra  $\frac{1}{\omega}$  para funciones de onda simétricas (azul) y antisimétricas (rojo). Derecha: gráficas de la información de tercer orden ( $I_x^3 = I_p^3$ ) contra  $\frac{1}{\omega}$  para funciones de onda simétricas (azul) y antisimétricas (rojo). Ambas figuras para el estado  $|012\rangle$ .

La magnitud de la información mutua es mayor para la función de onda antisimétrica en comparación con la simétrica. La función de onda antisimétrica está más correlacionada porque hay más restricciones en las variables [27]. Esto se explica por el hueco de Fermi que está presente en las funciones antisimétricas, ya que la función de onda se anula cuando las dos variables tienen el mismo valor lo cual se cumple si

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = 0, \text{ cuando } x_1 = x_2 \text{ o } x_1 = x_3 \text{ o } x_2 = x_3. \quad (6.1)$$

Por otro lado, son las funciones de onda simétricas las que tienen la mayor información de tercer orden. Esto es distinto de la información mutua de pares. Tanto las funciones simétricas como las antisimétricas tienen información de tercer orden con valores positivos. Por lo que, el primer término sinérgico de la ecuación (5.7) supera a las redundancias en el segundo término. La interpretación en este punto es que la indistinguibilidad en estos sistemas de tres partículas conduce a un tipo de interacción estadística donde domina la sinergia.

## 6.2. Osciladores acoplados

En la **Figura 6.3** se presentan las entropías de Shannon de tres variables para osciladores interactuantes con potenciales atractivos en función del potencial  $\lambda$  para el estado  $|001\rangle$  antisimétrico.

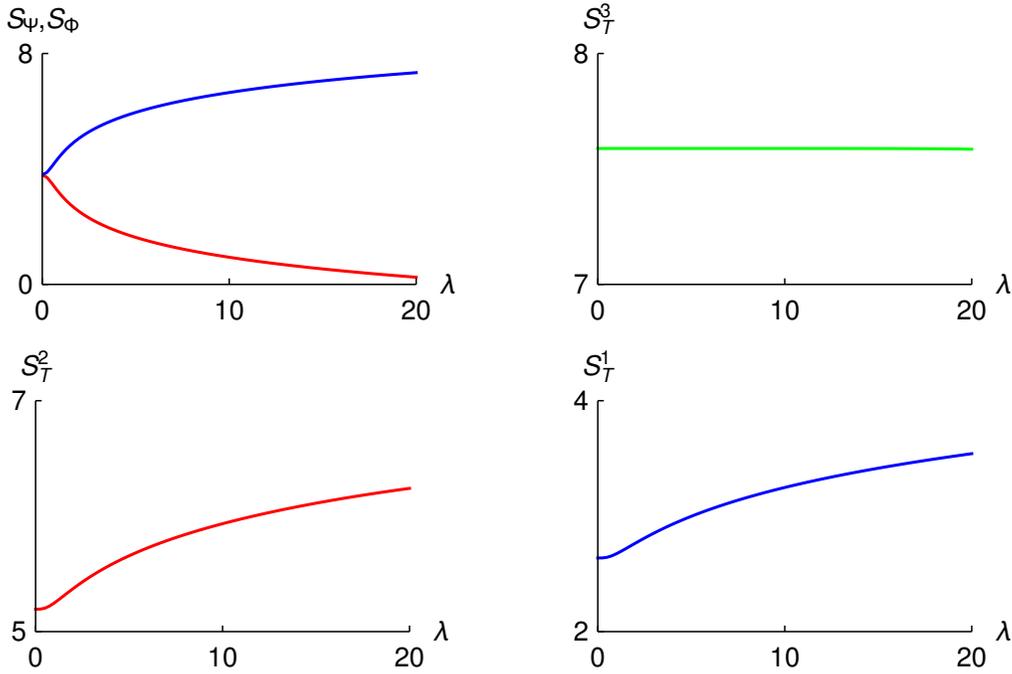


Figura 6.3: Arriba a la izquierda: gráficas de las entropías en espacio de posición  $S_\Psi$  (rojo) y en espacio de momentos  $S_\Phi$  (azul) contra el potencial  $\lambda$  para el estado  $|001\rangle$  potencial atractivo. Arriba a la derecha: gráficas de la suma entrópica  $S_T^3$  (verde) contra el potencial  $\lambda$ . Fila inferior: gráficas de las sumas de entrópicas  $S_T^2$  (rojo) y  $S_T^1$  (azul) contra el potencial  $\lambda$ .

En este caso consideramos el valor de  $\omega = 1$  para todos los cálculos que involucran osciladores interactuantes. Los resultados con diferentes valores de  $\omega$  son cualitativamente semejantes.

Las entropías en espacio de posición disminuyen al aumentar  $\lambda$ , es decir, a medida que se localizan las densidades. Mientras que las entropías en espacio de momentos aumentan a medida que se deslocalizan las densidades. Por otro lado, las entropías de una y dos variables tienen tendencias similares pero no se presentan.

La suma entrópica de tres variables es constante con el potencial de pares  $\lambda$  de forma similar al comportamiento de los osciladores no interactuantes con  $\frac{1}{\omega}$ . Sin embargo, las sumas entrópicas para las densidades reducidas de una y dos variables no son constantes y aumentan con  $\lambda$ . Esto es diferente del comportamiento observado con los osciladores no interactuantes. Por lo tanto, las sumas entrópicas de las cantidades reducidas son sensibles a la correlación que proviene del potencial.

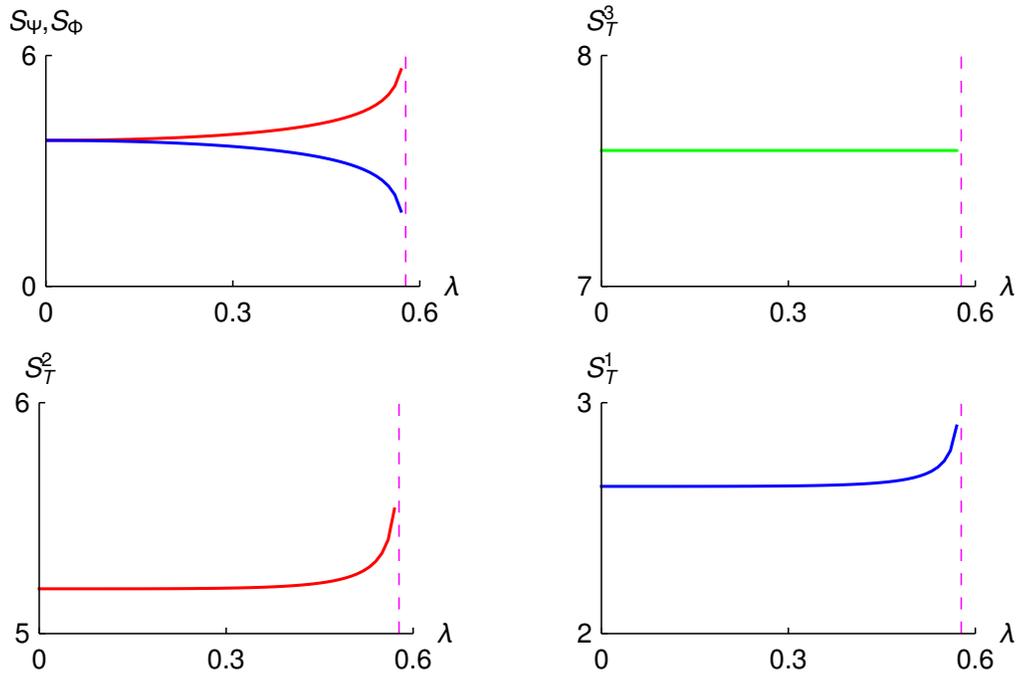


Figura 6.4: Arriba a la izquierda: gráficas de las entropías en espacio de posición  $S_\Psi$  (rojo) y en espacio de momentos  $S_\Phi$  (azul) contra el potencial  $\lambda$  para el estado  $|001\rangle$  potencial repulsivo. Arriba a la derecha: gráficas de la suma entrópica  $S_T^3$  (verde) contra el potencial  $\lambda$ . Fila inferior: gráficas de las sumas de entrópicas  $S_T^2$  (rojo) y  $S_T^1$  (azul) contra el potencial  $\lambda$ . La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

La **Figura 6.4** muestra las entropías para el potencial de interacción repulsivo. Los comportamientos de  $S_\Psi$  y  $S_\Phi$  son ahora opuestos a los observados en el potencial atractivo. Las entropías en el espacio de posición aumentan a medida que las densidades subyacentes se deslocalizan con el aumento de  $\lambda$  y las entropías en el espacio de momentos disminuyen a medida que se localizan las densidades correspondientes.

Las gráficas de las sumas entrópicas muestran el mismo tipo de comportamiento que en el potencial atractivo. La suma entrópica de tres variables no depende del potencial de pares, mientras que las sumas entrópicas de dos variables aumentan con  $\lambda$ , en particular para valores mayores del potencial de pares.

En la **Figura 6.5** se muestran las gráficas de las densidades reducidas a una partícula en espacio de posición y en espacio de momentos para dos valores del potencial  $\lambda$ . Dichas figuras ilustran cómo cambian las densidades en ambos espacios con el incremento en  $\lambda$ . Observamos que la densidad en espacio de posición se deslocaliza (es más ancha) al

aumentar el potencial repulsivo lo cual se manifiesta con un aumento en la entropía.

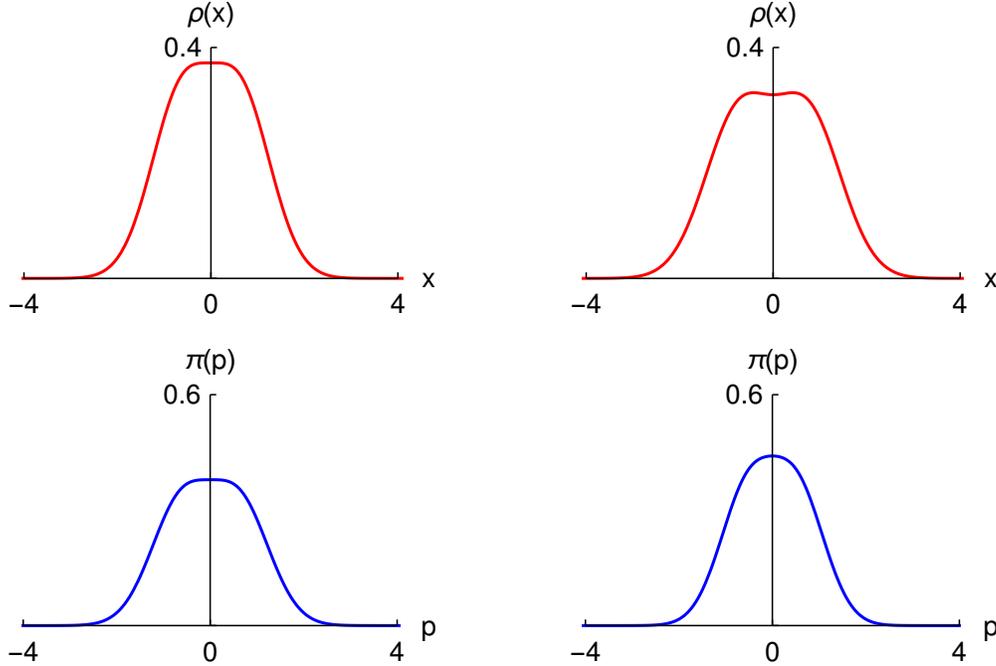


Figura 6.5: Fila superior: gráficas de las densidades de una variable  $\rho(x)$  (rojo) contra  $x$  para un potencial repulsivo con  $\lambda = 0,1$  (izquierda) y  $\lambda = 0,4$  (derecha). Fila inferior: gráficas de las densidades de una variable  $\pi(p)$  (azul) contra  $p$  para un potencial repulsivo con  $\lambda = 0,1$  (izquierda) y  $\lambda = 0,4$  (derecha). En ambos casos para el estado  $|001\rangle$ .

Por otro lado, la densidad en espacio de momentos se localiza (es más estrecha) lo cual se manifiesta con una disminución en la entropía. La suma entrópica ( $S_T^1$ ) en la **Figura 6.4** es constante en el intervalo de  $\lambda = 0,1 - 0,4$  y después aumenta ligeramente. Así, los efectos de la deslocalización en espacio de posición no corresponden de forma equivalente con la localización en espacio de momentos al aumentar  $\lambda$ .

Las entropías del estado simétrico  $|000\rangle$  tienen comportamientos muy similares a los presentados en las **Figuras 6.3 - 6.4** y por consecuencia no se incluyen.

La **Figura 6.6** muestra el comportamiento de la información mutua de pares y de la información de tercer orden en función del potencial atractivo para los estados simétrico  $|000\rangle$  y antisimétrico  $|001\rangle$ . En este caso las magnitudes de ambas medidas son diferentes en cada espacio. Este resultado es distinto al de los osciladores no interactuantes presentados en la **Figura 6.2** donde son iguales. Aquí, la presencia del potencial entre pares de partículas separa las magnitudes de las medidas en las dos representaciones.

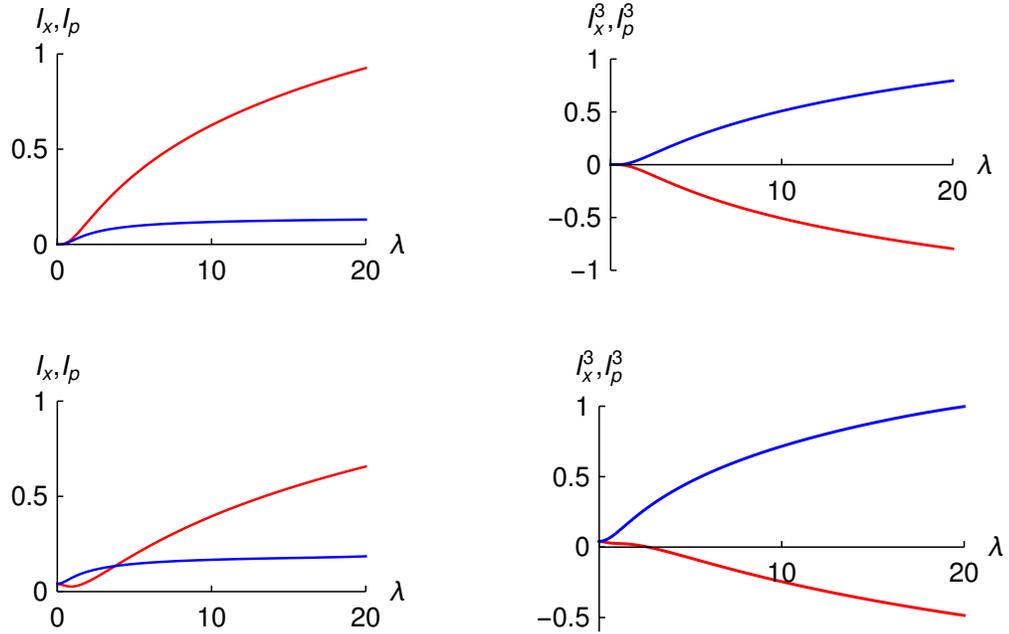


Figura 6.6: Columna izquierda: gráficas de la información mutua  $I_x$  (rojo) e  $I_p$  (azul) vs  $\lambda$  con potencial atractivo para el estado simétrico  $|000\rangle$  (primera fila) y el estado antisimétrico  $|001\rangle$  (segunda fila). Columna derecha: gráficas de la información de tercer orden  $I_x^3$  (rojo) e  $I_p^3$  (azul) vs  $\lambda$  con potencial atractivo para el estado simétrico  $|000\rangle$  (primera fila) y el estado antisimétrico  $|001\rangle$  (segunda fila).

La información mutua para el estado simétrico (primera fila) aumenta con el potencial de acoplamiento y es mayor en el espacio de posición en comparación con el espacio de momentos. Por otro lado, las magnitudes de la información de tercer orden son iguales  $|I_p^3| = |I_x^3|$  y ambas aumentan con el potencial  $\lambda$ . La interpretación es que las interacciones dominantes son sinérgicas en el espacio de momentos (región positiva) mientras que en el espacio de posición (región negativa) son las redundancias o correlaciones entre pares las que dominan el balance.

En el caso antisimétrico hay una región donde la información mutua en el espacio de posición pasa por un mínimo poco profundo. En el mínimo se cumple la siguiente condición de cambio entre pares respecto de una variable  $2\frac{\partial S_p}{\partial \lambda} = \frac{\partial S}{\partial \lambda}$ , la cual proviene de analizar la pendiente en la correspondiente gráfica de la **Figura 6.6**, donde el cambio de correlación está relacionado con el cambio de las medidas de localización. Para valores mayores de  $\lambda$  las medidas de información mutua se comportan como en el estado simétrico.

En el caso antisimétrico se cumple que  $|I_p^3| \neq |I_x^3|$ . Sin embargo, el comportamiento de la información de tercer orden en espacio de momentos no parece cambiar al compararse con el estado simétrico. En el espacio de posición hay una región donde la información de tercer orden es positiva para  $\lambda$  más pequeña. Esto es distinto al estado simétrico donde se observa que dicha medida es negativa en todo  $\lambda$ . Para valores de  $\lambda$  grandes en ambos casos la información de tercer orden tiene un valor negativo. La región con valores positivos se interpreta como un equilibrio a favor de las interacciones sinérgicas. El cero corresponde al valor particular del potencial donde las magnitudes de las interacciones sinérgicas y redundantes son iguales. Esto también sugiere que el equilibrio entre las interacciones sinérgicas y redundantes se puede ajustar con el potencial.

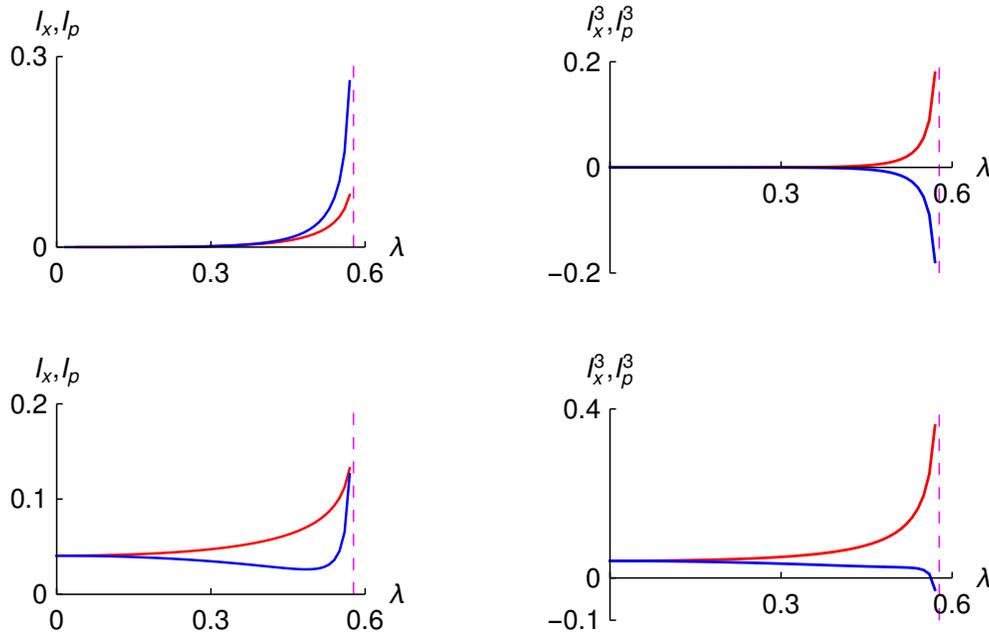


Figura 6.7: Columna izquierda: gráficas de la información mutua  $I_x$  (rojo) e  $I_p$  (azul) vs  $\lambda$  con potencial repulsivo para el estado simétrico  $|000\rangle$  (primera fila) y el estado antisimétrico  $|001\rangle$  (segunda fila)  $I_x$  (rojo) e  $I_p$  (azul). Columna derecha: gráficas de la información de tercer orden  $I_x^3$  (rojo) e  $I_p^3$  (azul) vs  $\lambda$  con potencial repulsivo para el estado simétrico  $|000\rangle$  (primera fila) y el estado antisimétrico  $|001\rangle$  (segunda fila). La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

Los resultados del potencial repulsivo se presentan en la **Figura 6.7**. En el caso simétrico la información mutua es mayor en el espacio de momentos para todo el rango del poten-

cial. Este comportamiento es opuesto al del potencial atractivo de la **Figura 6.6** donde el espacio de posición es mayor.

Los comportamientos de la información de tercer orden también son opuestos a los del potencial atractivo. Esto se justifica observando como están relacionados ambos espacios a través de las ecuaciones funcionales de los potenciales (2.65 y 2.70). La medida en el espacio de posición tiene un valor positivo mientras que el espacio de momentos tiene un valor negativo. Por lo tanto, ahora es el espacio de posición el que exhibe las interacciones sinérgicas y aumenta en magnitud con el potencial. El espacio de momentos por otro lado presenta redundancia. Lo que es semejante con el potencial atractivo donde las magnitudes son iguales  $|I_x^3| = |I_p^3|$ .

Los estados simétrico (fila superior) y antisimétrico (fila inferior) muestran algunas diferencias relevantes. Por ejemplo, la información mutua para el estado antisimétrico es mayor en el espacio de posición que en el espacio de momentos. Asimismo es notable que la información mutua en el espacio de momentos pasa por un mínimo en valores relativamente mayores del potencial de acoplamiento antes de aumentar hasta el valor límite de  $\lambda$ . La siguiente condición  $2\frac{\partial S_x}{\partial \lambda} = \frac{\partial S}{\partial \lambda}$ , se cumple en este mínimo, así, la información mutua en el espacio de momentos disminuye con valores mayores del potencial antes del mínimo.

La información de tercer orden en el espacio de posición se comporta de manera similar en los estados simétrico y antisimétrico. Sin embargo, existen marcadas diferencias en el espacio de momentos. La medida ahora es positiva para un amplio rango de  $\lambda$  antes de volverse negativa en el límite de mayor potencial. De manera similar al espacio de posición con potencial atractivo (ver **Figura 6.6**) la medida pasa por un valor de  $\lambda$  donde es cero y cambia de un dominio de interacciones sinérgicas a uno donde hay redundancias. La diferencia aquí es que este cambio ocurre con un potencial mayor, mientras que en el potencial atractivo ocurre con un potencial menor. Por lo que, el tipo de interacción dominante se puede modular con el potencial.

Los comportamientos de los componentes sinérgico ( $S$ ) y de redundancia ( $R$ ) de la información de tercer orden se presentan para potenciales atractivos (espacio de posición) y repulsivos (espacio de momentos) correspondientes al estado  $|001\rangle$ . En la **Figura 6.8** vemos las gráficas de las medidas en función de  $E_{int}$ , el cual se define como

$$E_{int} = E - E_{NI} = (\sqrt{\omega^2 \pm 3\lambda^2} - \omega)(n_{r_1} + n_{r_2} + 1), \quad (6.2)$$

donde  $E$  es la energía del sistema interactuante y  $E_{NI}$  es la energía del sistema no interactuante ( $\lambda = 0$ ).

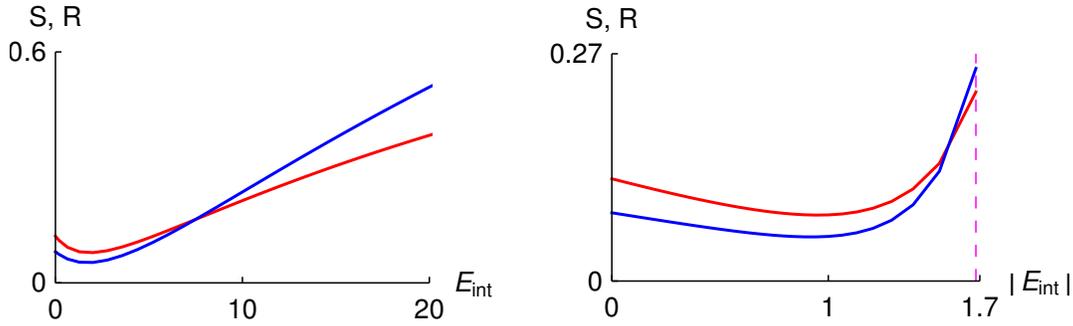


Figura 6.8: Izquierda: gráficas de los componentes de sinergia  $S$  (rojo) y de redundancia  $R$  (azul) de  $I_x^3$  contra la energía de interacción  $E_{int}$  para el estado  $|001\rangle$  potencial atractivo. Derecha: gráficas de los componentes de sinergia  $S$  (rojo) y de redundancia  $R$  (azul) de  $I_p^3$  contra la energía de interacción  $|E_{int}|$  para el estado  $|001\rangle$  potencial repulsivo. La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

Aquí, observamos que las dos componentes tienen comportamientos similares. Tenemos que  $R$  es el doble de la información mutua de pares. Es importante considerar que ambas componentes aumentan con  $E_{int}$ . Además, la componente  $R$  domina en ambos casos para valores relativamente mayores de  $E_{int}$  o de interacción por pares.

### 6.3. Conclusiones

- Las sumas entrópicas de una variable, dos variables y tres variables cumplen con las respectivas cotas y son constantes al variar  $\frac{1}{\omega}$  para funciones de onda simétricas y antisimétricas de osciladores no acoplados.
- La información mutua para funciones de onda simétricas y antisimétricas de osciladores no acoplados en ambos espacios es constante al variar  $\frac{1}{\omega}$ , además se tiene que  $I_x = I_p$ .
- La información de tercer orden para funciones de onda simétricas y antisimétricas de osciladores no acoplados en ambos espacios es constante al variar  $\frac{1}{\omega}$ , además se tiene que  $I_x^3 = I_p^3$ .
- La suma entrópica de tres variables cumple con la respectiva cota y es constante al variar  $\lambda$ . Sin embargo, las sumas entrópicas de una y dos variables no son constantes

ya que son sensibles al potencial de pares por lo que se consideran como medidas de correlación. Además, cumplen con las respectivas cotas.

- La información mutua detecta un mínimo para la función de onda antisimétrica con potencial atractivo en espacio de posición y con potencial repulsivo en espacio de momentos. Para la función de onda simétrica con potenciales atractivo y repulsivo se tiene que  $I_x$  y  $I_p$  son funciones crecientes. Lo anterior muestra que la introducción de  $\lambda$  rompe la simetría entre posición y momentos.
- La información de tercer orden tiene regiones positivas y negativas para la función de onda antisimétrica con potencial atractivo en espacio de posición y con potencial repulsivo en espacio de momentos. Para la función de onda simétrica con potenciales atractivo y repulsivo se tiene que  $|I_x^3| = |I_p^3|$ .
- El balance entre sinergia y redundancia se controla con el potencial de pares  $\lambda$ . Así cuando aumenta la interacción de pares aumenta la redundancia y cuando el potencial de pares es pequeño se manifiestan las interacciones de las tres partículas con el incremento de la sinergia.

## Capítulo 7

# Medidas informacionales vs. Medidas basadas en momentos de la densidad: estados basales y estados excitados

El objetivo de esta sección es examinar y comparar las definiciones de medidas de correlación por pares y de tercer orden basadas en las medidas de momentos de la densidad junto con las medidas de la teoría de la información estudiadas en la sección anterior. Además, se evalúa la consistencia entre las medidas de correlación, donde se enfatiza el uso de las medidas de correlación de tres variables y de orden alto ya que son escasas tales medidas. Para este estudio se usan sistemas de tres osciladores interactuantes para los estados basales y excitados. Aquí señalamos que existe una diferencia fundamental entre el estado basal y el estado excitado debido a la presencia de los polinomios de Hermite de orden superior. Esto conduce a la cuestión de cómo la estructura nodal en los estados excitados influye en las medidas de correlación.

### 7.1. Osciladores no acoplados

Comenzamos la discusión con la presentación de las medidas de correlación entre pares en el estado simétrico  $|100\rangle$  sin interacción ( $\lambda = 0$ ). En la **Figura 7.1** se observan las medidas en función de  $\omega$  (frecuencia natural del oscilador) en el espacio de posición. Las gráficas muestran además que todas las medidas son constantes con  $\omega$  y son consistentes en sus interpretaciones. Es decir, la correlación entre pares no depende de  $\omega$ .

Los valores de todas las medidas son distintos de cero, ya que la correlación estadística en estos sistemas no interactuantes se debe a la simetría de las funciones de onda. Es decir, las funciones de onda no se factorizan en forma de producto. Asimismo, la magnitud de

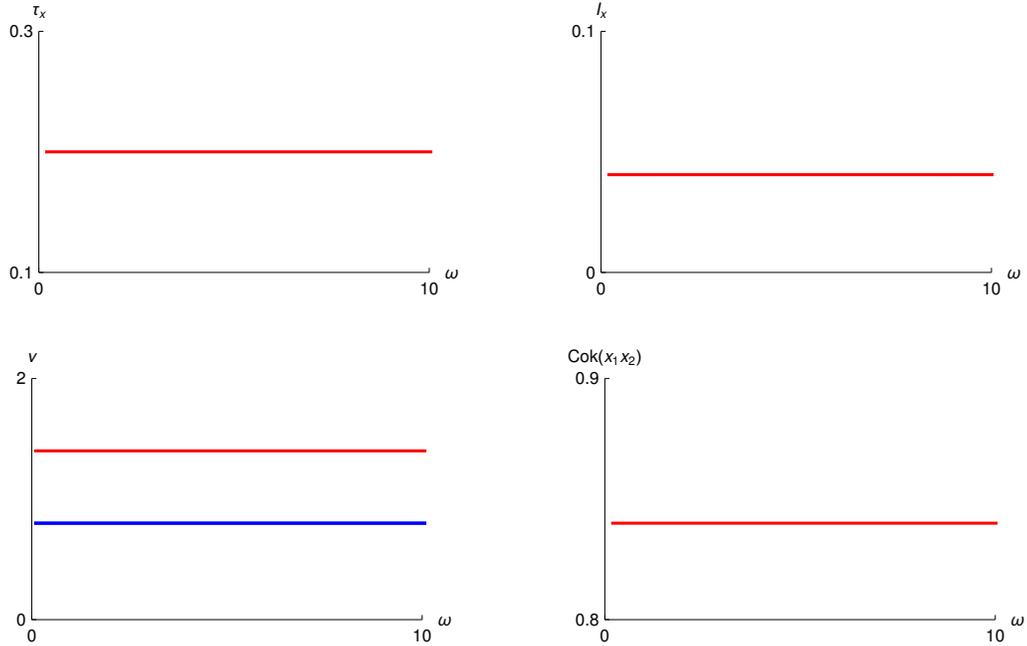


Figura 7.1: Medidas de correlación de pares vs  $\omega$  para el estado simétrico  $|100\rangle$  sin interacción en el espacio de posición. Primera fila:  $\tau_x$  e  $I_x$  vs.  $\omega$ . Segunda fila: (izquierda) valores propios  $\nu_1 = 1 + 2\tau(\omega)$  (rojo) y  $\nu_2 = 1 - \tau(\omega)$  (azul), (derecha)  $Cok(x_1, x_2)$ .

cada medida es igual en espacio de posición y en espacio de momentos. Las gráficas en espacio de momentos no se presentan por brevedad.

Los comportamientos de los dos valores propios de la matriz de correlación también se presentan como función de  $\omega$ . Se puede apreciar que ambos valores propios son constantes y no se cruzan en ningún punto. Aquí vemos que el valor del coeficiente de correlación es positivo, es decir, existe una correlación positiva en este estado simétrico. Lo cual es distinto en el estado antisimétrico  $|011\rangle$  no interactuante cuyo coeficiente de correlación es negativo. No se presentan gráficas para el estado antisimétrico pero son consistentes con los del estado simétrico.

La **Figura 7.2** muestra las medidas de correlación entre las tres partículas para el estado simétrico  $|100\rangle$  sin interacción en espacio de posición. Aquí vemos como todas las medidas son consistentes en su interpretación, puesto que la correlación entre las tres partículas no depende de  $\omega$ . También tienen un valor distinto de cero debido a la simetría de la función de onda.

La **Figura 7.3** muestra las densidades de contornos para el estado simétrico  $|100\rangle$  sin

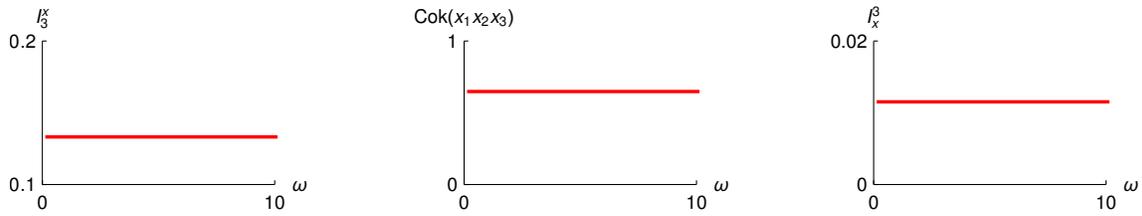


Figura 7.2: Medidas de correlación entre tres partículas vs  $\omega$  para el estado simétrico  $|100\rangle$  sin interacción en el espacio de posición.

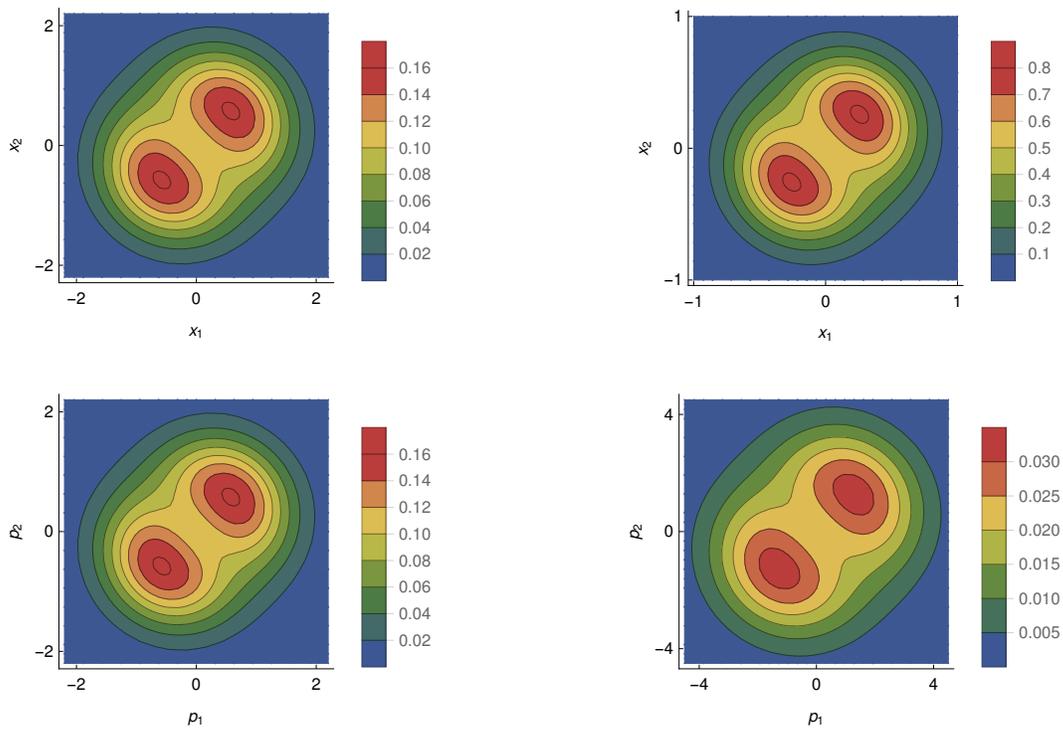


Figura 7.3: Primera fila: gráficas de contornos de la función de densidad reducida para el estado simétrico  $|100\rangle$  en espacio de posición con potencial  $\omega = 1, 5$ . Segunda fila: gráficas de contornos de la función de densidad reducida  $|100\rangle$  en espacio de momentos con potencial  $\omega = 1, 5$ .

interacción en espacio de posición y en espacio de momentos, donde vemos que parecen ser invariantes ya que tienen la misma forma y dirección en los cuatro perfiles de densidad salvo escalas.

## 7.2. Osciladores acoplados

La desviación estándar  $\sigma_x$ ,  $\sigma_{x^2}$ , la entropía  $S_x$  y la kurtosis  $kur(x)$  (una cantidad relacionada con  $\langle x^4 \rangle$  [109]) se presentan a continuación.

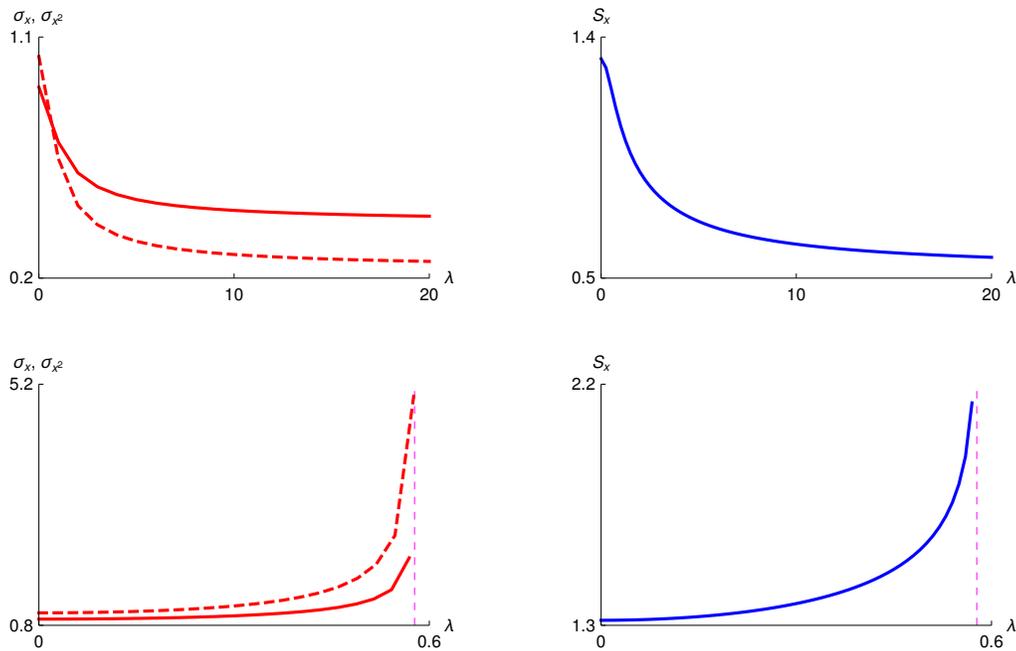


Figura 7.4: Primera fila: gráficas de la desviación estándar  $\sigma_x$  (línea continua),  $\sigma_{x^2}$  (línea discontinua) y entropía de Shannon de una variable  $S_x$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de la desviación estándar  $\sigma_x$  (línea continua),  $\sigma_{x^2}$  (línea discontinua) y entropía de Shannon de una variable  $S_x$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

Un tema relacionado con la correlación estadística es el de la cuantificación de la incertidumbre o dispersión en una distribución de probabilidad. Esto es así, ya que la correlación estadística se puede concebir como la diferencia entre las incertidumbres en el

nivel de una variable y aquellas en el nivel de dos o más variables. Lo anterior es válido para medidas de la teoría de la información como en las medidas relacionadas con momentos de la distribución. Las incertidumbres también se pueden interpretar como medidas de la forma de la distribución subyacente. La idea aquí es que la distribución tiene la información de un sistema físico. Por lo tanto, examinamos los comportamientos de  $\sigma_x$  ( $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$ ) y  $\sigma_{x^2}$  ( $\sqrt{\langle x^4 \rangle - \langle x^2 \rangle^2}$ ) y comparamos con  $S_x$ . La **Figura 7.4** muestra su comportamiento en función de  $\lambda$  para el estado  $|001\rangle$  con potenciales atractivos y repulsivos.

Se puede apreciar que las tres medidas tienen un comportamiento consistente. La incertidumbre disminuye (localización) en presencia de un potencial atractivo cada vez más fuerte mientras que aumenta la incertidumbre (deslocalización) en presencia de un potencial repulsivo más fuerte. Los resultados para el estado  $|000\rangle$  son similares y no se presentan por brevedad.

Otra medida es la kurtosis que está relacionada con el cuarto momento de la distribución. La cual mide las propiedades de las colas de la distribución y se define para distribuciones simétricas como

$$kur(x) = \frac{E[(x - \langle x \rangle)^4]}{\left(E[(x - \langle x \rangle)^2]\right)^2} = \frac{\langle x^4 \rangle}{\langle x^2 \rangle^2}. \quad (7.1)$$

Se sabe que  $kur(x)$  de una distribución Gaussiana tiene un valor de tres [110]. Las desviaciones de este valor se pueden utilizar para caracterizar distribuciones como Gaussianas o no Gaussianas.

En nuestro caso particular el estado  $|000\rangle$  tiene distribuciones con carácter puramente Gaussiano ya que el polinomio de Hermite en la función de onda es de orden cero. Esto es distinto del estado  $|001\rangle$  donde aparece el polinomio de Hermite de primer orden. Así la presencia de este polinomio le otorga a las distribuciones  $|001\rangle$  un carácter no Gaussiano.

La **Figura 7.5** presenta las gráficas de  $kur(x)$  para el estado  $|001\rangle$ . En el caso del potencial atractivo los valores de  $kur(x)$  a valores más pequeños de  $\lambda$  son diferentes del valor límite  $kur(x) = 3$  para una Gaussiana. Sin embargo, al aumentar  $\lambda$  los valores se acercan al límite (y al valor del estado  $|000\rangle$ ). Por lo tanto, la densidad de una variable se comporta más similar a la de Gaussiana a medida que aumenta  $\lambda$ . Por el contrario la gráfica del potencial repulsivo muestra que  $kur(x)$  se aleja de tres en valores mayores de  $\lambda$ . La interpretación aquí es que la densidad se comporta menos similar a la Gaussiana cuando se incrementa  $\lambda$ .

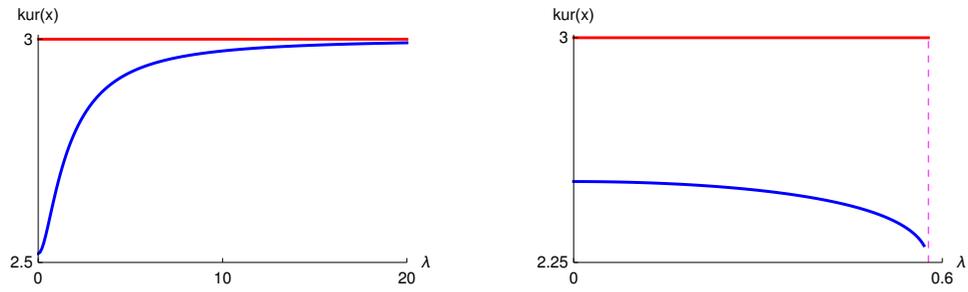


Figura 7.5: Izquierda: gráficas de kurtosis  $kur(x)$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Derecha: gráficas de kurtosis  $kur(x)$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Las líneas rojas corresponden al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$  mientras que las curvas azules corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . La línea vertical discontinua corresponde al valor límite del potencial repulsivo.

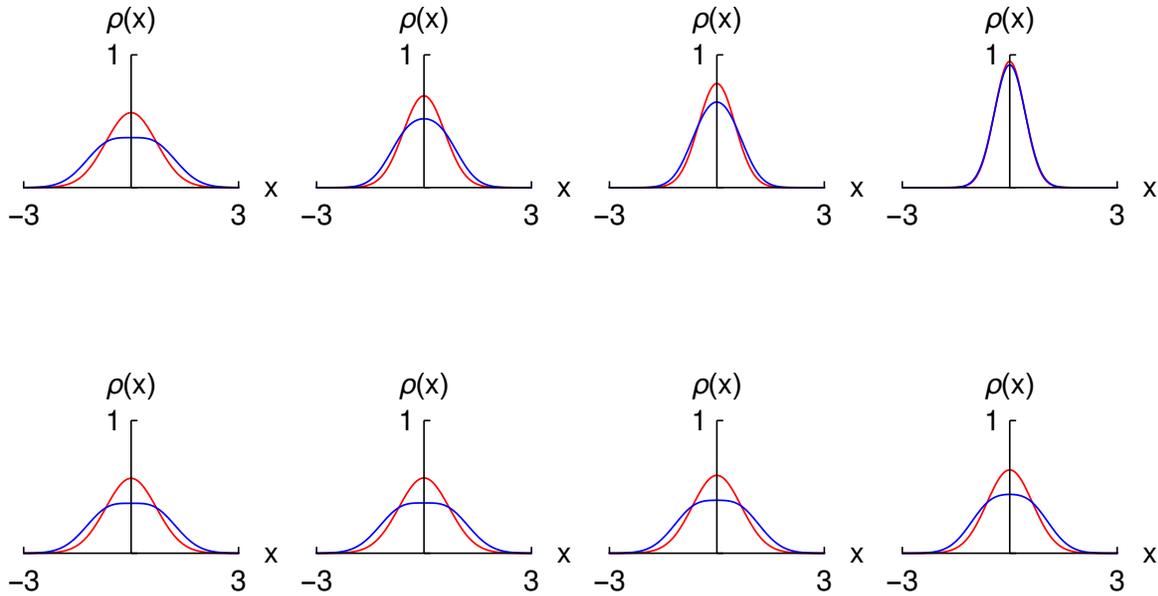


Figura 7.6: Primera fila: gráficas de la densidad reducida de una variable para el potencial atractivo con valores  $\lambda = 0, 1, 2, 20$ . Segunda fila: gráficas de la densidad reducida de una variable para el potencial repulsivo con valores  $\lambda = 0, 0,1, 0,3, 0,57$ . Las densidades de  $|000\rangle$  se presentan en rojo mientras que las de  $|001\rangle$  en azul.  $\omega$  se fija a uno en ambos casos.

Estos efectos se pueden observar a partir de la secuencia de densidades que se presentan en la **Figura 7.6**. La primera fila para el potencial atractivo muestra que la densidad  $|001\rangle$  (azul) se aproxima a la de  $|000\rangle$  igual a uno (línea roja que es Gaussiana) para valores mayores de  $\lambda$ . Se puede ver cómo las colas más gruesas en el estado  $|001\rangle$  se presentan en valores más pequeños de  $\lambda$  y se transforman en colas Gaussianas ( $|000\rangle$ ) para valores de  $\lambda$  grandes. Es interesante que en el potencial repulsivo parece que hay mayores diferencias con la curtosis para  $\lambda$  grande.

### 7.2.1. Estados basales

Primero examinamos la cokurtosis de pares y la comparamos con otras medidas de correlación entre pares. Las medidas  $\tau_x$ ,  $\tau_{x^2}$ ,  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  del estado  $|000\rangle$  y su dependencia con  $\lambda$  se muestran en la **Figura 7.7**. La primera fila muestra que todas las medidas de correlación por pares aumentan con  $\lambda$  en presencia de un potencial de pares atractivo. Los comportamientos de  $\tau_x$  y  $\tau_{x^2}$  son similares en este caso. Vemos que  $\tau_x$ ,  $\tau_{x^2}$  y  $I_x^N$  son cero en  $\lambda = 0$  (correlación cero) para el estado  $|000\rangle$  (separable). Por otro lado  $Cok(x_1, x_2)$  tiene valor de uno en  $\lambda = 0$  en la ecuación (4.24) ya que  $|000\rangle$  es separable y es una distribución Gaussiana. De hecho ambas curvas de  $Cok(x_1, x_2)$  obedecen a la ecuación (4.24). Otro punto importante aquí es la similitud entre las curvas  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$ .

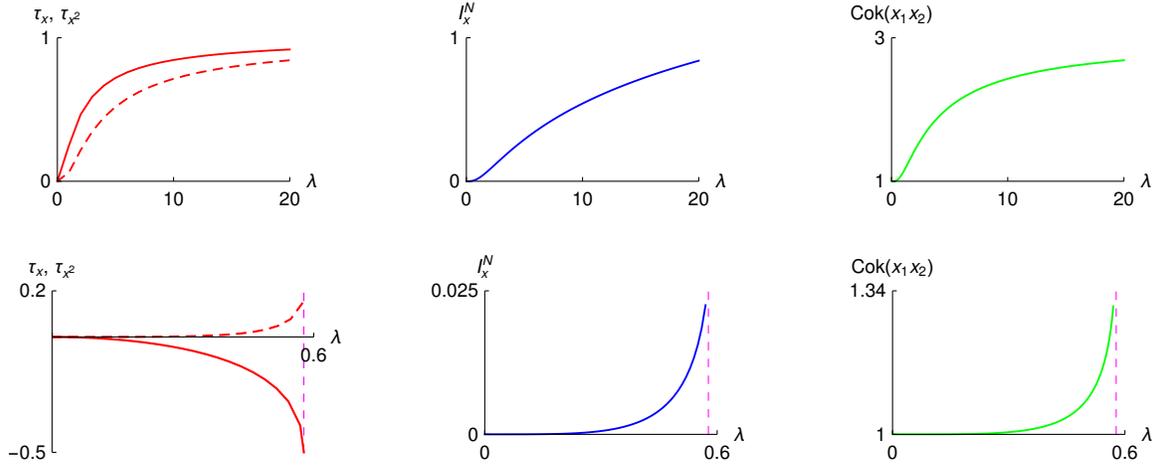


Figura 7.7: Primera fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Las gráficas corresponden al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

En el caso del potencial repulsivo segunda fila de la **Figura 7.7** tenemos que  $\tau_x$  ahora tiene un valor negativo cuya magnitud aumenta con  $\lambda$  por lo que  $x_1$  y  $x_2$  tienen una correlación negativa que describe la medida en que dichas variables se mueven en direcciones opuestas debido a la presencia del potencial repulsivo. Por el contrario  $\tau_{x^2}$  tiene un valor positivo y aumenta con  $\lambda$ . El segundo término en el numerador de  $\tau_{x^2}$  en la ecuación (4.19) es menor que el primer término lo cual genera un valor positivo de  $\tau_{x^2}$ .

$\tau_x$  puede ser positivo o negativo (potencial de pares atractivo o repulsivo) para distribuciones de tipo Gaussiano mientras que  $\tau_{x^2}$  siempre es positivo y similar a  $I_x^N$ . La semejanza entre las curvas  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  también es sugerente.

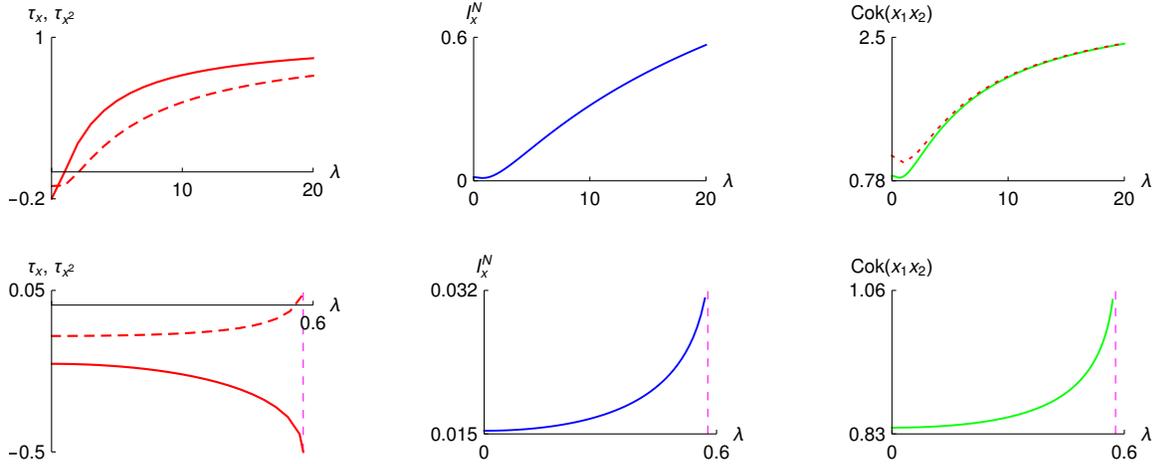


Figura 7.8: Primera fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\tau_x$  (línea continua),  $\tau_{x^2}$  (línea discontinua),  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  vs  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Las gráficas corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ .  $Cok^G(x_1, x_2) = 1 + 2\tau_x^2$  (línea de puntos roja) se muestra junto con  $Cok(x_1, x_2)$  en el caso del potencial atractivo. Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

La **Figura 7.8** presenta el comportamiento de las medidas para el estado  $|001\rangle$ . Los coeficientes de correlación y la información mutua son distintos de cero en  $\lambda = 0$ .

$Cok(x_1, x_2)$  ahora es menor que uno en  $\lambda = 0$  para potenciales atractivos y repulsivos ejemplificando aquí un comportamiento no Gaussiano. De hecho, el comportamiento que uno esperaría de una distribución Gaussiana ecuación (4.24) se da en el caso del potencial atractivo (curva roja). Se observa que la curva  $Cok(x_1, x_2)$  se acerca a esta referencia en valores mayores de  $\lambda$ .

Con el potencial atractivo (primer fila) tanto  $\tau_x$  como  $\tau_{x^2}$  muestra regiones negativas antes de volverse positivas y aumentar a mayor  $\lambda$ . La transición de negativo a positivo en  $\tau_x$  ocurre en la región de  $\lambda$  donde hay un mínimo en  $I_x^N$ . La región negativa en  $\tau_{x^2}$  ocurre donde  $Cok(x_1, x_2) < 1$ , es decir, donde hay una desviación del comportamiento estrictamente Gaussiano. La observación importante aquí es la similitud general en el comportamiento entre  $\tau_x$  y  $\tau_{x^2}$  así como entre  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$ .

En el caso del potencial repulsivo (segunda fila) los comportamientos de  $\tau_x$  y  $\tau_{x^2}$  ahora divergen.  $\tau_x$  se vuelve cada vez más negativo con  $\lambda$  grande mientras que  $\tau_{x^2}$  es positivo.  $\tau_{x^2}$  tiene un valor negativo mientras que la cokurtosis es menor que uno. La curva de referencia para la cokurtosis Gaussiana no se presenta en este caso ya que las magnitudes de sus valores son mucho mayores que la curva mostrada, aunque sus comportamientos son similares. Por lo tanto, el comportamiento Gaussiano no se recupera para  $\lambda$  mayores como en el caso del potencial atractivo. La desviación del comportamiento Gaussiano es mayor en el caso de los potenciales repulsivos en comparación con los atractivos. También hay una similitud notable entre las curvas  $I_x^N$  y  $Cok(x_1, x_2)$  para el potencial repulsivo. Una observación general aquí es que  $\tau_x$  y  $\tau_{x^2}$  exhiben un comportamiento similar con potenciales atractivos y diferente para potenciales repulsivos cuando las densidades son de naturaleza no Gaussiana.

### 7.2.1.1. Medidas de información de orden alto

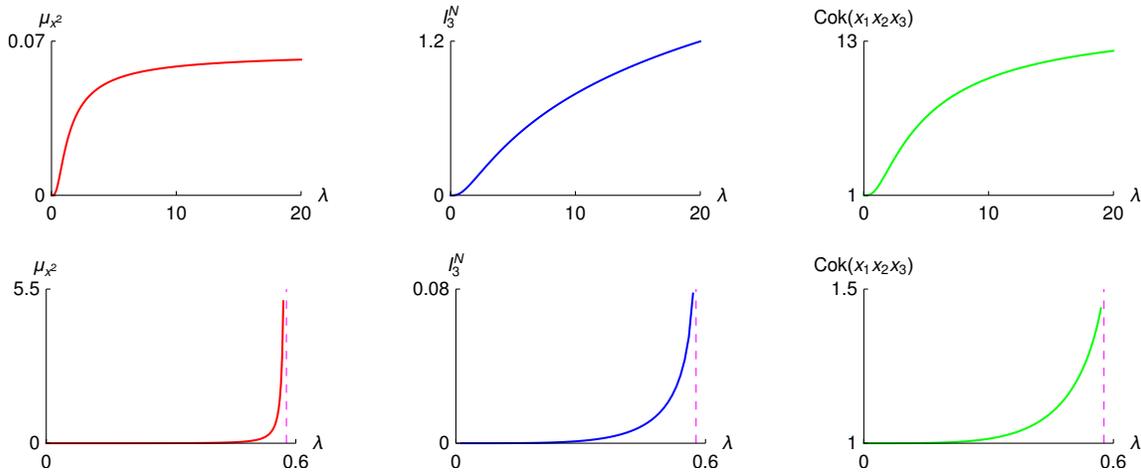


Figura 7.9: Primera fila: gráficas de  $\mu_{x^2}$ ,  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  contra  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\mu_{x^2}$ ,  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  contra  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

En este apartado consideramos los comportamientos de las medidas de correlación de tercer orden.  $\mu_{x^2}$ ,  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  se presentan en la **Figura 7.9** para el estado  $|000\rangle$ . Todas las medidas aumentan con  $\lambda$  independientemente de la presencia del potencial atractivo (fila superior) o repulsivo (fila inferior).  $\mu_{x^2}$  e  $I_3^N$  son cero cuando  $\lambda = 0$ , mientras

que la cokurtosis tiene un valor de uno para la distribución separable. En este punto sabemos que  $\mu_{x^2}$  se basa en  $I_3^N$  por lo que no debe sorprender que sus comportamientos sean similares. Por otro lado, hay una gran semejanza entre  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  tanto en el caso atractivo como en el caso repulsivo.

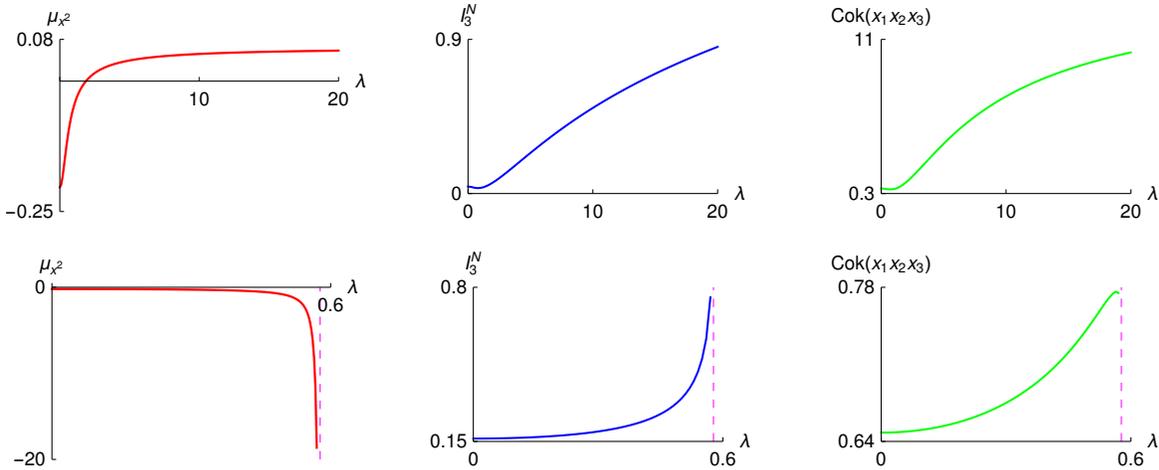


Figura 7.10: Primera fila: gráficas de  $\mu_{x^2}$ ,  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  contra  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\mu_{x^2}$ ,  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  contra  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

Las medidas para el estado  $|001\rangle$  se presentan en la **Figura 7.10**. El comportamiento de  $\mu_{x^2}$  no es semejante al de  $I_3^N$  tanto para potenciales atractivos como para potenciales repulsivos. La cokurtosis en la ecuación (5.17) es menor que 1 cuando el denominador es mayor que el numerador. En este caso  $\mu_{x^2}$  que viene de la ecuación (5.14) es negativa. Esto se puede observar en la fila superior de la **Figura 7.10** para el potencial atractivo.  $\mu_{x^2}$  es negativa mientras que la cokurtosis es menor que 1 y luego se vuelve positiva y aumenta. Con el potencial repulsivo se vuelve cada vez más negativa a medida que aumenta  $\lambda$  ya que la cokurtosis es menor que 1. La observación más importante aquí es la semejanza entre las curvas  $I_3^N$  y  $Cok(x_1, x_2, x_3)$  tanto para potenciales atractivos como repulsivos.

Las gráficas de las medidas de orden superior se presentan en la **Figura 7.11** para el estado  $|000\rangle$ . La interpretación de la información de tercer orden es que las redundancias (correlaciones por pares) son dominantes aquí y aumentan con  $\lambda$ . Con el potencial repulsivo el comportamiento de  $\mu_{x^2}^2$  ahora no es consistente con las otras dos medidas mostrando regiones tanto positivas como negativas. Por otro lado,  $I_x^3$  y  $\eta_x$  crecen con  $\lambda$  grandes. Si

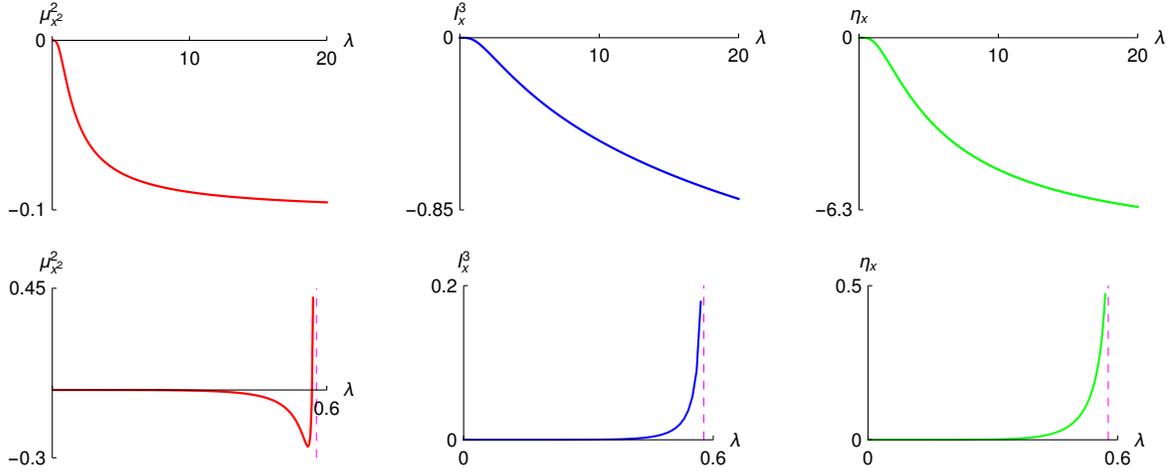


Figura 7.11: Primera fila: gráficas de  $\mu_{x^2}^2, I_x^3$  y  $\eta_x$  contra  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\mu_{x^2}^2, I_x^3$  y  $\eta_x$  contra  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

bien el comportamiento es similar las interpretaciones obtenidas de  $I_x^3$  y  $\eta_x$  son diferentes.  $\eta_x$  es negativo cuando el segundo (término de tres variables) domina mientras que  $I_x^3$  es negativo cuando dominan las correlaciones de pares (dos variables).

La **Figura 7.12** presenta las medidas para el estado  $|001\rangle$ . Aquí, los valores de  $\eta_x$  que se muestran no contienen el  $-2$  de la ecuación (5.20) ya que existe una correlación estadística en  $\lambda = 0$ . Para el potencial atractivo todas las medidas son consistentes en comportamiento y muestran la transición positiva a negativa para mayor  $\lambda$ . La interpretación de  $I_x^3$  es que el sistema pasa de una situación en la que las interacciones sinérgicas son dominantes a una en la que prevalecen las interacciones por pares. En el caso del potencial repulsivo  $\mu_{x^2}^2$  aumenta negativamente con  $\lambda$  más grande mientras que las otras dos medidas aumentan positivamente. Por otro lado, el comportamiento de la medida  $\mu_{x^2}$  no es consistente con las otras dos medidas ( $I_x^3$  y  $\eta_x$ ). También son significativas las similitudes entre  $I_x^3$  y  $\eta_x$  tanto para potenciales de pares atractivos como repulsivos.

Las curvas  $\eta_x^r$  para los estados  $|000\rangle$  (fila superior) y  $|001\rangle$  (fila inferior) en presencia de potenciales atractivos (columna izquierda) y repulsivos (columna derecha) se presentan en la **Figura 7.13**. La intensidad del potencial separa la medida en distintas regiones con  $\lambda$  menor  $\eta_x^r > 1$ , mientras que  $\eta_x^r < 1$  para  $\lambda$  mayor. Por lo tanto, la curtosis por pares es mayor que la de tres variables con  $\lambda$  mayor. El estado  $|000\rangle$  con potencial repulsivo es el único que no presenta esta transición. Curiosamente, los potenciales atractivos en ambos

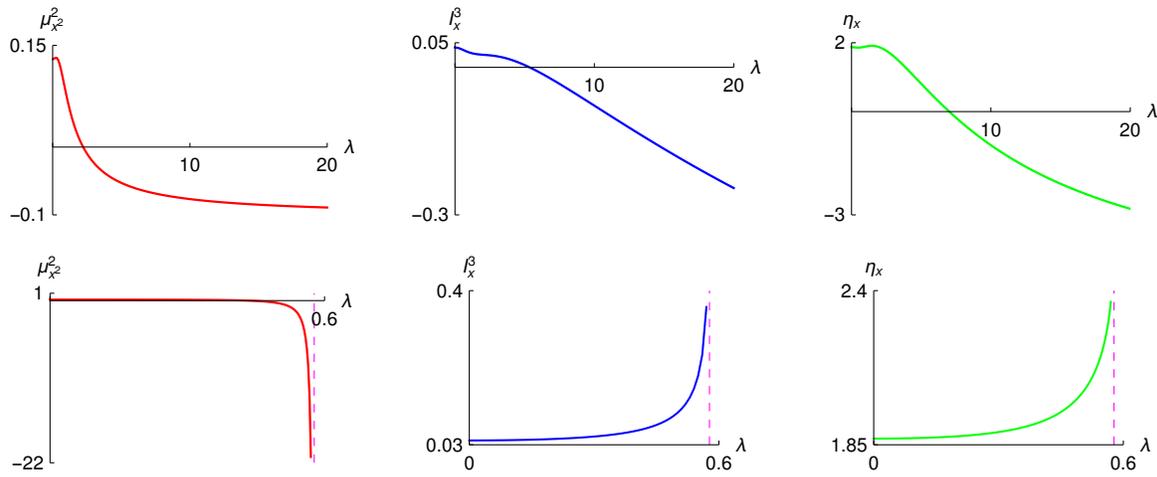


Figura 7.12: Primera fila: gráficas de  $\mu_{x^2}^2, I_x^3$  y  $\eta_x$  contra  $\lambda$  para el potencial atractivo. Segunda fila: gráficas de  $\mu_{x^2}^2, I_x^3$  y  $\eta_x$  contra  $\lambda$  para el potencial repulsivo. Todas las gráficas corresponden al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

estados se caracterizan por curvas que presentan puntos críticos en valores menores de  $\lambda$ . Además,  $\eta_x^r$  decae monótonamente a valores mayores de  $\lambda$  para todos los casos.

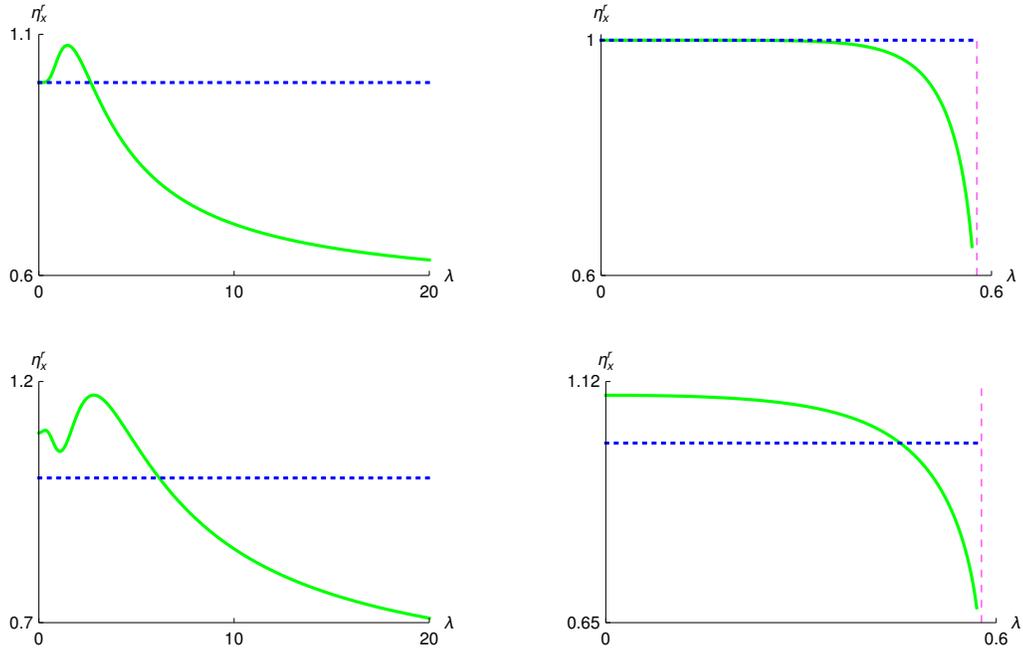


Figura 7.13: Primera fila: gráficas de  $\eta_x^r$  contra  $\lambda$  para el potencial atractivo (izquierda) y el potencial repulsivo (derecha), correspondientes al estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1$ . Segunda fila: gráficas de  $\eta_x^r$  contra  $\lambda$  para el atractivo potencial (izquierda) y potencial repulsivo (derecha), correspondientes al estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1$ . Las líneas horizontales azules corresponden a  $\eta_x^r = 1$ . Las líneas verticales discontinuas corresponden al valor límite del potencial repulsivo.

### 7.2.1.2. Espacio de momentos

En este apartado presentamos los comportamientos de las medidas informacionales y de cokurtosis en espacio de momentos para los estados basales.

En la **Figura 7.14** se presenta una comparación de las medidas por pares, donde se aprecia la similitud entre las medidas  $I_p$  y  $Cok(p_1, p_2)$ . El mínimo que está presente en  $I_p$  en el estado antisimétrico  $|001\rangle$  con potencial repulsivo, también está presente en la medida de  $Cok(p_1, p_2)$ . En este estado  $\tau_p$  tiene un valor negativo en valores de  $\lambda$  pequeños y pasa a valores positivos a medida que  $\lambda$  aumenta. Este punto de transición también es detectado por los mínimos en  $I_p$  y en  $Cok(p_1, p_2)$  que aparecen en la misma región. La posición de estos mínimos cambia a valores más pequeños en comparación con el punto de transición.

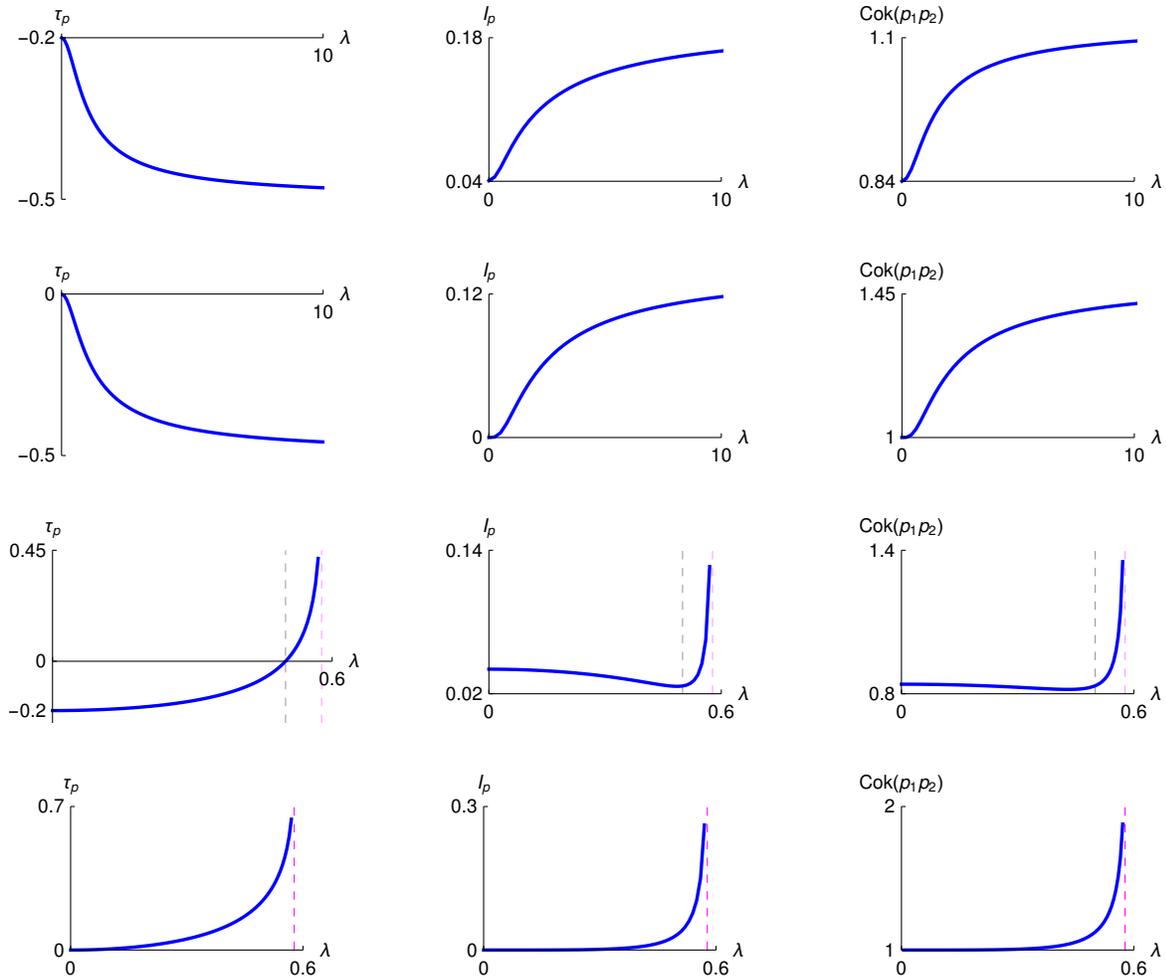


Figura 7.14: Gráficas del comportamiento de las medidas de correlación por pares contra la intensidad de un potencial de interacción atractivo y repulsivo en el espacio de momentos, para el estado  $|001\rangle$  (primera, tercera filas) y el estado  $|000\rangle$  (segunda, cuarta filas). La línea discontinua magenta corresponde al valor límite del potencial repulsivo, mientras que la línea discontinua negra ( $\lambda = 0,5$ ) corresponde al punto de transición en el coeficiente de correlación.

La **Figura 7.15** presenta la comparación entre las medidas de tercer orden y de orden superior. Las medidas  $I_3^p$  son consistentes en las tendencias con  $Cok(p_1, p_2, p_3)$  excepto para el estado antisimétrico  $|001\rangle$  con potencial atractivo cuya cokurtosis muestra un máximo.

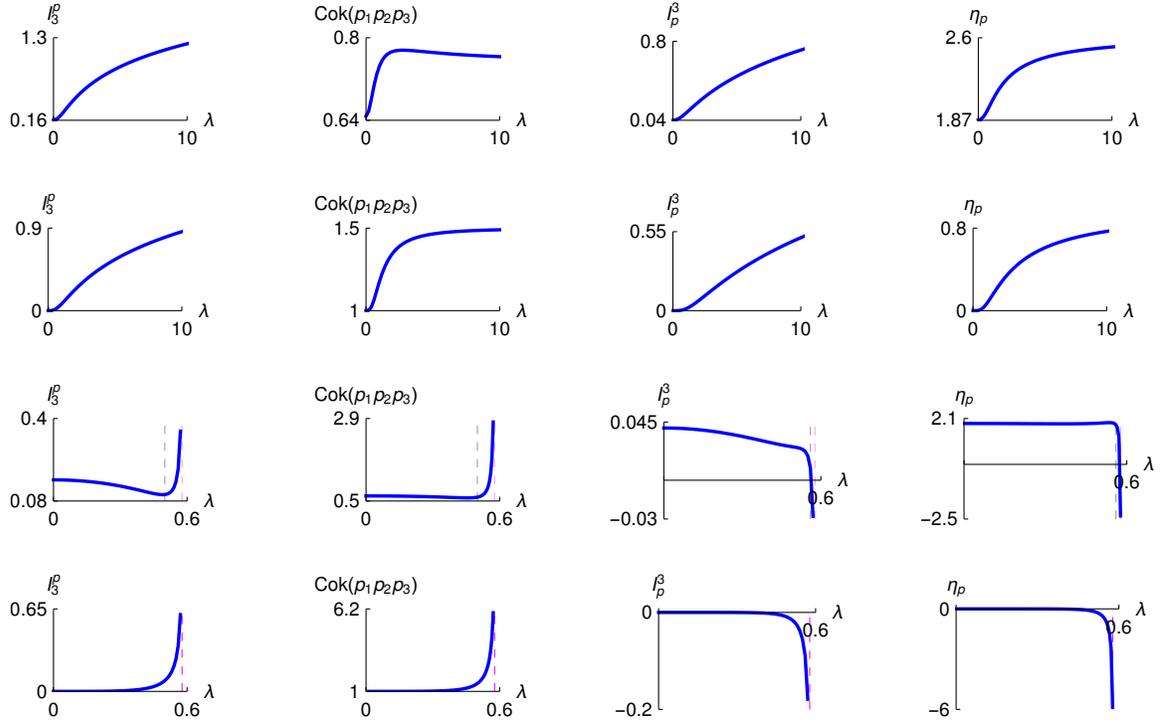


Figura 7.15: Gráficas del comportamiento de las medidas de correlación de tercer orden contra la intensidad para un potencial de interacción atractivo y repulsivo en el espacio de momentos, para el estado  $|001\rangle$  (primera, tercera filas) y el estado  $|000\rangle$  (segunda, cuarta filas). La línea vertical discontinua corresponde al valor límite del potencial repulsivo.

La presencia del mínimo en  $I_3^p$  para el estado  $|001\rangle$  con potencial repulsivo también es capturado por un mínimo en  $Cok(p_1, p_2, p_3)$  en la misma región. Por otro lado tenemos una gran similitud entre la información de tercer orden  $I_3^p$  y la medida  $\eta_p$  basada en las cokurtosis.  $\eta_p$  captura la transición (positiva a negativa) en  $I_p^\beta$  a mayor  $\lambda$  en el estado  $|001\rangle$  con potencial repulsivo. Aquí enfatizamos que los valores de  $\lambda$  en el punto de transición son distintos para cada medida.

### 7.2.2. Estados excitados

En este apartado mostramos cómo la matriz de correlación y sus valores propios se relacionan con las distintas medidas informacionales de pares.

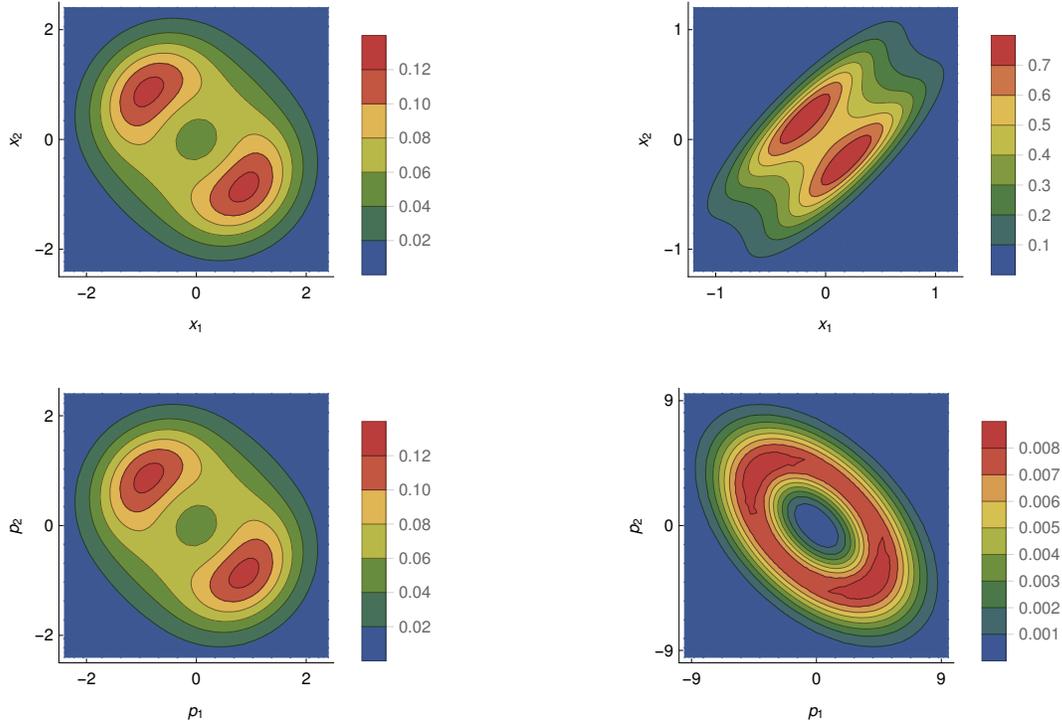


Figura 7.16: Gráficas de contorno de la función de densidad de pares para el estado  $|011\rangle$  con potencial atractivo  $\lambda = 0, 10$  (izquierda-derecha), en el espacio de posición (fila superior) y en el espacio de momentos (fila inferior).

En la **Figura 7.16** tenemos las densidades de contorno de pares en espacio de posición y momentos para el estado  $|011\rangle$  con potencial atractivo para dos valores de  $\lambda$ . Vemos que las densidades de pares sufren reorganizaciones a medida que varía el parámetro  $\lambda$ . Por ejemplo, la gráfica en espacio de posición con  $\lambda = 0$  donde tenemos que las áreas con una densidad mayor corresponden a regiones donde  $x_1$  y  $x_2$  son de signo diferente (con una correlación negativa o relación negativa). En  $\lambda = 10$  aparecen regiones de mayor densidad donde  $x_1$  y  $x_2$  son del mismo signo (con una correlación positiva o relación positiva). Es decir, los valores máximos en la densidad de pares reducida se orientan primero en la diagonal de pendiente negativa ( $\lambda = 0$ ) y luego en una de pendiente positiva ( $\lambda = 10$ ). Por

otro lado, no se perciben diferencias en las características de las densidades en momentos cuando  $\lambda$  cambia. Las áreas de mayor densidad se localizan en regiones donde  $p_1$  y  $p_2$  tienen signos opuestos (con una correlación negativa o relación negativa) para ambos valores de  $\lambda = 0, 10$ . Los valores máximos de la densidad están orientados hacia una diagonal de pendiente negativa en ambos casos. En  $\lambda = 10$  estas áreas ahora están deslocalizadas sobre regiones donde  $p_1$  y  $p_2$  están dispersas.

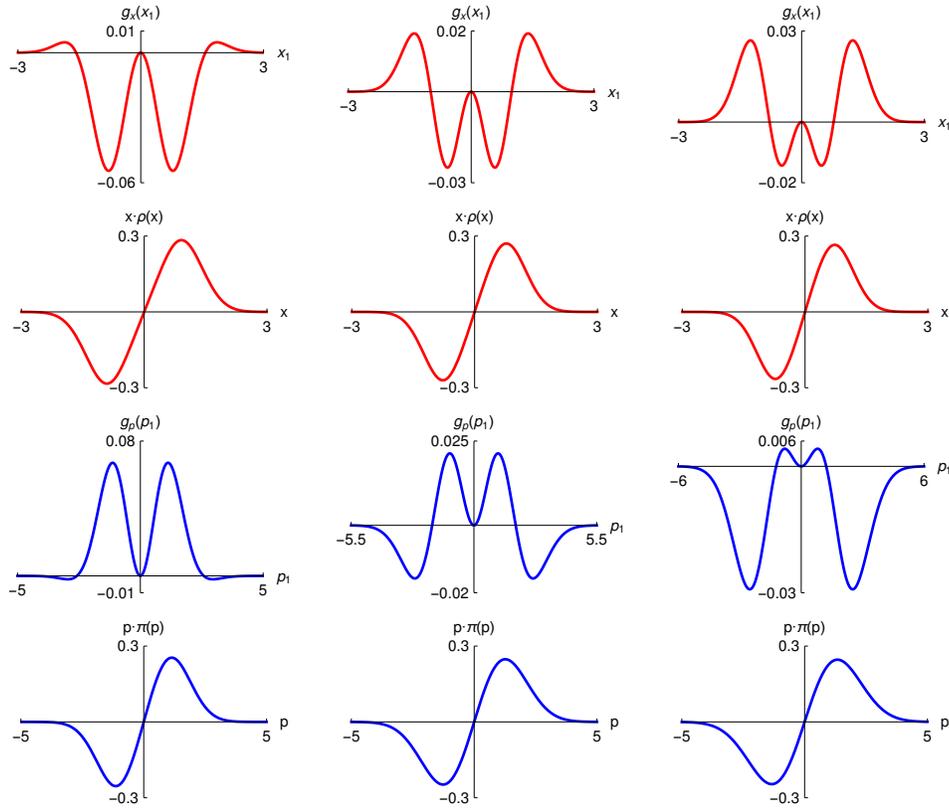


Figura 7.17: Gráficas de  $g_x(x_1)$  frente a  $x_1$  y  $x \cdot \rho(x)$  frente a  $x$  para el estado  $|011\rangle$  (rojo, filas superiores). Gráficas de  $g_p(p_1)$  vs  $p_1$  y  $p \cdot \pi(p)$  vs  $p$  para el estado 100 (azul, filas inferiores). Primera columna ( $\lambda = 1$ ), segunda columna ( $\lambda = 1,63$ ), tercera columna ( $\lambda = 2$ ).

En la primera fila de la **Figura 7.17** se ilustra el comportamiento local de  $\langle x_1 x_2 \rangle$  como función de  $x_1$

$$g_x(x_1) = x_1 \int_{-\infty}^{\infty} x_2 \Gamma(x_1, x_2) dx_2, \quad (7.2)$$

para diferentes valores de  $\lambda$ . Esto se compara con el comportamiento local de  $x\rho(x)$  que se presenta en la segunda fila. Dado que  $\langle x \rangle = 0$  se puede apreciar que el comportamiento local se divide en dos regiones con valores negativos y positivos de  $x$  cuyas áreas se cancelan entre sí. Esto es distinto de  $g_x(x_1)$  donde hay pares de regiones positivas y negativas tanto en valores negativos y positivos de  $x_1$ . Además, estos pares de regiones son consecuencia de una simetría impuesta por la segunda variable o cuasipartícula. La proporción de estas áreas negativas y positivas es lo que determina si  $\tau_x$  tiene un valor positivo o negativo. De la misma forma se aprecia cómo las regiones negativas dominan las regiones positivas para valores más pequeños de  $\lambda$  (gráfico de la izquierda) mientras que la inversa es cierta para valores más grandes de  $\lambda$  (gráfico de la derecha). Las dos primeras gráficas en el centro corresponden a un valor de  $\lambda$  donde  $\tau_x$  es cero. En este caso se ilustra cómo las regiones positivas y negativas se cancelan entre sí cuando  $\tau_x$  es cero. En contraste para una densidad de pares separable todas estas gráficas son cero. Por otra parte las gráficas correspondientes a  $g_p(p_1)$ , para el espacio de momentos estado  $|100\rangle$ , se presentan para ilustrar que esta descripción también es válida en  $p$ .

La **Figura 7.18** muestra tres medidas de correlación por pares para el estado anti-simétrico  $|011\rangle$  en función de  $\lambda$  para un potencial de pares atractivo, tanto en espacio de posición como en espacio de momentos. Los cambios en las correlaciones estadísticas debido a los cambios en las densidades son capturados por las medidas de correlación. Aquí vemos cómo contrastan estas medidas con el comportamiento de los sistemas no interactuantes en función de  $\omega$  presentado previamente en la **Figura 7.1**.

El coeficiente de correlación pasa de valores negativos a positivos a medida que aumenta  $\lambda$ . Es negativo para valores más pequeños de  $\lambda$  debido a la simetría de la función de onda. De hecho, es posible ajustar el tipo de correlación (negativa o positiva) ajustando la fuerza del potencial atractivo. Los valores negativos del coeficiente de correlación se relacionan con la orientación de la pendiente negativa en el semieje mayor de la densidad elipsoidal en **Figura 7.16**. De manera similar, los valores positivos del coeficiente de correlación corresponden a densidades de pares cuyas formas son elipses con semiejes mayores orientados hacia una pendiente positiva. Esto ejemplifica el significado de correlación positiva y negativa en estos sistemas. Esta discusión también es válida en todos los estados analizados.

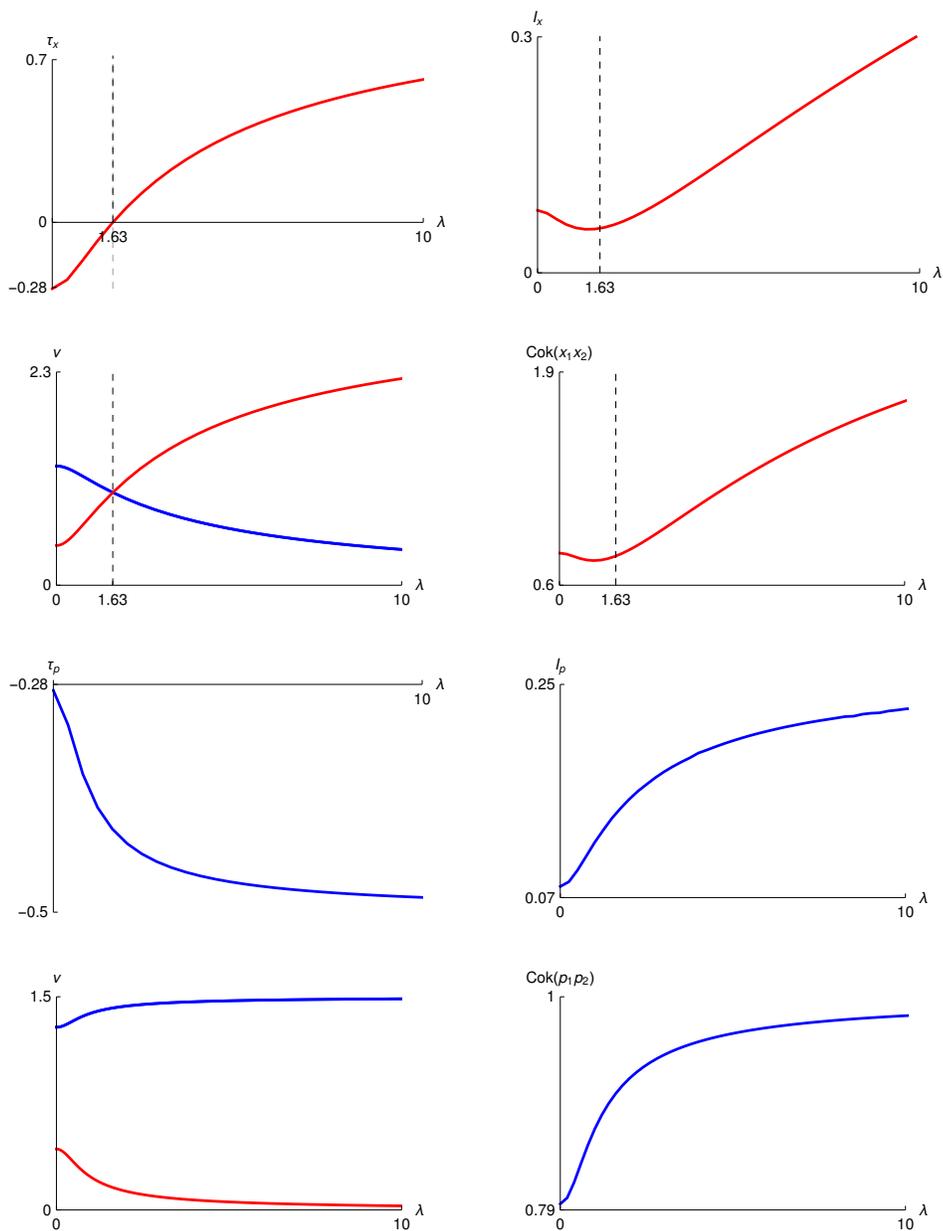


Figura 7.18: Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|011\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea vertical discontinua muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación.

El valor cero de  $\tau_x$  en el punto de transición no implica que la densidad de pares correspondiente sea factorizable, sino que la simetría en la densidad en este valor de  $\lambda$  particular da como resultado que

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(x_1) dx_1 = 0. \quad (7.3)$$

Por otro lado, también mostramos el comportamiento de los dos valores propios de la matriz de correlación, donde un valor propio aumenta en función de  $\lambda$  mientras que el otro disminuye. Se puede ver que el punto de transición en el coeficiente de correlación se captura mediante un cruce de los valores propios de la matriz de correlación. El punto de transición en  $\tau_x$  también es capturado por un mínimo en la información mutua por pares y en la cokurtosis. Existe una gran similitud en el comportamiento de estas dos medidas entre pares. Los valores de  $\lambda$  donde ocurren estos mínimos están en la misma región pero no coinciden exactamente con el valor de  $\lambda$  donde se ve el cero en  $\tau_x$ . No se esperan coincidencias exactas ya que  $\tau_x$  es una medida de correlaciones lineales mientras que la información mutua captura correlaciones no lineales.

La situación es diferente en el espacio de momentos. No hay puntos de transición o cruces de valores propios y todas las medidas aumentan en magnitud a medida que aumenta  $\lambda$ . Notamos también la similitud en el comportamiento entre  $I_p$  y  $Cok(p_1, p_2)$ .

Los resultados para el estado antisimétrico  $|011\rangle$  pero en presencia de un potencial de interacción repulsivo se presentan en la **Figura 7.19**. El punto de transición y el cruce ocurren ahora en el espacio de momentos con  $\tau_p$  el cual pasa de valores negativos a valores positivos. El punto de transición también es capturado por un mínimo en  $I_p$  y  $Cok(p_1, p_2)$ . Es notable que ambas medidas no lineales captan el punto de transición. Las magnitudes de las tres medidas aumentan monótonamente con  $\lambda$  en espacio de posición. Estos resultados son congruentes con lo observado en el estado fundamental antisimétrico  $|001\rangle$ .

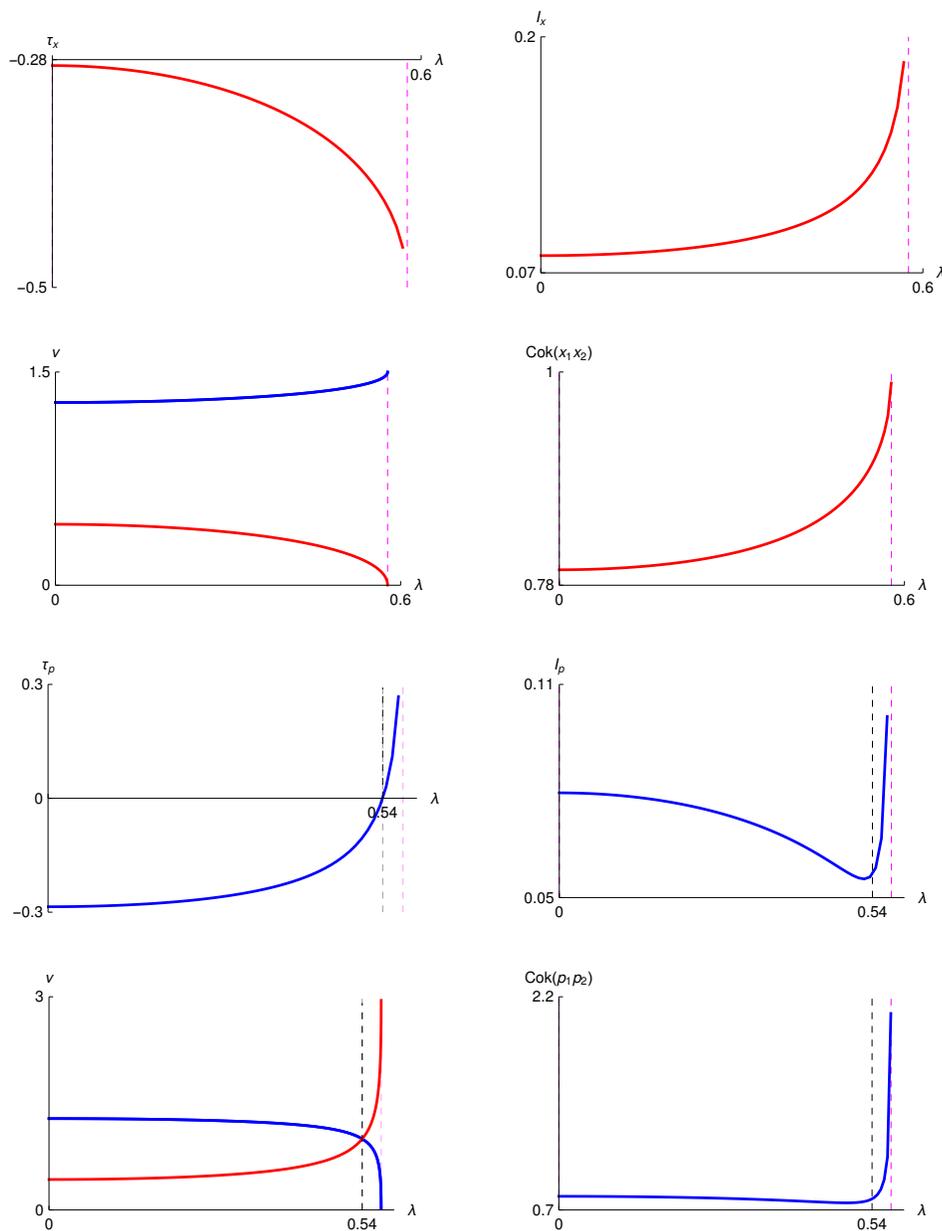


Figura 7.19: Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|011\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea discontinua magenta indica el valor límite de  $\lambda$ , mientras que la línea discontinua negra muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación.

La **Figura 7.20** presenta los resultados para el estado excitado simétrico  $|100\rangle$  en presencia de un potencial atractivo. La transición y el cruce ahora ocurren en el espacio de momentos opuesto al estado antisimétrico  $|011\rangle$  donde ocurre en el espacio de posición.  $\tau_p$  en este caso pasa de valores positivos a negativos a medida que aumenta  $\lambda$ . No hay transición ni cruces en espacio de posición. En todos los casos existe una sorprendente similitud entre la información mutua y las curvas de cokurtosis. Este resultado puede explicarse observando que ambas medidas son sensibles a las correlaciones no lineales. La influencia de un potencial repulsivo se puede observar en la **Figura 7.21**. La transición y los cruces ahora aparecen en el espacio de posición opuesto al potencial atractivo mientras que ninguno está presente en el espacio de momentos. Las medidas de información mutua y cokurtosis también muestran una fuerte similitud.

Es importante tomar en cuenta que no hay transiciones o cruces en el estado simétrico basal  $|000\rangle$  en espacio de posición ni en espacio de momentos. Esto es independiente de la presencia de un potencial atractivo o repulsivo. En resumen, la aparición de puntos de transición o cruces en un espacio particular parece estar controlada por la simetría de la función de onda y la naturaleza del potencial de interacción que está presente (atractivo o repulsivo).

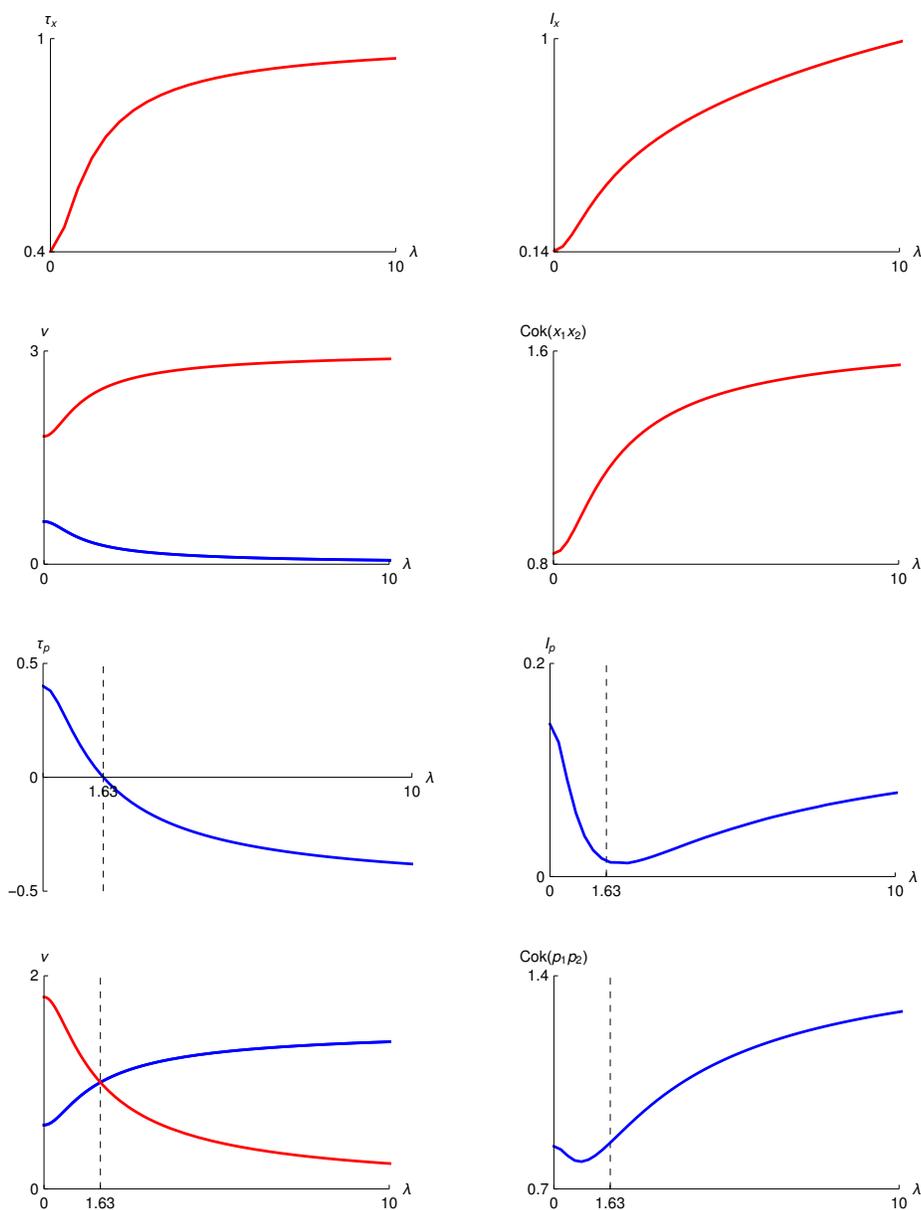


Figura 7.20: Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|100\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea vertical discontinua muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación.

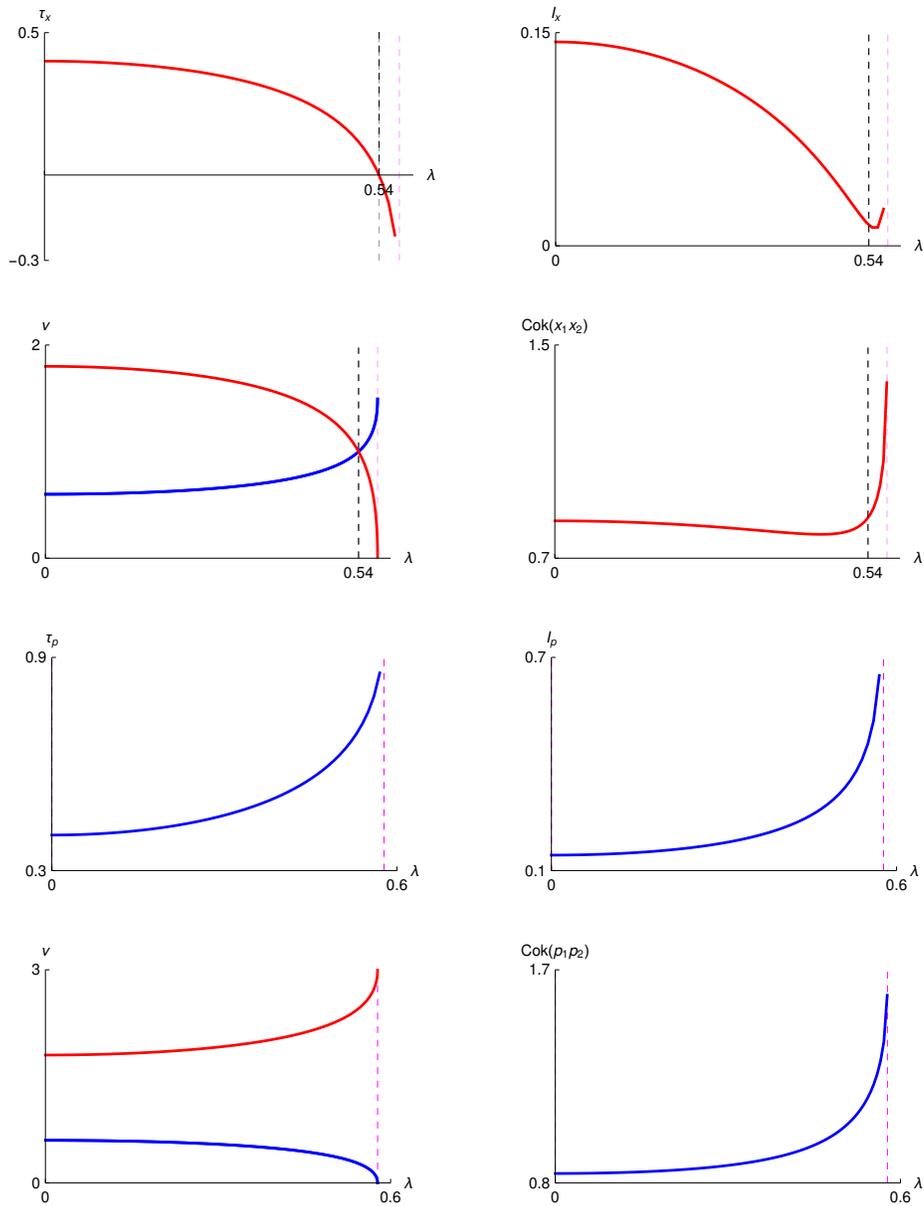


Figura 7.21: Gráfica del coeficiente de correlación e información mutua vs  $\lambda$  en espacio de posición (primera fila) para el estado  $|100\rangle$ . Gráfica de los valores propios  $1 + 2\tau(\lambda)$  (rojo),  $1 - \tau(\lambda)$  (azul) y  $Cok$  vs.  $\lambda$  en espacio de posición (segunda fila) para el mismo estado. Las dos filas inferiores presentan las correspondientes medidas en espacio de momentos. La línea discontinua magenta indica el valor límite de  $\lambda$ , mientras que la línea discontinua negra muestra el punto de transición en el coeficiente de correlación.

7.2.2.1. Medidas de información de orden alto

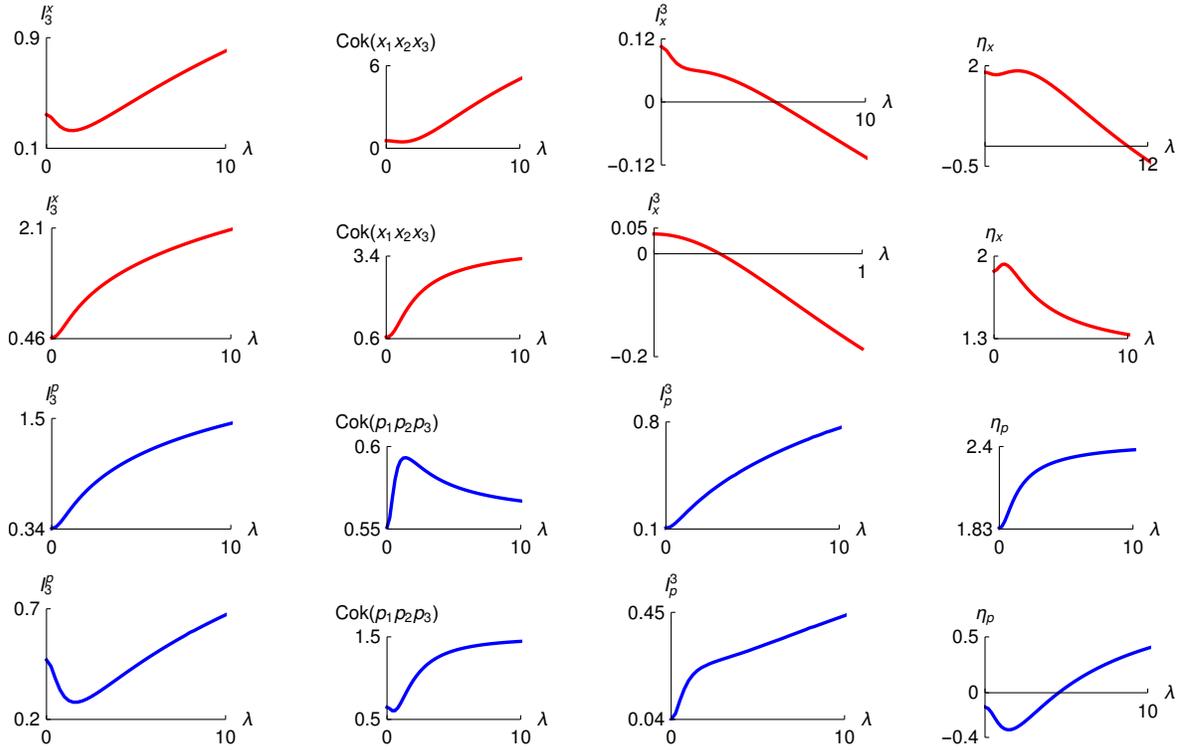


Figura 7.22: Gráficas que muestran el comportamiento de las medidas de correlación de tercer orden en función de la intensidad del potencial de interacción atractivo en espacio de posición (rojo) y en espacio de momentos (azul). La primera y tercera fila corresponden al estado  $|011\rangle$  mientras que la segunda y cuarta fila al estado  $|100\rangle$ .

Los resultados de las medidas de orden superior (tercer orden) se presentan en la **Figura 7.22** para los estados excitados antisimétrico  $|011\rangle$  y simétrico  $|100\rangle$  en presencia de un potencial atractivo en espacio de posición y en espacio de momentos. Hay puntos de transición en el espacio de posición para ambos estados donde la información de interacción pasa de valores positivos a negativos a medida que aumenta  $\lambda$ . Aquí, el predominio de interacciones sinérgicas o redundantes puede controlarse mediante la intensidad del potencial. Este comportamiento previamente observado en el estado antisimétrico basal  $|001\rangle$  no está presente en el estado simétrico basal  $|000\rangle$ . Este resultado ilustra una diferencia fundamental en el comportamiento entre el estado basal y el estado simétrico excitado. Por tanto, estas transiciones están presentes tanto en estados excitados simétricos como

antisimétricos. Por otro lado, no se observan puntos de transición en el espacio de momentos para estos sistemas con un potencial de interacción atractivo.  $I_p^3$  aumenta en magnitud a medida que aumenta  $\lambda$ .

También hay un comportamiento semejante entre la información total y las medidas de cokurtosis tanto en espacio de posición como en espacio de momentos. El mínimo que está presente en  $I_3$  también es capturado por la medida de  $Cok$ . Estos mínimos en  $I_3$  son el resultado de una estructura similar en la información mutua  $I$ . Sin embargo, hay una excepción a este comportamiento para el estado  $|011\rangle$  en espacio de momentos. Un máximo en  $Cok(p_1, p_2, p_3)$  está presente mientras que no hay uno correspondiente en  $I_3^p$ . Esto se observa en el estado basal antisimétrico  $|001\rangle$ .

Este resultado enfatiza que aunque ambas son medidas de correlaciones no lineales existen diferencias. Por otro lado, cabe señalar que existe consistencia entre el comportamiento de la información mutua y las medidas de cokurtosis a nivel de dos variables en los estados estudiados.

La medida de correlación de orden superior  $\eta$  se presenta para comparar con la información de tercer orden. Hay similitudes en las características de ambas medidas para el estado  $|011\rangle$  pero una semejanza menor para el estado  $|100\rangle$ .

La **Figura 7.23** presenta los comportamientos de las medidas para ambos estados en presencia de un potencial repulsivo. Los puntos de transición donde la información de tercer orden cambia de signo ahora ocurren en el espacio de momentos. Este resultado es consistente con el estado  $|001\rangle$ . Hay un punto de transición en el estado simétrico  $|100\rangle$  que no está presente en el estado basal  $|000\rangle$ . Así, la presencia de un punto de transición en un espacio particular parece depender de la naturaleza del potencial de interacción (atractivo o repulsivo) y no de la simetría de la función de onda. Esto es diferente de las medidas de pares discutidas anteriormente, donde la presencia de puntos de transición en un espacio particular depende tanto de la naturaleza de la interacción como de la simetría de la función de onda. El valor  $\lambda$  para un potencial atractivo donde la información de tercer orden tiene un cruce en espacio de posición para un potencial atractivo está relacionado con un valor donde hay un cruce en espacio de momentos para un potencial repulsivo de  $\lambda$  mediante la expresión previamente discutida en la ecuación (2.70).

Existe una congruencia general en el comportamiento entre las medidas  $I_3$  y  $Cok$  excepto para el estado  $|011\rangle$  en espacio de posición. Aquí, la medida de  $Cok$  presenta un máximo que no está presente en  $I_3$  similar al caso del potencial atractivo en espacio de momentos (**Figura 7.22**). Esto se puede entender a partir de la relación en la ecuación (2.70) donde las características de correlación en un espacio e interacción en particular se transfieren al otro espacio con una interacción opuesta. El mínimo cuando está presente en  $I_3$  también está presente en la medida de  $Cok$ . Por lo tanto, existe un comportamiento congruente entre  $I_3$  y  $Cok$  en el estado simétrico  $|100\rangle$  pero no en el estado antisimétrico

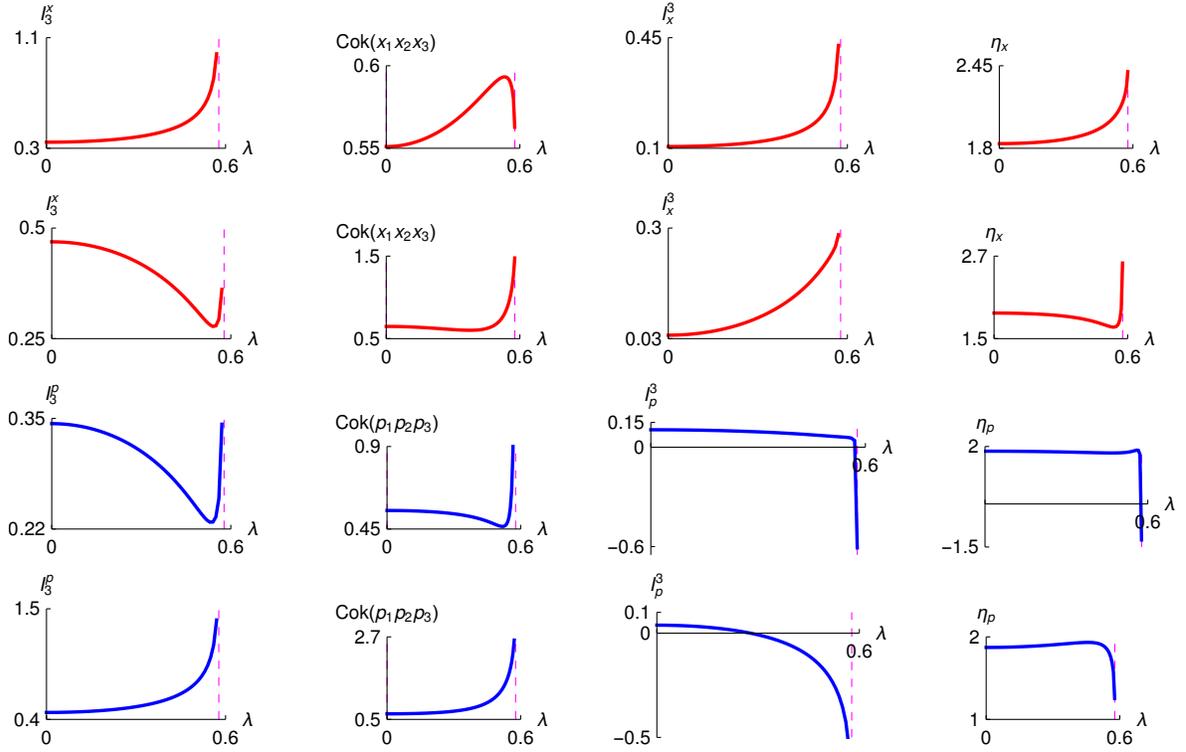


Figura 7.23: Gráficas que muestran el comportamiento de las medidas de correlación de tercer orden en función de la intensidad del potencial de interacción repulsivo en espacio de posición (rojo) y en espacio de momentos (azul). La primera y tercera fila corresponden al estado  $|011\rangle$  mientras que la segunda y cuarta fila al estado  $|100\rangle$ . La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

$|011\rangle$ . Dicha diferencia se observa entre los estados basal simétrico  $|000\rangle$  y antisimétrico  $|001\rangle$ . La medida  $\eta$  se asemeja a la  $I^3$  en el estado  $|011\rangle$  y en menor grado en el estado  $|100\rangle$  similar al caso de potencial atractivo.

La **Figura 7.24** presenta la medida  $\eta^r$  y los dos valores propios más pequeños de la matriz de cokurtosis para los dos estados excitados de diferente simetría en espacio de posición y en espacio de momentos. Los cruces en estos valores propios ocurren cuando

$$3Cok = kur, \text{ o cuando } 3\langle x_1^2 x_2^2 \rangle = \langle x^4 \rangle, \quad (7.4)$$

esta condición se cumple para  $\lambda \rightarrow 0$  en el estado simétrico  $|100\rangle$  pero no en el estado antisimétrico  $|011\rangle$ . También hay valores de  $\lambda \neq 0$  donde los valores propios se cruzan lo cual ocurre para ambos estados excitados. Encontramos que la simetría de la función

de onda junto con el tipo de potencial de tercer orden es responsable de la aparición de estos cruces. Por ejemplo, en el estado antisimétrico  $|011\rangle$  hay un cruce en espacio de posición con un potencial de interacción atractivo y uno en el espacio de momentos para un potencial repulsivo. Esta situación se invierte para el estado simétrico  $|100\rangle$ . El cruce en el espacio de posición ocurre para el potencial repulsivo y en el espacio de momentos para el potencial atractivo.

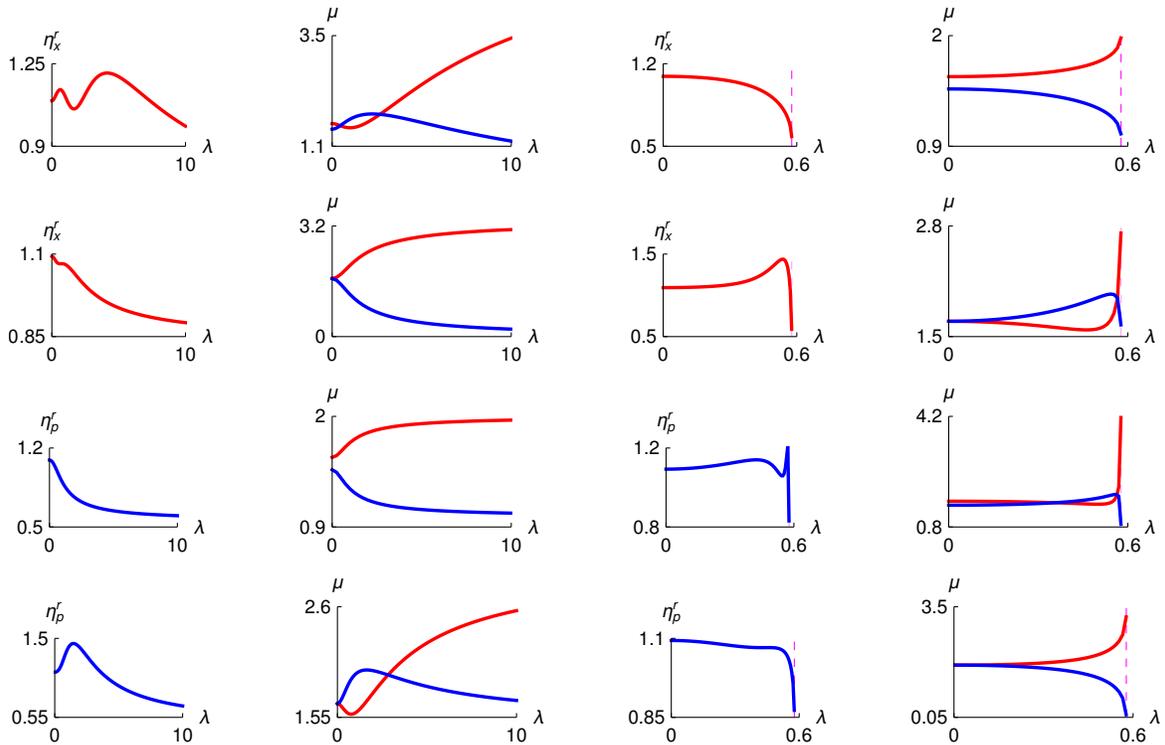


Figura 7.24: Gráficas que muestran el comportamiento de las medidas de orden superior basadas en la cokurtosis contra la intensidad del potencial de interacción atractivo o repulsivo en espacio de posición y en espacio de momentos para el estado  $|011\rangle$  (primera ( $x$ ) y tercera ( $p$ ) filas) y el estado  $|100\rangle$  (segunda ( $x$ ) y cuarta ( $p$ ) filas). Los dos valores propios distintos de cero más pequeños de la matriz de cokurtosis se presentan en la cuarta columna con  $2Cok(\lambda)$  (rojo) y  $kur(\lambda) - Cok(\lambda)$  (azul). La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

Es significativo que los cruces en los valores propios de la matriz de cokurtosis donde  $\lambda \neq 0$  ocurren cuando las medidas de cokurtosis por pares correspondientes exhiben mínimos. Estos cruces van acompañados de la aparición de puntos extremos para la medida

propuesta  $\eta^r$ . En la **Tabla 5.1** se resume la información sobre los valores de  $\lambda$  donde ocurren cruces en los valores propios de las matrices  $\nu$  y  $\mu$  y se compara con los valores de  $\lambda$  donde se observan puntos extremos (cuando están presentes) en la medida  $\eta^r$ . Vemos que los puntos extremos en  $\eta^r$  ocurren en las mismas regiones donde están presentes los cruces en los valores propios de  $\nu$  o  $\mu$ . Por ejemplo, en la medida  $\eta_p^r$  estado  $|011\rangle$  con potencial repulsivo hay un mínimo en  $\eta_p^r$  en el mismo valor en que hay un cruce de los valores propios  $\nu$ . Mientras que el valor máximo en  $\eta_p^r$  está muy cercano al valor donde cruzan los valores propios en la matriz  $\mu$ . Esto también se observa en el caso del estado basal antisimétrico  $|001\rangle$  pero contrasta con el comportamiento del estado basal simétrico  $|000\rangle$  donde los únicos cruces en los valores propios de las matrices  $\nu$  y  $\mu$  están en el origen.

interacción / estado	$\nu$ (cruces)	$\mu$ (cruces)	$\eta_x^r$ (min, max)	$\eta_p^r$ (min, max)
atractivo $ 011\rangle$	1.63	(0.45, 2.67)	(1.63, 4.13)	-
repulsivo $ 011\rangle$	0.54	(0.35, 0.56)	-	(0.54, 0.57)
atractivo $ 001\rangle$	1.0	1.63	(1.1, 2.8)	-
repulsivo $ 001\rangle$	0.5	0.54	-	(0.5, 0.56)
atractivo $ 100\rangle$	1.63	2.82	-	(-, 1.46)
repulsivo $ 100\rangle$	0.54	0.56	(-, 0.53)	-
atractivo $ 000\rangle$	0	0	(-, 1.46)	-
repulsivo $ 000\rangle$	0	0	-	(-, 0.53)

Cuadro 7.1: Tabla comparativa para los valores de  $\lambda$  donde ocurren los puntos de máximos (max) y mínimos (min) en  $\eta^r$ , y los valores donde están presentes los cruces de los valores propios de las matrices  $\nu$  y  $\mu$  para los estados  $|011\rangle$  y  $|100\rangle$ .

### 7.3. Conclusiones

- El coeficiente de correlación cuando presenta un cruce entre regiones positivas y negativas, dicho cruce está relacionado con la presencia de un mínimo en la información mutua. Esto se asocia con los cruces en los eigenvalores de la matriz de correlación correspondiente.
- La similitud entre el comportamiento de la información mutua y las medidas de cokurtosis es evidente en los sistemas de osciladores acoplados.

- En el caso de la correlación de alto orden para estados excitados (simétricos y antisimétricos) y basal (antisimétrico) vemos un punto de cruce donde la información de interacción de tercer orden cambia de valores positivos a negativos. Lo cual significa que el equilibrio de interacciones sinérgicas o redundantes se puede controlar con la intensidad del potencial de interacción entre pares.
- El comportamiento de la correlación total es en general consistente con el de la medida de cokurtosis de tres variables. Sin embargo, hay casos que presentan diferencias significativas y esto contrasta con la consistencia observada entre la información mutua de pares y la cokurtosis de dos variables.
- La medida de alto orden basada en momentos de la densidad que consiste en la diferencia entre la cokurtosis de tres y dos variables es consistente con la medida de correlación de alto orden. Mientras que la medida de alto orden basada en momentos de la densidad que consiste en el cociente entre la cokurtosis de tres y dos variables muestra estructura de máximos y mínimos.
- El análisis de las medidas basadas en momentos de las densidades se complementa con el estudio del comportamiento de los valores propios de la matriz de cokurtosis de dos variables. Los cruces en estos valores propios se relacionan con las regiones de transición en donde aparecen estructuras de máximos y mínimos en las nuevas medidas basadas en momentos de orden superior.

## Capítulo 8

# Medidas informacionales de Shannon vs. Medidas basadas en densidades acumulativas: estados basales

En esta sección se estudia una definición de la entropía residual acumulativa de tres variables que se utiliza para obtener expresiones de medidas de correlación de orden superior. Dichas medidas se basan en valores de densidades residuales acumulativas las cuales se comparan con medidas análogas a la teoría de la información. Además, se utilizan sistemas de osciladores no interactuantes e interactuantes de tres partículas cuyas funciones de onda se pueden representar analíticamente. Las funciones de onda interactuantes y no interactuantes se pueden ver en las **secciones (2.2-2.3)**. En el caso no interactuante se estudian los efectos de la indistinguibilidad sobre las medidas de información como función del potencial  $\omega$ . En el caso interactuante examinamos los efectos del potencial de acoplamiento  $\lambda$  atractivo o repulsivo sobre las medidas de información. El objetivo principal de esta discusión consiste en comparar las medidas usando entropías de Shannon y entropías de densidades acumulativas. Además, se presenta una discusión de las sumas entrópicas para ambas aproximaciones informacionales (entropías de Shannon – entropías acumulativas).

### 8.1. Osciladores no acoplados

Las entropías han sido discutidas previamente en función del potencial  $\frac{1}{\omega}$ , pero en este apartado se incluyen para comparar con los comportamientos de las nuevas medidas. La **Figura 8.1** presenta el comportamiento de las entropías de Shannon y las entropías acumulativas en función de  $\omega$ . Todas las entropías disminuyen con  $\omega$  por lo que las entropías

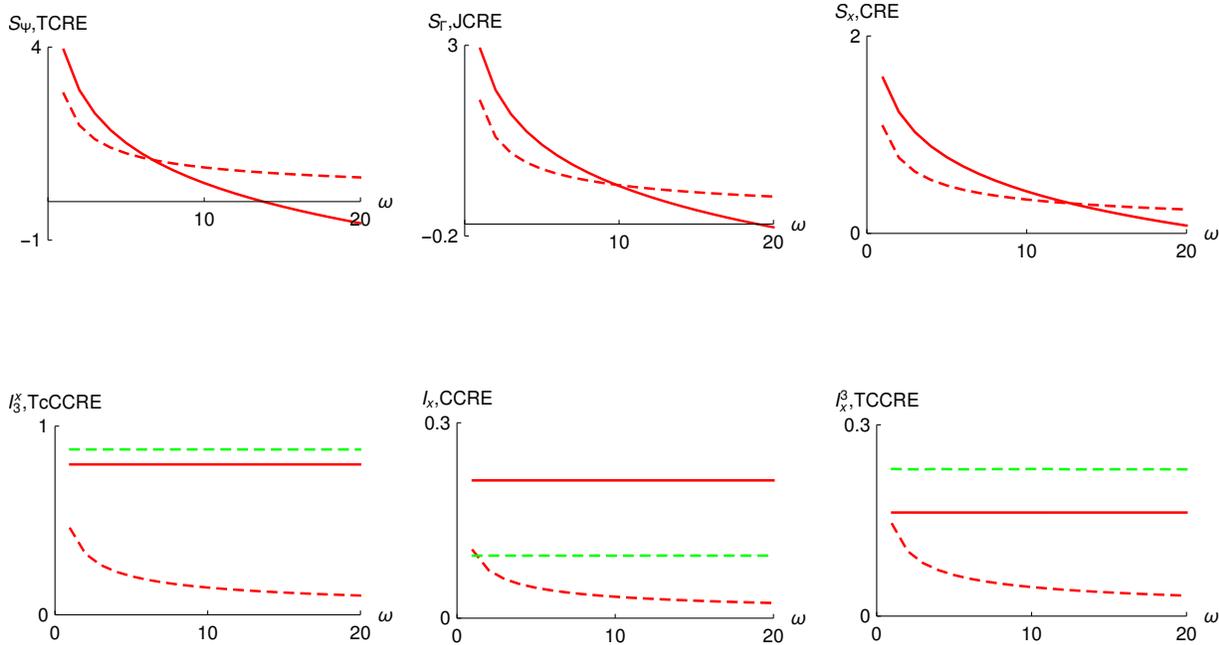


Figura 8.1: Primera fila: gráficas de las entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y  $TCRE$ ,  $JCRE$  y  $CRE$  (líneas discontinuas) en el espacio de posición contra  $\omega$ . Segunda fila: gráficas de  $I_3^x$ ,  $I_x$  y  $I_x^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) en el espacio de posición contra  $\omega$ . Las líneas discontinuas (verde) son  $0,2 * TcCCRE / CCRE$ ,  $CCRE / CRE$  y  $0,3 * TCCRE / CCRE$  respectivamente. Función de onda antisimétrica estado  $|012\rangle$ .

acumulativas y de Shannon son consistentes en su interpretación. Es decir, las densidades subyacentes se localizan al aumentar  $\omega$ . Vemos que  $S_\Psi$  y  $S_\Gamma$  presentan valores negativos para  $\omega$  mayores. Sin embargo,  $TCRE$  y  $JCRE$  se mantienen positivos por lo que se enfatiza la propiedad de que las densidades de supervivencia acumulativas están acotadas entre cero y uno por lo que tenemos entropías con valores positivos.

La segunda fila de la **Figura 8.1** muestra las medidas de correlación acumulativas y de Shannon. Las dos medidas exhiben una diferencia importante en sus comportamientos, ya que las medidas de Shannon son constantes con  $\omega$ . Por otro lado las medidas basadas en acumulativas disminuyen con  $\omega$ . En este caso el coeficiente de correlación es constante con  $\omega$  y negativo. Además, los comportamientos de  $I_x$  y  $\tau_x$  son consistentes.

## CAPÍTULO 8

Se puede conseguir un comportamiento constante en función de  $\omega$  a partir de los cocientes de las medidas acumulativas. Dichas curvas se presentan en **Figura 8.1** como  $CCRE/CRE$ ,  $TcCCRE/CCRE$  y  $TCCRE/CCRE$  (líneas discontinuas en verde), las cuales son constantes para todos los valores de  $\omega$ . Este resultado ilustra que las entropías acumulativas de una, dos y tres variables poseen la misma dependencia con  $\omega$ . El cambio de escala nos permite recuperar una interpretación que es coherente con las medidas de Shannon. Es decir, las correlaciones por pares y de orden superior son constantes en estos sistemas desacoplados.

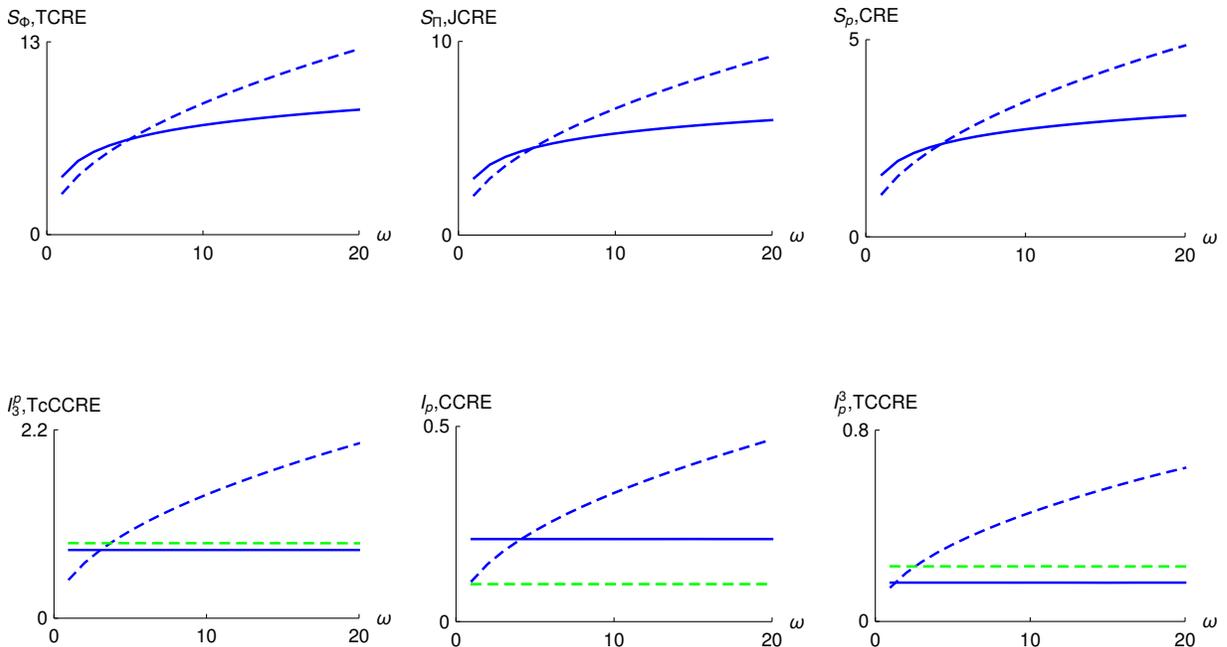


Figura 8.2: Primera fila: gráficas de entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y  $TCRE$ ,  $JCRE$  y  $CRE$  (líneas discontinuas) en el espacio de momentos contra  $\omega$ . Segunda fila: gráficas de  $I_3^p$ ,  $I_p$  e  $I_p^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) en el espacio de momentos contra  $\omega$ . Las líneas discontinuas (verde) son  $0,2 * TcCCRE/CCRE$ ,  $CCRE/CRE$  y  $0,3 * TCCRE/CCRE$  respectivamente. Función de onda antisimétrica estado  $|012\rangle$ .

En la **Figura 8.2** se presentan las medidas en el espacio de momentos donde las entropías de Shannon y acumulativas crecen con  $\omega$  y son consistentes en su comportamiento.

Es decir, las densidades en el espacio de momentos se deslocalizan al aumentar  $\omega$ . Las medidas de correlación basadas en Shannon son todas constantes como en el espacio de posición mientras que las medidas acumulativas ahora aumentan con  $\omega$ . La interpretación de las medidas acumulativas es que la magnitud de la correlación aumenta con  $\omega$  en el espacio de momentos mientras que disminuye en el espacio de posición.

El coeficiente de correlación aquí es constante con  $\omega$  y tiene un valor negativo. En este sentido, tanto  $I_p$  como  $\tau_p$  son consistentes en su comportamiento. Al igual que en el espacio de posición el cambio de escala de las medidas acumulativas produce un comportamiento constante que es consistente con las medidas de Shannon. Además, se observaron resultados similares para la función de onda del estado simétrico correspondiente.

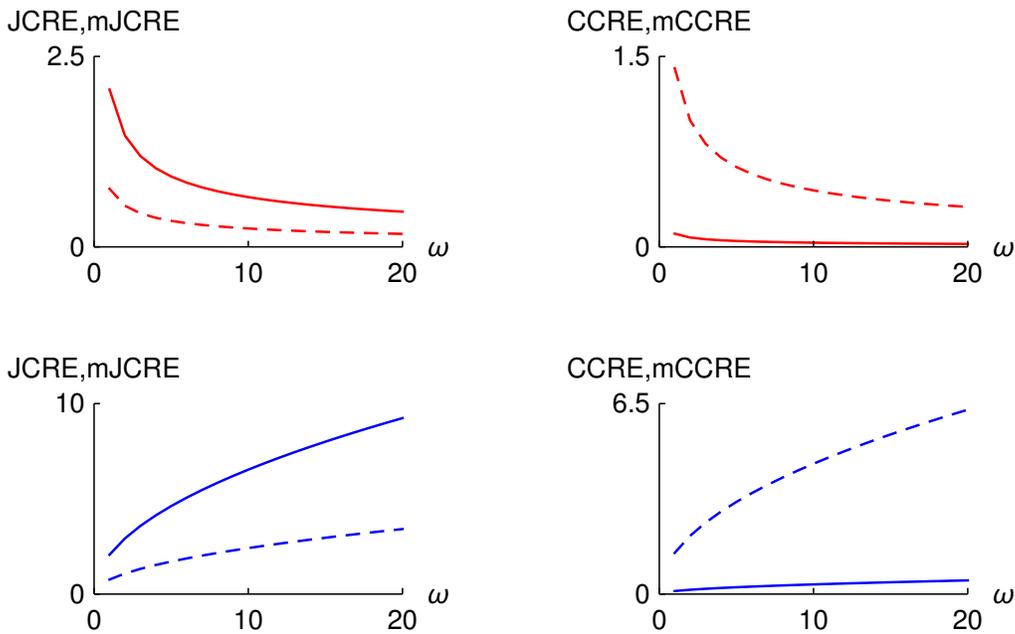


Figura 8.3: Gráficas de  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial  $\omega$ . Función de onda antisimétrica estado  $|012\rangle$ , espacio de posición (rojo) y espacio de momentos (azul).

En la **Figura 8.3** vemos como en espacio de posición las medidas de  $JCRE$ ,  $mJCRE$ ,  $CCRE$  y  $mCCRE$  son decrecientes al aumentar el valor de  $\omega$ . Mientras que en espacio de momentos  $JCRE$ ,  $mJCRE$ ,  $CCRE$  y  $mCCRE$  son crecientes al aumentar el valor de  $\omega$ . Así, tanto  $mJCRE$  como  $mCCRE$  son consistentes con lo observado en [72] para el caso de dos osciladores no interactuantes.

## 8.2. Osciladores acoplados para la función de onda simétrica

Ahora examinamos el sistema interactuante  $|000\rangle$  para un potencial atractivo en espacio de posición y  $\omega = 1,0$ . La **Figura 8.4** muestra los comportamientos de las medidas entrópicas en función del potencial  $\lambda$ .

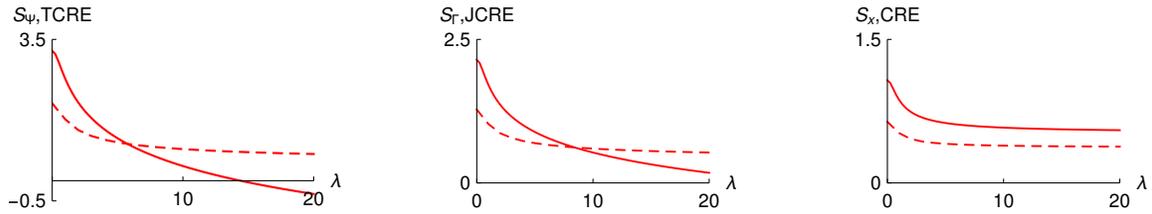


Figura 8.4: Gráficas de las entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y  $TCRE$ ,  $JCRE$  y  $CRE$  (líneas discontinuas) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de posición para el estado  $|000\rangle$  con potencial atractivo y  $\omega = 1,0$ .

Vemos cómo las entropías de Shannon y acumulativas disminuyen al aumentar  $\lambda$  y son consistentes en su comportamiento aunque las formas funcionales son diferentes.  $TCRE$  conserva su positividad para valores de  $\lambda$  grandes, mientras que  $S_\Psi$  tiene valor negativo.

Por otro lado, en la columna izquierda de la **Figura 8.5** se presentan las gráficas de la densidad de supervivencia y la densidad principal reducida a una variable en espacio de posición. Aquí, se observa cómo el incremento en la intensidad del potencial atractivo provoca la localización en ambas densidades alrededor del origen. Así, la localización se manifiesta en la disminución de las entropías (ver **Figura 8.4**). Además, existe otra diferencia entre la densidad principal y la densidad de supervivencia, ya que las densidades principales se pueden representar analíticamente y las densidades de supervivencia no tienen expresiones en forma cerrada. Estas densidades de supervivencia se calculan mediante la integración numérica de las densidades principales.

Las magnitudes de las medidas de correlación acumulativa y de Shannon en la **Figura 8.6** crecen con  $\lambda$  y son consistentes en su comportamiento. Por lo tanto, las correlaciones estadísticas por pares y de orden superior aumentan con el potencial de pares. Esta consistencia entre los comportamientos de Shannon y las medidas acumulativas es distinta en el caso no interactuante presentado en la **Figura 8.1**. Así, la interpretación que se obtuvo de los dos conjuntos de medidas ahora es consistente al incluir la interacción. Vemos que tanto  $I_x^3$  como  $TCCRE$  tienen valores negativos al aumentar  $\lambda$ . La interpretación de

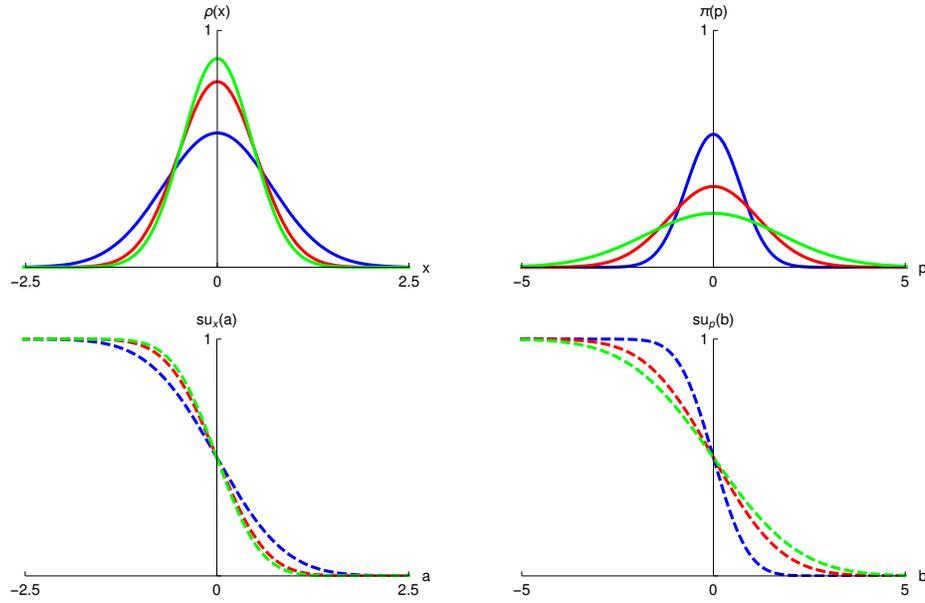


Figura 8.5: Gráficas de las densidades principales reducidas a una variable y las densidades acumulativas de supervivencia en espacio de posición (columna izquierda) y en espacio de momentos (columna derecha) para potenciales atractivos  $\lambda = 0,1$  (azul),  $\lambda = 2$  (rojo) y  $\lambda = 5$  (verde) en el estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1,0$ .

ambas medidas es que las interacciones dominantes de orden superior son de naturaleza redundante. Además, como se espera todas las medidas de correlación van a cero cuando se desactiva el acoplamiento ( $\lambda \rightarrow 0$ ).

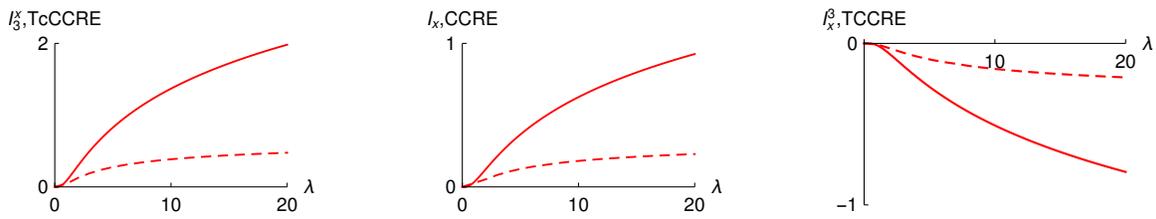


Figura 8.6: Gráficas de  $I_3^x$ ,  $I_x$  e  $I_x^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de posición para el estado  $|000\rangle$  con potencial atractivo y  $\omega = 1,0$ .

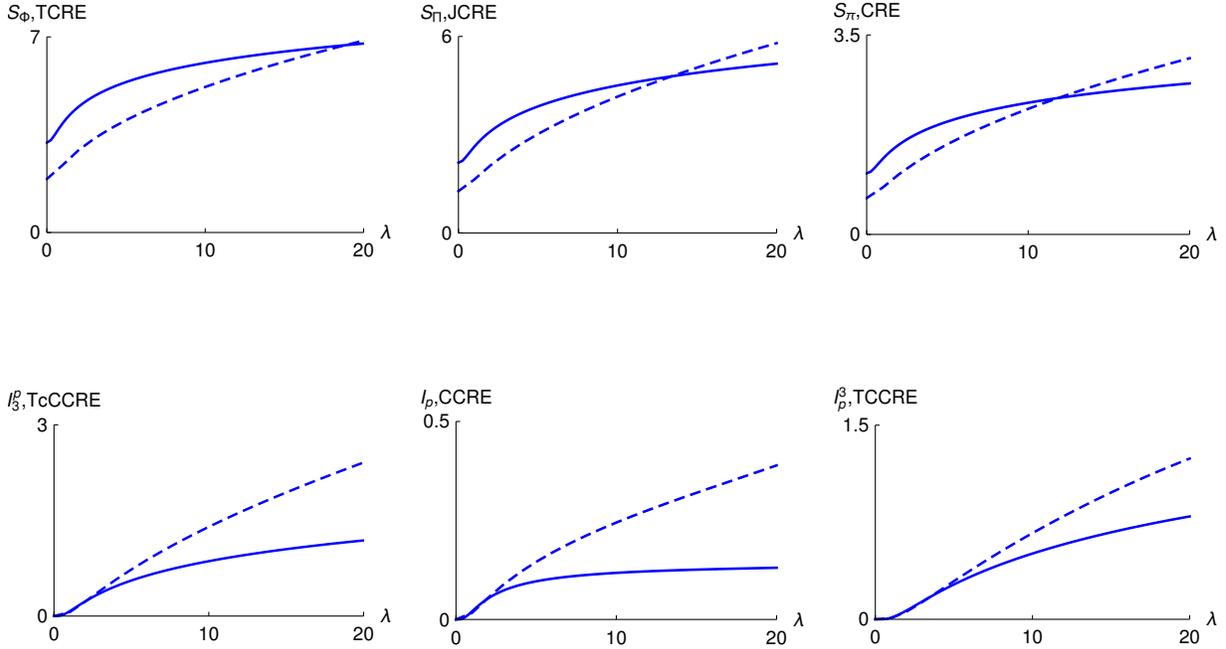


Figura 8.7: Primera fila: gráficas de entropías de Shannon de tres, dos y una variable (líneas continuas) y  $TCRE$ ,  $JCRE$  y  $CRE$  (líneas discontinuas) en espacio de momentos contra  $\lambda$ . Segunda fila: gráficas de  $I_3^p$ ,  $I_p$  e  $I_p^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) en espacio de momentos contra  $\lambda$ . Todas las gráficas corresponden a la función de onda simétrica del estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1,0$ .

La fila superior en **Figura 8.7** muestra el comportamiento de Shannon y las medidas acumulativas para el estado  $|000\rangle$  en espacio de momentos. También se observa que las entropías acumulativas y de Shannon aumentan con  $\lambda$ . Por lo que, ambos conjuntos de medidas son consistentes en sus interpretaciones. Es decir, las densidades subyacentes se deslocalizan al incrementar la intensidad del potencial atractivo. La deslocalización de las densidades en espacio de momentos, a medida que aumenta  $\lambda$ , se muestra en las gráficas de la columna derecha en la **Figura 8.5**.

La fila inferior de la **Figura 8.7** muestra que las respectivas medidas de correlación acumulativa y de Shannon tienen un comportamiento consistente en espacio de momentos, ya que todas las medidas aumentan con  $\lambda$ . Asimismo, todas las medidas son cero sin acoplamiento. Esta consistencia en el comportamiento es diferente del caso examinado

anteriormente para osciladores no interactuantes (ver la **Figura 8.2.**)

En la **Figura 8.8** para el caso atractivo se muestra cómo en espacio de posición  $JCRE$  y  $mJCRE$  son decrecientes al aumentar  $\lambda$ . Mientras que  $CCRE$  y  $mCCRE$  tienen tendencias opuestas al aumentar el valor de  $\lambda$ . Por otro lado, en espacio de momentos  $JCRE, mJCRE, CCRE$  y  $mCCRE$  son crecientes al aumentar el valor de  $\lambda$ .

En el caso repulsivo en espacio de posición  $JCRE, mJCRE, CCRE$  y  $mCCRE$  son crecientes al aumentar el valor de  $\lambda$ . En espacio de momentos  $JCRE$  y  $mJCRE$  son decrecientes al aumentar el valor de  $\lambda$ . Mientras que  $CCRE$  y  $mCCRE$  tienen tendencias opuestas al aumentar el valor de  $\lambda$ .

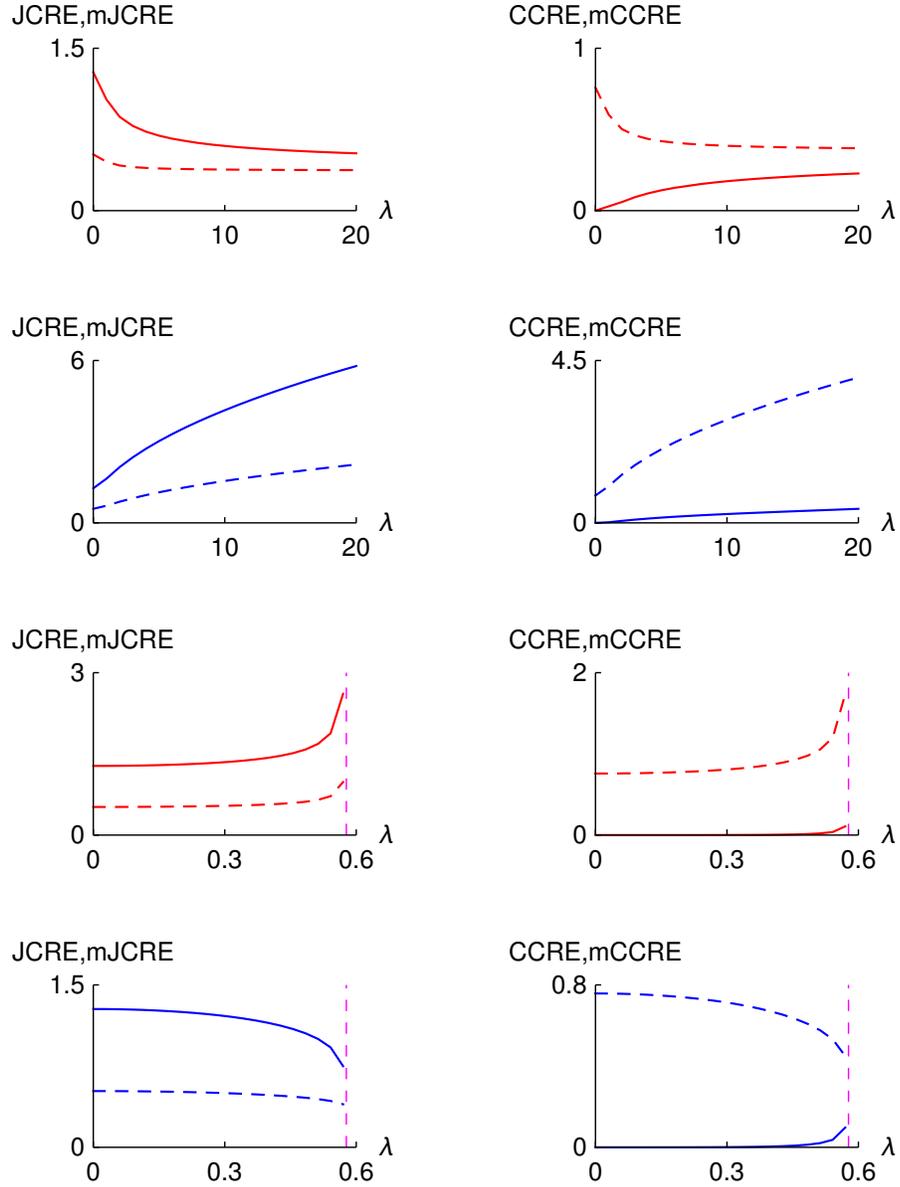


Figura 8.8: Primera y segunda fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial atractivo  $\lambda$ . Tercera y cuarta fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial repulsivo  $\lambda$ . Función de onda simétrica estado  $|000\rangle$  con  $\omega = 1,0$ , espacio de posición (rojo) y espacio de momentos (azul).

### 8.3. Osciladores acoplados para la función de onda antisimétrica

Todas las entropías de Shannon y acumulativas para este estado con potenciales atractivos y repulsivos en espacio de posición y espacio de momentos, exhiben un comportamiento consistente como en las figuras anteriores.

La **Figura 8.9** muestra el comportamiento de las medidas de correlación para el potencial atractivo en espacio de posición, donde hay mínimos que son característicos en este estado (ver **sección 6**). Los mínimos indican un cambio en la correlación al incrementar el potencial de pares  $\lambda$ . Es significativo que el mínimo en  $I_3^x$  para valores de  $\lambda$  pequeños también es capturado por  $TcCCRE$ . Además, el mínimo correspondiente en  $I_x$  aparece en  $CCRE$ . Sin embargo, las posiciones de los mínimos en las medidas de Shannon son diferentes de las acumulativas.

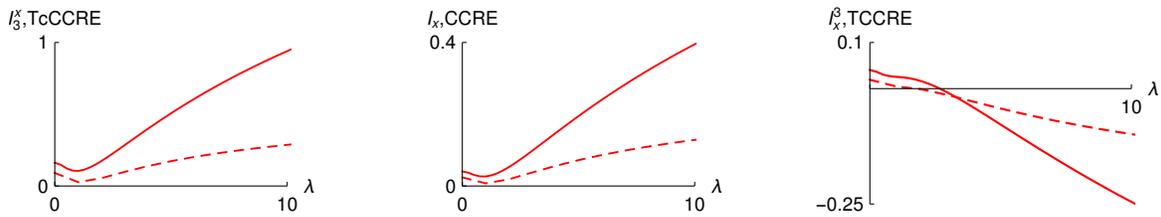


Figura 8.9: Gráficas de  $I_3^x$ ,  $I_x$  e  $I_x^3$  (línea continua) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de posición para el estado  $|001\rangle$  con potencial atractivo y  $\omega = 1,0$ .

La transición de dominancia sinérgica a redundante (valor positivo a negativo) en  $I_x^3$  también es detectada por  $TCCRE$ . Por lo tanto, las interpretaciones que se obtuvieron de las medidas de Shannon son consistentes con las medidas acumulativas. Las medidas de correlación aquí no van a cero cuando la interacción está desactivada. Es decir, la función de onda cuando  $\lambda = 0$  no es separable. Esto se debe a la simetría de la función de onda.

La presencia de los mínimos en  $I_x$  y  $CCRE$  se puede estudiar examinando  $\tau_x$ . Esto se presenta en la **Figura 8.10**. La ubicación de los mínimos en  $I_x$  y  $CCRE$  corresponden a las regiones de  $\lambda$  donde  $\tau_x$  cambia de signo. Este valor de  $\lambda$  es donde la densidad de pares reducida pasa de estar correlacionada negativamente a correlacionarse positivamente.  $\tau_x$  tiene valor cero en este punto ya que  $\langle x_1 x_2 \rangle$  también tiene valor cero. Este punto también se caracteriza por la transición de  $\langle x_1 x_2 \rangle$  de valores negativos a positivos. Por otro lado,  $I_x$  y  $CCRE$  no pueden ser negativos por construcción. Así, estas medidas detectan esta

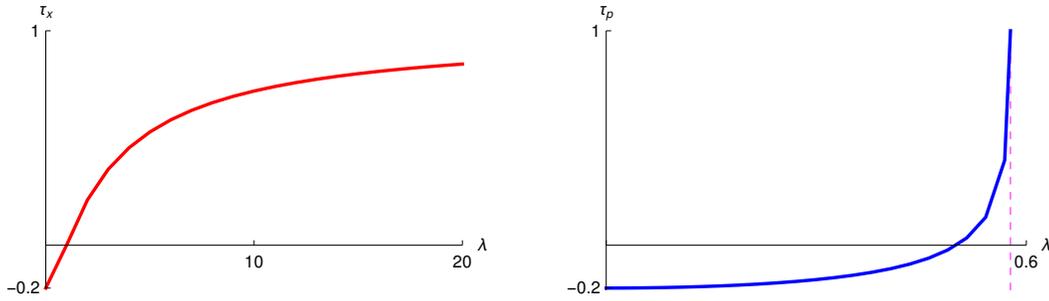


Figura 8.10: Gráficas del coeficiente de correlación  $\tau$  contra el potencial  $\lambda$  para el estado  $|001\rangle$ . Con potencial atractivo en el espacio de posición (izquierda) y potencial repulsivo en el espacio de momentos (derecha) con  $\omega = 1,0$ . La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

transición con la presencia de un mínimo.

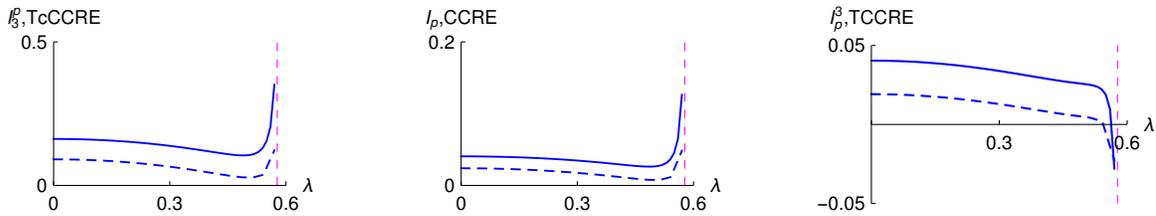


Figura 8.11: Gráficas de  $I_3^p$ ,  $I_p$  e  $I_p^3$  (líneas continuas) y  $TcCCRE$ ,  $CCRE$  y  $TCCRE$  (líneas discontinuas) contra el potencial  $\lambda$ . En espacio de momentos para el estado  $|001\rangle$  con potencial repulsivo y  $\omega = 1,0$ . La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

En la **Figura 8.11** se presenta la gráfica correspondiente para el estado  $|001\rangle$  con un potencial repulsivo en espacio de momentos. Al igual que el espacio de posición todas las medidas tienen valores distintos de cero sin acoplamiento. También hay mínimos en  $I_3^p$  y  $TcCCRE$ , en  $I_p$  y  $CCRE$  pero para valores mayores de  $\lambda$ . Tanto  $I_p^3$  como  $TCCRE$  exhiben una transición de valores positivos a negativos con  $\lambda$  mayores. Por lo tanto, los comportamientos de Shannon y de las medidas acumulativas son similares y consistentes en el espacio de momentos. Otro punto importante es que  $TcCCRE$  y  $CCRE$  son capaces de detectar los mínimos que están presentes en  $I_3^p$  e  $I_p$ . La medida de orden superior

*TCCRE* detecta la transición positiva a negativa que está en  $I_p^3$  para  $\lambda$  mayores.

La **Figura 8.10** muestra el comportamiento de  $\tau_p$  que se puede comparar con  $I_p$  y *CCRE* en la **Figura 8.11**.  $\tau_p$  transita de valores negativos a positivos en la región de  $\lambda$  donde  $I_p$  y *CCRE* exhiben mínimos. Tanto  $\tau_x$  como  $\tau_p$  se acercan a la unidad (correlación perfecta) en el límite de  $\lambda$  grande.

La **Figura 8.12** tiene un comportamiento semejante al del estado simétrico  $|000\rangle$  en **Figura 8.8**.

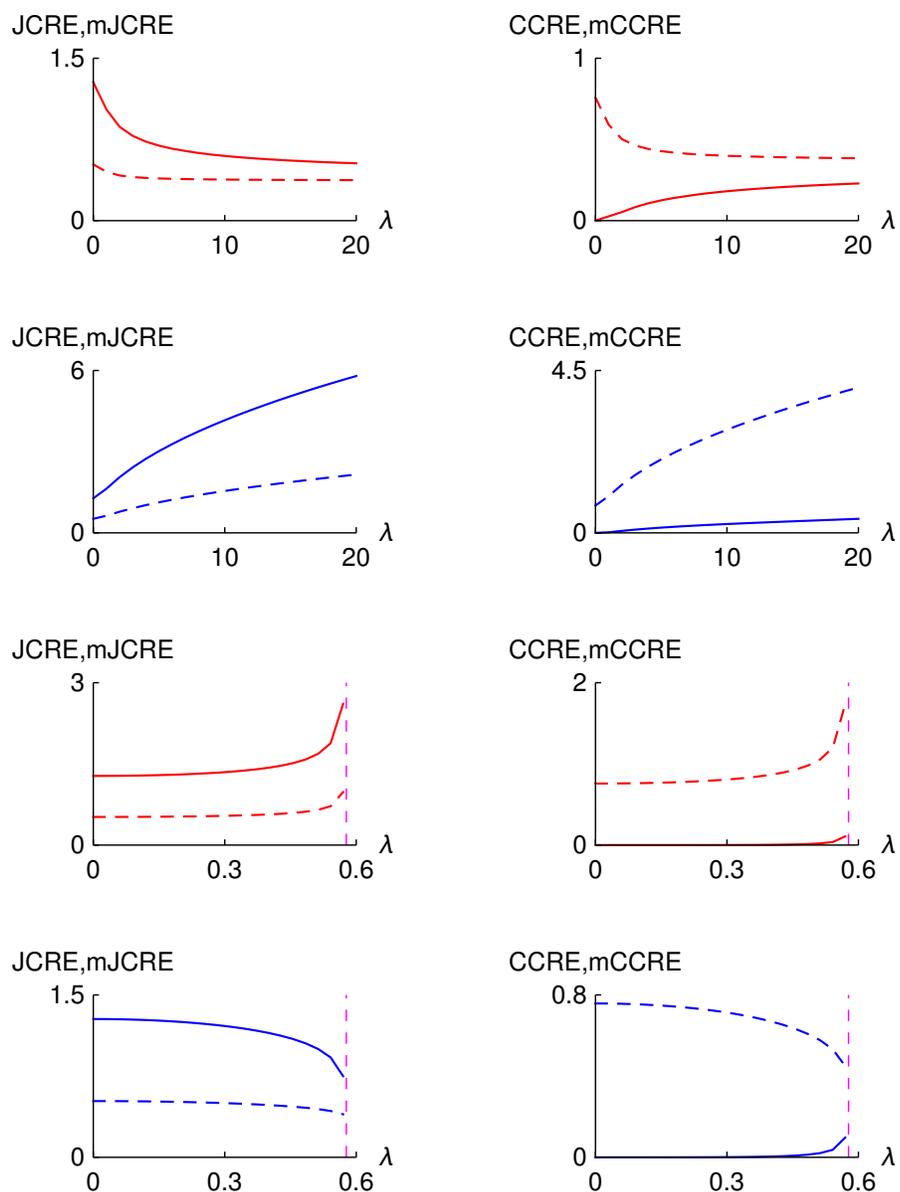


Figura 8.12: Primera y segunda fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial atractivo  $\lambda$ . Tercera y cuarta fila: gráficas  $JCRE$ ,  $CCRE$  (línea continua) y  $mJCRE$ ,  $mCCRE$  (línea discontinua) contra el potencial repulsivo  $\lambda$ . Función de onda antisimétrica estado  $|001\rangle$  con  $\omega = 1,0$ , espacio de posición (rojo) y espacio de momentos (azul). La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

## 8.4. Sumas entrópicas

Las sumas entrópicas en los niveles de una variable ( $S_1^T$ ), dos variables ( $S_2^T$ ) y tres variables ( $S_3^T$ ) como se define en la ecuación (3.31) han sido objeto de creciente atención y estudio debido a su conexión con el principio de incertidumbre. Por lo que comparamos y contrastamos su comportamiento con las sumas de las medidas acumulativas en espacio de posición y espacio de momentos ( $CRE_T$ ,  $JCRE_T$  y  $TCRE_T$ ).

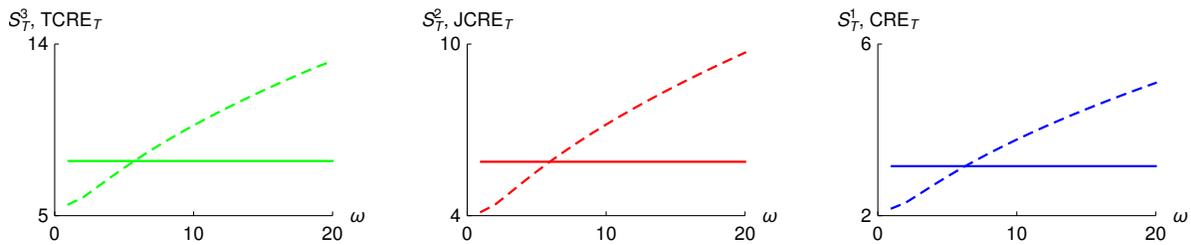


Figura 8.13: Gráficas de las sumas entrópicas de Shannon (líneas continuas) para una variable ( $S_1^T$ ), dos variables ( $S_2^T$ ) y tres variables ( $S_3^T$ ), junto con las correspondientes sumas entrópicas acumulativas (líneas discontinuas), ( $CRE_T$ ,  $JCRE_T$  y  $TCRE_T$ ) contra el potencial armónico  $\omega$ . Para tres osciladores no interactuantes en el estado antisimétrico  $|012\rangle$ .

En la **Figura 8.13** se comparan los comportamientos para el estado antisimétrico  $|012\rangle$  sin interacción, donde se pueden apreciar diferencias entre los dos conjuntos de medidas. Por una parte todas las sumas entrópicas de Shannon son constantes con  $\omega$  mientras que todas las medidas acumulativas aumentan con  $\omega$ . El comportamiento constante observado en las sumas entrópicas de Shannon es resultado de la simetría. Es decir, la localización de la densidad en el espacio de posición al aumentar  $\omega$  da como resultado una entropía de Shannon en espacio de posición más pequeña. Lo anterior corresponde exactamente con un aumento en la entropía de Shannon en espacio de momentos debido a la deslocalización de la densidad de momentos con  $\omega$  más grande. Así vemos que el efecto neto en la suma entrópica de Shannon corresponde al comportamiento constante observado. Sin embargo, las medidas acumulativas no conservan esta simetría. Por lo que el aumento de la medida en el espacio de momentos debido a la deslocalización de la densidad por el incremento de  $\omega$  no corresponde con una disminución equivalente de la medida en el espacio de posición debido a la localización. Comportamientos semejantes se observaron para el estado simétrico  $|012\rangle$  sin interacción.

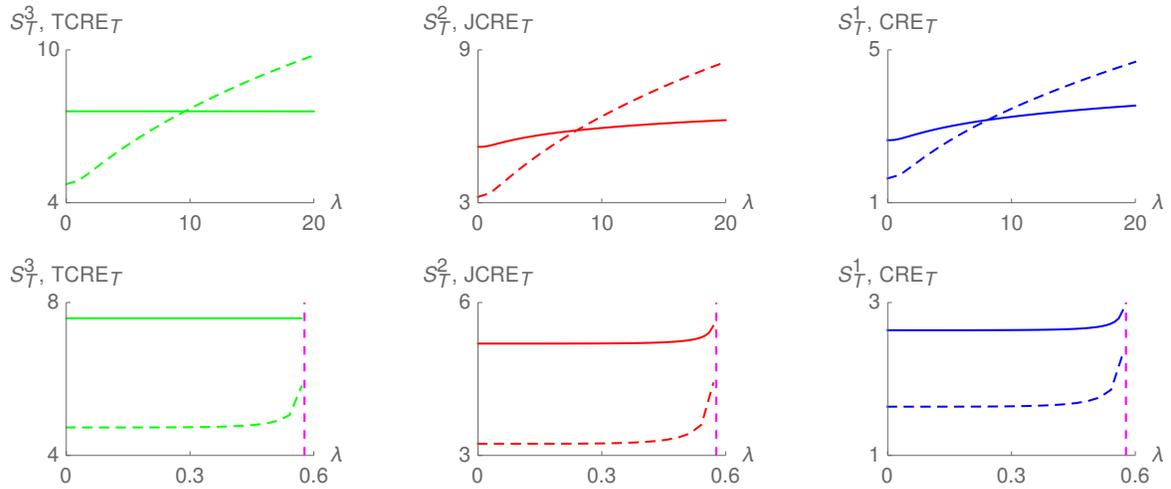


Figura 8.14: Gráficas de las sumas entrópicas de Shannon (líneas continuas) para una variable ( $S_T^1$ ), dos variables ( $S_T^2$ ) y tres variables ( $S_T^3$ ), junto con las correspondientes sumas entrópicas acumulativas (líneas discontinuas), ( $CRE_T$ ,  $JCRE_T$  y  $TCRE_T$ ) contra el potencial de interacción  $\lambda$ . Para tres osciladores interactuantes en el estado antisimétrico  $|001\rangle$ . La primera fila corresponde a medidas en presencia de potenciales atractivos mientras que la segunda fila corresponde a potenciales repulsivos. La línea vertical discontinua indica el valor límite de  $\lambda$ .

Las sumas entrópicas en sistemas que interactúan se presentan en la **Figura 8.14** para el estado antisimétrico  $|001\rangle$  en presencia de potenciales atractivos y repulsivos.  $S_T^3$  es constante con el potencial de interacción  $\lambda$  en ambos potenciales. Lo anterior es similar al caso no interactuante donde la simetría se conserva. Sin embargo,  $S_T^2$  y  $S_T^1$  obtenidos a partir de densidades reducidas se comportan como funciones crecientes de  $\lambda$ . Por lo que la simetría se rompe en estos casos. El comportamiento creciente de  $S_T^2$  y  $S_T^1$  con  $\lambda$  también se observa en las medidas  $JCRE_T$  y  $CRE_T$ . Por otro lado, el comportamiento constante en  $S_T^3$  no es comparable con la medida  $TCRE_T$  que aumenta con  $\lambda$ . Para el potencial repulsivo todas las medidas presentan un comportamiento aproximadamente constante para valores pequeños de  $\lambda$ . También se observaron comportamientos similares en el estado  $|000\rangle$  simétrico. Además, se cumplen las cotas para las sumas entrópicas de Shannon (ver **Figuras 8.13** y **8.14**).

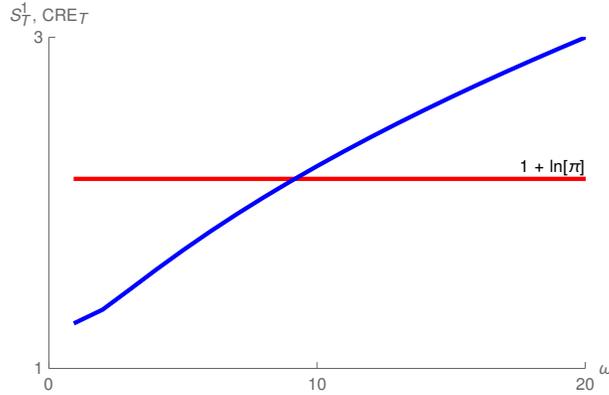


Figura 8.15: Gráfica de la suma entrópica de Shannon  $S_T^1$  (línea roja) y suma entrópica acumulativa  $CRE_T$  (línea azul) para un oscilador armónico en el estado fundamental contra el potencial  $\omega$ .

El oscilador armónico en el estado fundamental representa la cota inferior de  $S_T^1$  en ecuación (3.31).  $S_T^1$  junto con  $CRE_T$  se muestran en la **Figura 8.15** para un solo oscilador con el fin de contrastar sus comportamientos. La suma entrópica de Shannon es invariante al potencial  $\omega$  y corresponde con la cota inferior de la ecuación (3.31), por otro lado  $CRE_T$  es una función creciente con el potencial  $\omega$ . Dicho comportamiento es similar al caso de tres osciladores que interactúan y no interactúan presentados en las **Figuras 8.13** y **8.14**.

## 8.5. Conclusiones

- Los comportamientos de las entropías basadas en densidades acumulativas de una, dos y tres variables son consistentes con los obtenidos de las entropías de Shannon.
- Las medidas de correlación de pares basadas en densidades acumulativas detectan la presencia de mínimos que también están presentes en las medidas de correlación de pares de Shannon. Además, los mínimos aparecen en regiones donde el coeficiente de correlación cambia de signo.
- Las medidas de correlación de tercer orden basadas en densidades acumulativas detectan la transición de región positiva a negativa al igual que las medidas de correlación de tercer orden de Shannon.

- Las sumas entrópicas para las medidas basadas en densidades acumulativas se comportan como una función creciente con el potencial en el caso de osciladores no acoplados y osciladores acoplados (atractivo y repulsivo).

## Capítulo 9

# Medidas informacionales en la presencia de interacción entre tres cuerpos: estado basal

En esta sección nos interesa estudiar las medidas de correlación estadística en los sistemas de osciladores acoplados cuando las tres partículas están sujetas a un potencial explícito de tres cuerpos de tipo Gaussiano

$$\kappa^2 e^{-\alpha(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}. \quad (9.1)$$

La introducción de este potencial nos permite examinar cómo reaccionan las medidas a la interacción de acoplamiento del potencial pero también nos permite monitorear los cambios con respecto al ancho del potencial. En este sentido analizamos las medidas de correlación en presencia de potenciales de pares atractivo o repulsivo y de potenciales de tres cuerpos positivo (repulsivo) o negativo (atractivo). Por lo cual para efectuar los cálculos se utilizan funciones de onda variacional de prueba cuya forma corresponde a las soluciones exactas del Hamiltoniano con interacciones armónicas de dos cuerpos (ver **sección 2.6**).

Comenzamos la discusión con un análisis de los potenciales efectivos que se generan a partir de los cálculos variacionales. Además, anexamos otras propuestas de potenciales tipo Gaussiano para su discusión. Esto será útil para comprender los comportamientos de las entropías de Shannon y las medidas de correlación. Después discutimos el comportamiento de las entropías y las medidas de correlación con el parámetro de acoplamiento de tres cuerpos  $\kappa_{\pm}$ . Empleamos la notación donde  $\kappa_+$  se refiere a un potencial positivo de tres cuerpos mientras que  $\kappa_-$  corresponde a un potencial negativo de tres cuerpos. Finalmente, los comportamientos de las entropías y las correlaciones se presentan cuando cambia el ancho del potencial de tres cuerpos de uno amplio a uno estrecho.

## 9.1. Potenciales efectivos

En la **Figura 9.1** vemos el comportamiento de  $\omega'$  y  $\lambda'$  en función del parámetro de tres cuerpos  $\kappa_{\pm}$ . En donde ambos parámetros disminuyen con respecto a  $\kappa_+$ , sin embargo,  $\omega'$  decae más rápido que  $\lambda'$ .

Por el contrario  $\omega'$  aumenta con  $\kappa_-$  además  $\lambda'$  aumenta para valores de  $\kappa_-$  pequeños hasta alcanzar un valor máximo después del cual se mantiene en un valor constante para valores de  $\kappa_-$  grande.

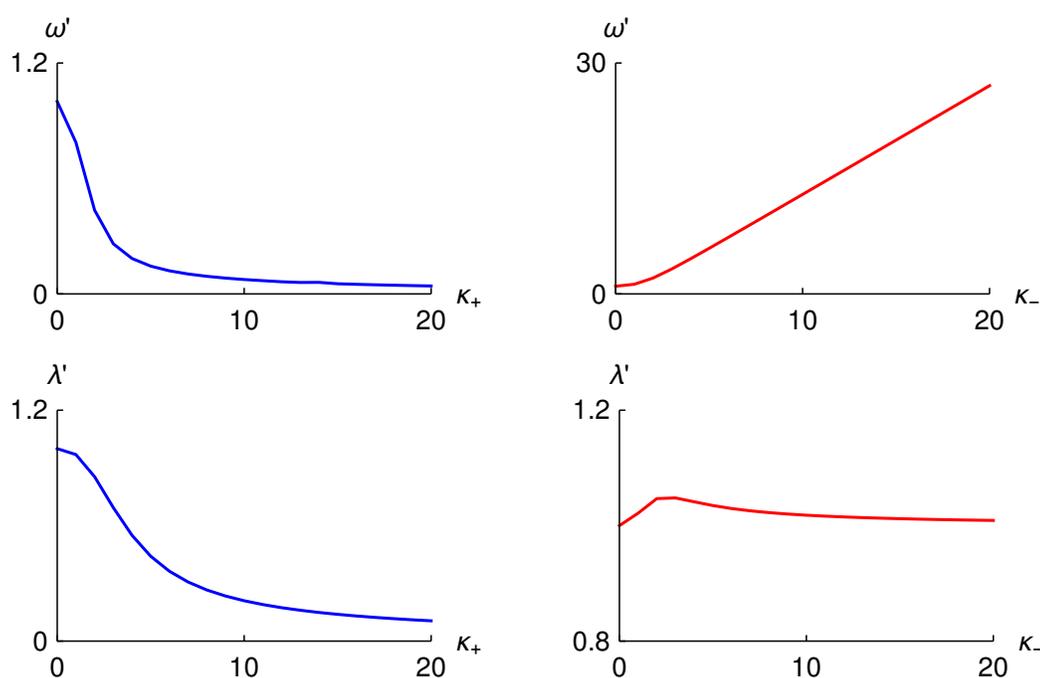


Figura 9.1: Gráficas de parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos (azul) positivo y (rojo) negativo con  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potenciales de pares atractivos).

La interpretación de estos comportamientos es que el efecto del potencial de tres cuerpos positivo (repulsivo) para valores grandes atenua el término efectivo de un cuerpo mientras que este término se intensifica para el potencial de tres cuerpos negativo (atractivo) para valores grandes. El parámetro efectivo de dos cuerpos también disminuye cuando aumenta el potencial de tres cuerpos positivo, pero con el potencial de tres cuerpos negativo inicialmente se incrementa y alcanza un valor máximo el parámetro efectivo de dos

cuerpos.

En la **Figura 9.2** se presentan la relación de las energías entre el Hamiltoniano efectivo en la ecuación (2.75) ( $E'$ ) y el del Hamiltoniano sin el término de interacción de tres cuerpos ( $E$ ) en función de  $\kappa_{\pm}$ . Ambas energías se calculan a partir de la ecuación (2.17), usando  $\omega'$  y  $\lambda'$  en el numerador y  $\omega, \lambda$  en el denominador.  $E$  es constante y no depende de  $\kappa_{\pm}$ . En  $\kappa_{\pm} = 0$  (sin interacción de tres cuerpos)  $E'/E$  es la unidad ya que el numerador es igual al denominador. Las curvas divergen de la unidad a mayor  $\kappa_{\pm}$  cuando la presencia del potencial de tres cuerpos se incorpora a la energía efectiva. Los comportamientos de estas curvas son similares a los de  $\omega'$  presentados en la **Figura 9.1**.

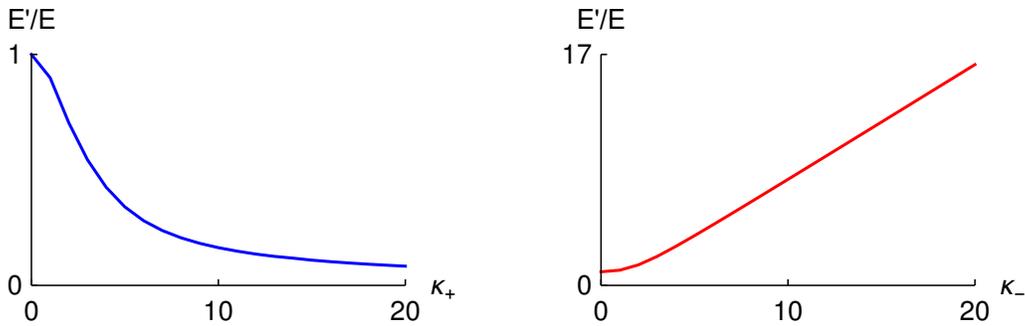


Figura 9.2: Gráficas de  $E'/E$  contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos  $\kappa_{\pm}$  (azul) positivo y (rojo) negativo con  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potenciales de pares atractivos).

## 9.2. Entropías de Shannon

En la **Figura 9.3** se presenta el caso de potenciales atractivos de dos cuerpos. En la primera fila se tiene el potencial positivo de tres cuerpos en donde las entropías en el espacio de posición aumenta con  $\kappa_+$  mientras que en el espacio de momentos todas las entropías disminuyen. Por lo tanto las densidades del espacio de posición se deslocalizan al aumentar  $\kappa_+$  (repulsión creciente) mientras se localizan las densidades del espacio de momentos. Estas tendencias pueden entenderse a partir de la discusión previa de los parámetros efectivos. Dado que tanto  $\omega'$  como  $\lambda'$  disminuyen con  $\kappa_+$  los términos de los potenciales atractivos de uno y dos cuerpos son menores lo que resulta en una deslocalización de las densidades en el espacio de posición. La respuesta a la deslocalización en el espacio de posición es la localización en espacio de momentos. La tercera fila de la **Figura 9.3** muestra las entropías en presencia del potencial negativo de tres cuerpos. Las tendencias de todas las entropías son opuestas a las presentadas para el potencial positivo de tres

## CAPÍTULO 9

cuerpos. Las entropías en el espacio de posición disminuyen al aumentar  $\kappa_-$  (atracción) mientras que las entropías en el espacio de momentos aumentan.

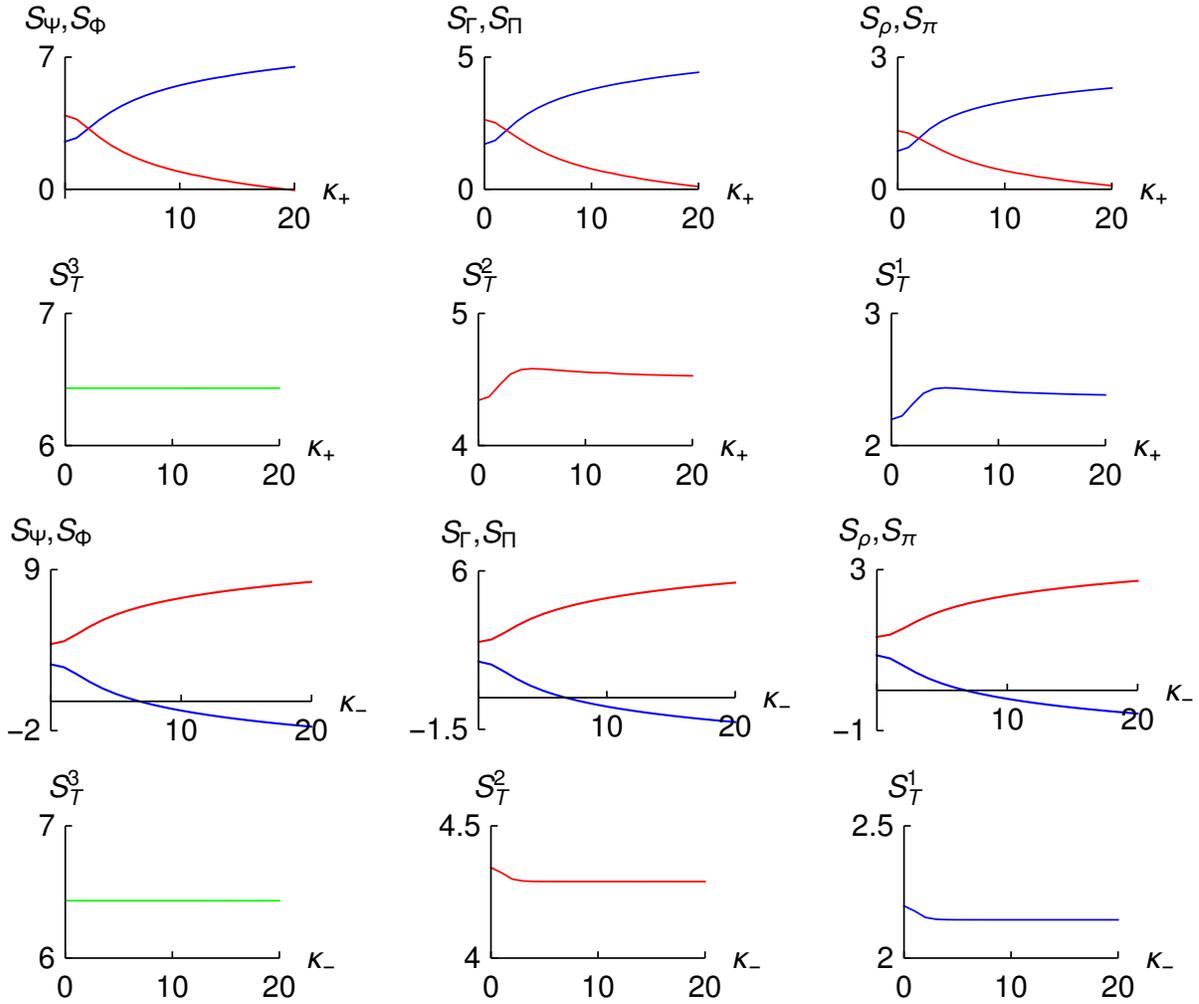


Figura 9.3: Gráficas de las entropías de Shannon para una, dos y tres partículas en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo) contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos positivo (primera fila) y negativo (tercera fila). Las sumas entrópicas correspondientes se presentan debajo de cada par de componentes.  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial de pares atractivo).

Las densidades del espacio de posición se localizan mientras que las de momentos se deslocalizan. La observación importante en este punto es que el signo del potencial de

tres cuerpos (repulsivo, atractivo) define el comportamiento de las entropías (aumentando, disminuyendo) en cada espacio. Estas tendencias pueden explicarse con el uso de los parámetros efectivos, ya que  $\omega'$  aumenta con  $\kappa_-$  mientras que  $\lambda'$  aumenta para valores más pequeños de  $\kappa_-$ . Estos incrementos en la atracción efectiva de las interacciones conducen a la localización en el espacio de posición y a la deslocalización en el espacio de momentos.

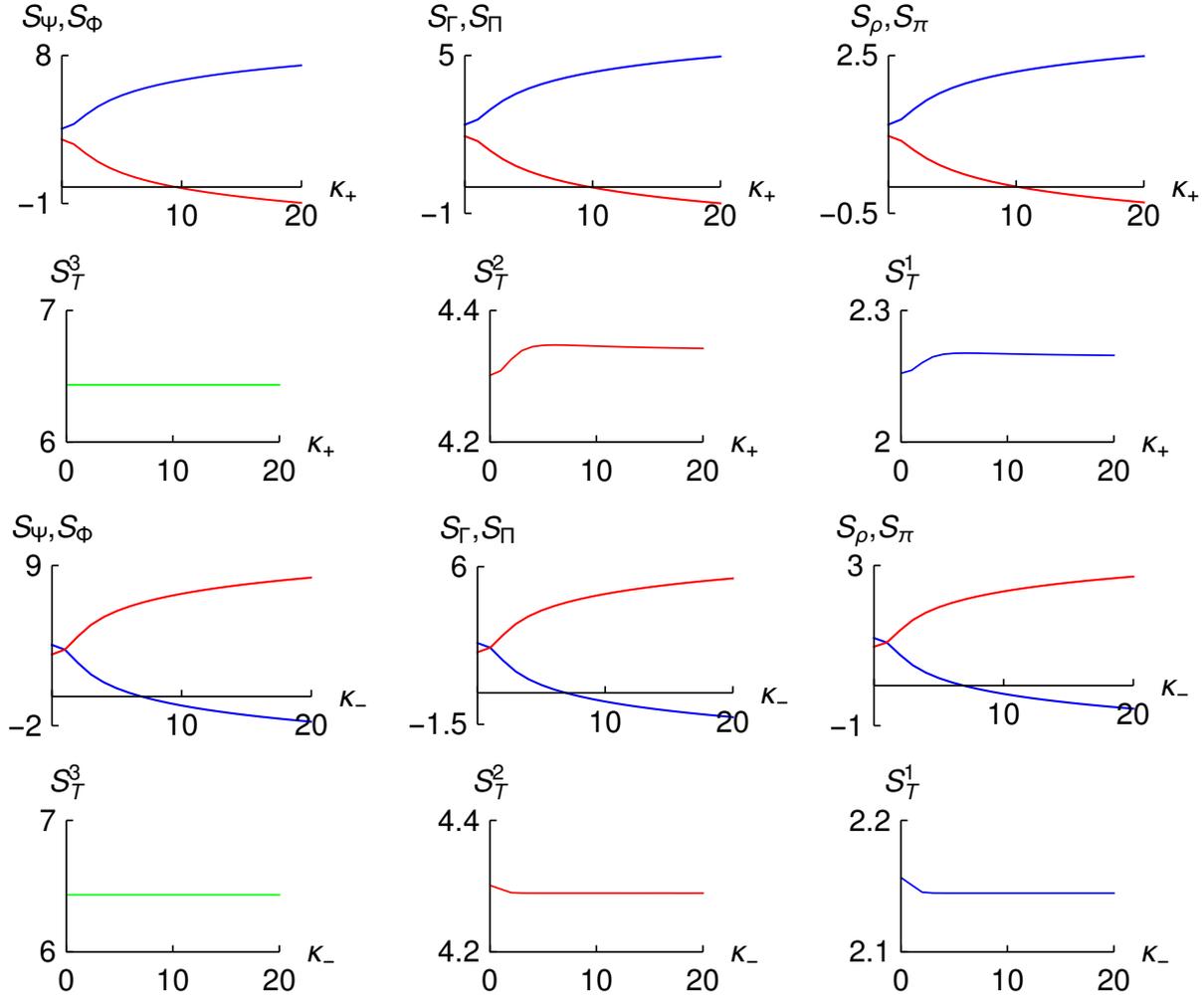


Figura 9.4: Gráficas de las entropías de Shannon para una, dos y tres partículas en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo) contra el parámetro  $\kappa_{\pm}$  para potenciales de tres cuerpos positivo (primera fila) y negativo (tercera fila). Las sumas entrópicas correspondientes se presentan debajo de cada par de componentes.  $\omega = \alpha = 1$  y  $\lambda = 0,4$  (potencial de pares repulsivo).

Las sumas entrópicas que forman la base de la relación de incertidumbre entrópica [ver ecuación (3.31)] se presentan en la segunda y cuarta filas de la **Fig 9.3**. Se puede apreciar que  $S_T^3$  es constante independiente de  $\kappa_{\pm}$  tanto para los potenciales de tres cuerpos positivos como negativos. Por otro lado,  $S_T^2$  y  $S_T^1$  no son constantes. La diferencia es que ambos muestran una tendencia creciente a potenciales positivos de tres cuerpos mientras que disminuyen en el caso negativo.

En la **Figura 9.4** se muestran las entropías cuando el Hamiltoniano incluye un potencial repulsivo de dos cuerpos. Se muestra que todas las tendencias son consistentes con las del caso positivo presentado en la **Figura 9.3**.

Las densidades de una variable se muestran en la **Figura 9.5** en espacio de posición y espacio de momentos con potenciales de tres cuerpos positivo y negativo para tres valores del parámetro  $\kappa$ . Cuando el potencial de dos cuerpos es repulsivo las densidades en el espacio de posición se deslocalizan aumentando  $\kappa_+$  mientras que las densidades en el espacio de momentos se localizan. En el caso de  $\kappa_-$  las densidades en el espacio de posición se localizan mientras que las del espacio de momentos se deslocalizan. Además estos resultados son consistentes con las tendencias en las entropías que se presentan en la **Figura 9.4**.

## 9.3. Medidas de información de orden alto

En este apartado examinamos y comparamos el comportamiento de la información mutua de pares y la información mutua de orden alto cuando el parámetro de acoplamiento del potencial de tres cuerpos  $\kappa$  es negativo y positivo. Además estudiamos el comportamiento de las entropías y las informaciones cuando se varía el ancho del potencial de tres cuerpos  $\alpha$ .

### 9.3.1. Altura del potencial

En la **Figura 9.6** se comparan las medidas de información de orden alto en función de  $\kappa_{\pm}$  para un potencial positivo (primera fila) y un potencial negativo (segunda fila) cuando el potencial de pares es atractivo fijando  $\lambda = 1$ .

Aparecen máximos y mínimos en las gráficas para la información mutua de pares con un potencial positivo de tres cuerpos tanto en espacio de posición como en espacio de momentos. Estos máximos o mínimos sugieren que la magnitud de la correlación estadística por pares se puede ajustar con  $\kappa_+$  y además existe un valor de  $\kappa_+$  para el cual esta correlación es óptima.

Observamos que la correlación en el espacio de posición es mayor que en el espacio de momentos para todos los valores de  $\kappa_+$ . El comportamiento es distinto para las gráficas

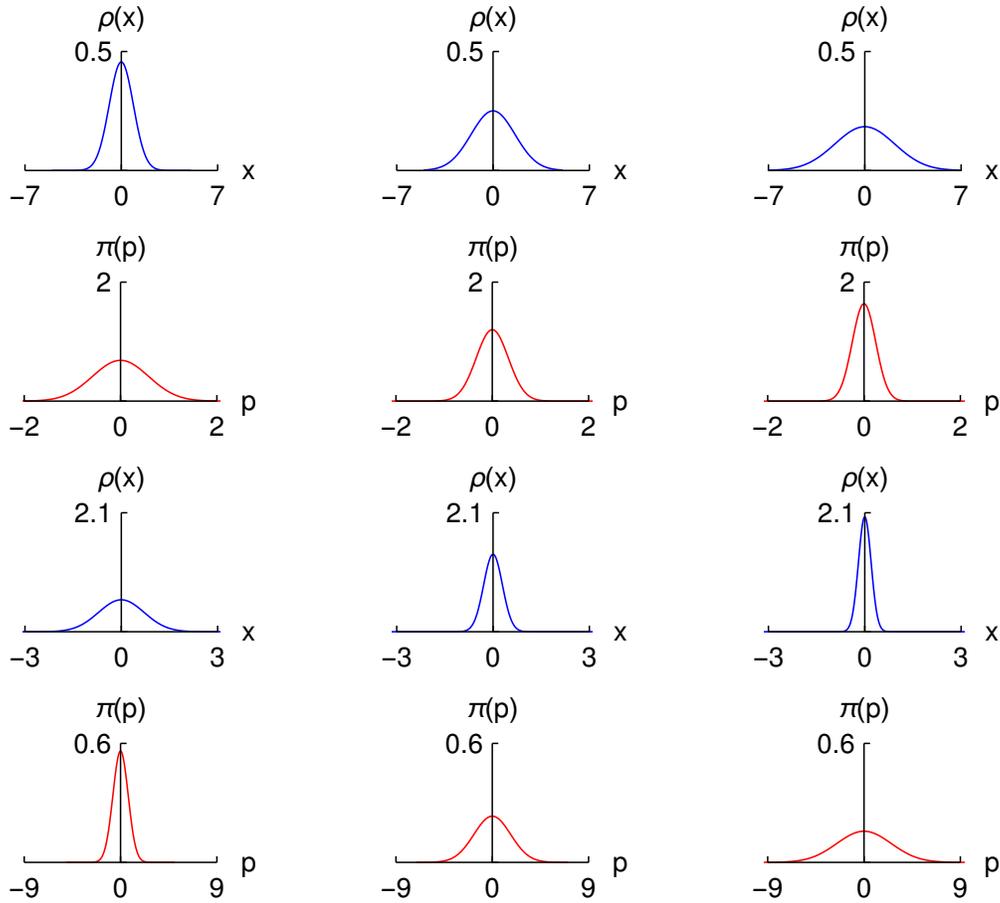


Figura 9.5: Gráficas de las densidades de probabilidad de una variable  $\rho(x)$  en el espacio de posición (azul) y  $\pi(p)$  en el espacio de momentos (rojo) para diferentes valores del parámetro  $\kappa = 1$  (primera columna),  $\kappa = 5$  (segunda columna) y  $\kappa = 10$  (tercera columna). Las primeras dos filas corresponden a  $\kappa_+$  y las últimas dos a  $\kappa_-$ .  $\omega = \alpha = 1$  con  $\lambda = 0,4$  (potencial de pares repulsivo).

correspondientes a un potencial negativo de tres cuerpos donde no se observan máximos ni mínimos. De hecho, las curvas se comportan de manera monótona hacia cero. Lo que es similar con las gráficas anteriores para el caso positivo es que  $I_x$  es más grande que  $I_p$ . Sin embargo, tanto  $I_x$  como  $I_p$  van a cero para  $\kappa_-$  más grande ya que la correlación por pares se sustrae del sistema para potenciales de tres cuerpos atractivos más grandes.

Este resultado puede entenderse desde la perspectiva de las tendencias y magnitudes de  $\omega'$  y  $\lambda'$  con respecto a  $\kappa_-$ . Para  $\kappa$  más grande el Hamiltoniano efectivo en la ecuación

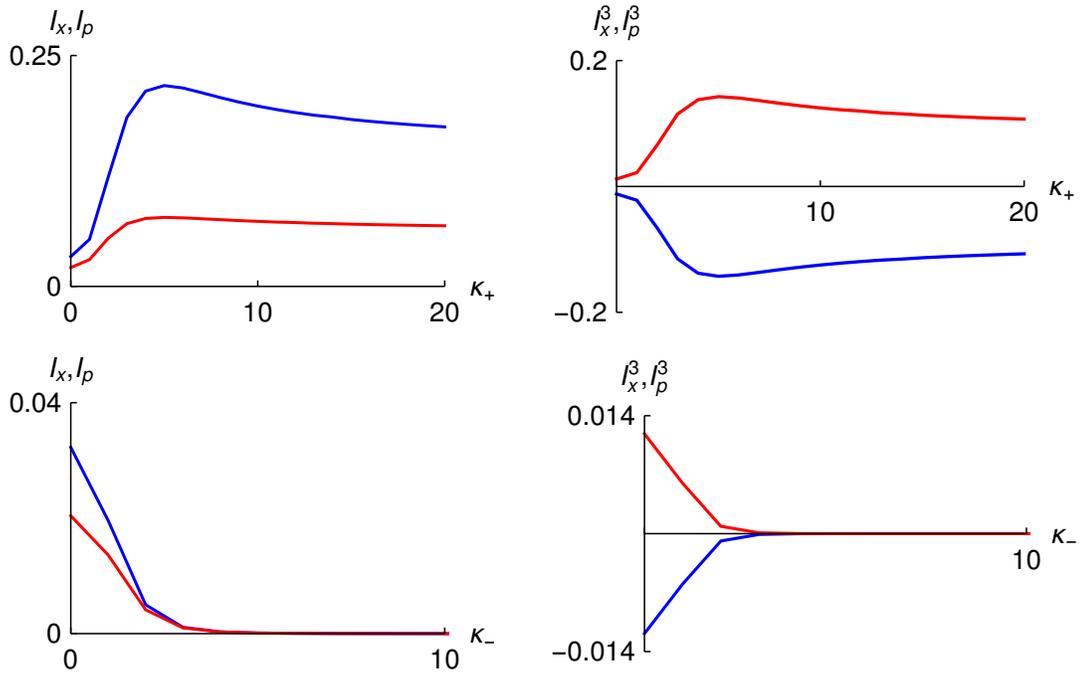


Figura 9.6: Gráficas de la información mutua (columna izquierda) y de la información de orden alto (columna derecha), espacio de posición (azul) y espacio de momentos (rojo) como función del parámetro  $\kappa_{\pm}$ . Para un valor positivo (fila superior) y un valor negativo (fila inferior).  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial de pares atractivo).

(2.75) se comporta como si solo tuviera términos de un cuerpo ( $\omega' \gg \lambda'$ ). Es decir, como un sistema de tres osciladores desacoplados cuya función de onda es un producto y es separable en las coordenadas canónicas. Esto se puede ver en las ecuaciones (2.14)-(2.16) considerando los parámetros variacionales  $b, c \approx \omega' = a$ . Así, la solución se reduce a una donde las tres partículas están en el mismo orbital del estado basal con  $\omega'$ .

La correlación estadística para tales sistemas separables es cero. Es importante notar que esto es distinto de lo que ocurre en función de  $\lambda$  donde las medidas realmente aumentan (ver **sección 6**). Por lo tanto el potencial de tres cuerpos se puede modular para provocar que el sistema se comporte como si estuviera desacoplado a pesar de que existe un potencial de pares que acopla las partículas.

Ahora considerando las medidas de orden alto se puede observar que  $I_p^3$  muestra un máximo mientras que  $I_x^3$  tiene un mínimo para el caso positivo  $\kappa_+$ . La interpretación es que las interacciones dominantes de orden superior son sinérgicas en el espacio de momentos ( $I_p^3 > 0$ ) y redundantes ( $I_x^3 < 0$ ) en el espacio de posición. Asimismo la presencia de estos

puntos extremos sugiere que las magnitudes se pueden ajustar con  $\kappa$ .

Las gráficas para potenciales negativos de tres cuerpos son consistentes con el caso positivo en que las interacciones dominantes son sinérgicas en el espacio de momentos y redundantes en el espacio de posición. Sin embargo, estas gráficas no muestran un máximo o un mínimo y se acercan a cero para  $\kappa_-$  más grande. Es importante señalar que existe un equilibrio entre componentes sinérgicos y redundantes para valores de  $\kappa_-$  más grande.

En la **Figura 9.7** se presentan los resultados con un potencial repulsivo de dos cuerpos. Lo que es diferente es que todas las correlaciones ahora son mayores en el espacio de momentos. Además, para las correlaciones de orden alto las interacciones dominantes ahora son sinérgicas en el espacio de posición y redundantes en el espacio de momentos para potenciales de tres cuerpos positivos y negativos.

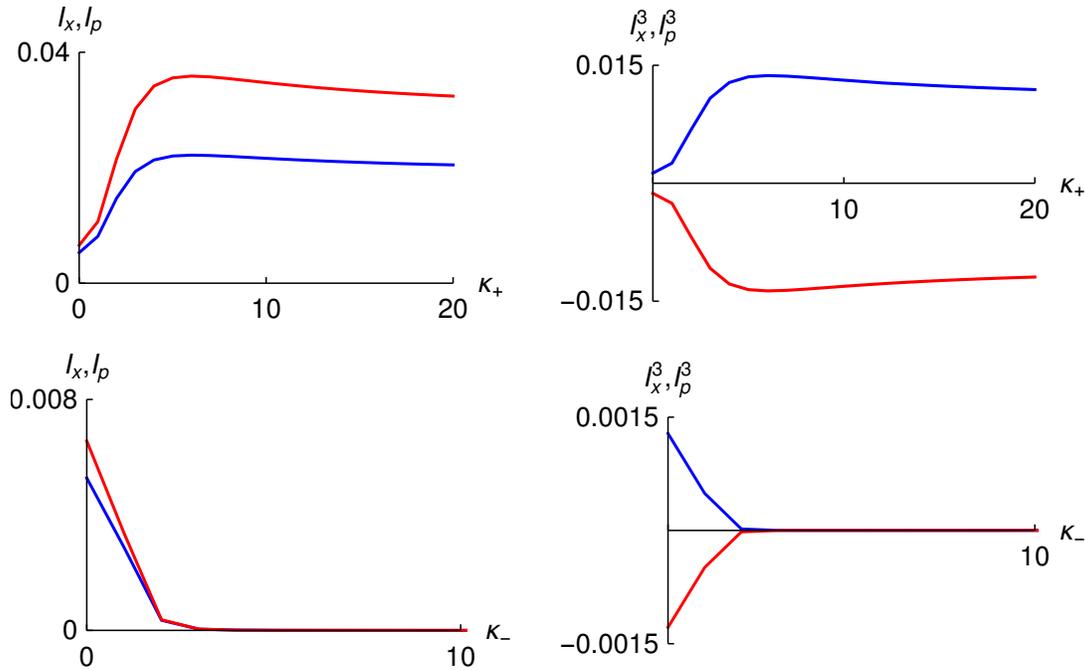


Figura 9.7: Gráficas de la información mutua (columna izquierda) y de la información de orden alto (columna derecha), espacio de posición (azul) y espacio de momentos (rojo) como función del parámetro  $\kappa_{\pm}$ . Para un valor positivo (fila superior) y un valor negativo (fila inferior).  $\omega = \alpha = 1$  y  $\lambda = 0,4$  (potencial de pares repulsivo).

En la **Figura 9.8** se analizan los componentes sinérgicos ( $S$ ) y redundantes ( $R$ ) de la información de alto orden en función de  $\kappa_{\pm}$  en el espacio de posición (izquierda) y en el espacio de momentos (derecha) para las respectivas curvas que se presentaron en la **Fi-**

**gura 9.6.** Las cuales corresponden a sistemas con potenciales de pares atractivos. La fila superior es para potenciales positivos de tres cuerpos y la fila inferior es el caso negativo. Aquí se observa que el componente redundante domina en el espacio de posición (columna izquierda) mientras que el componente sinérgico domina en el espacio de momentos (columna derecha).

En la fila inferior de la **Figura 9.8** para un potencial negativo de tres cuerpos se observa que las medidas de orden alto van a cero para  $\kappa$  grande porque cada componente individual ( $S$ ,  $R$ ) también van a cero.

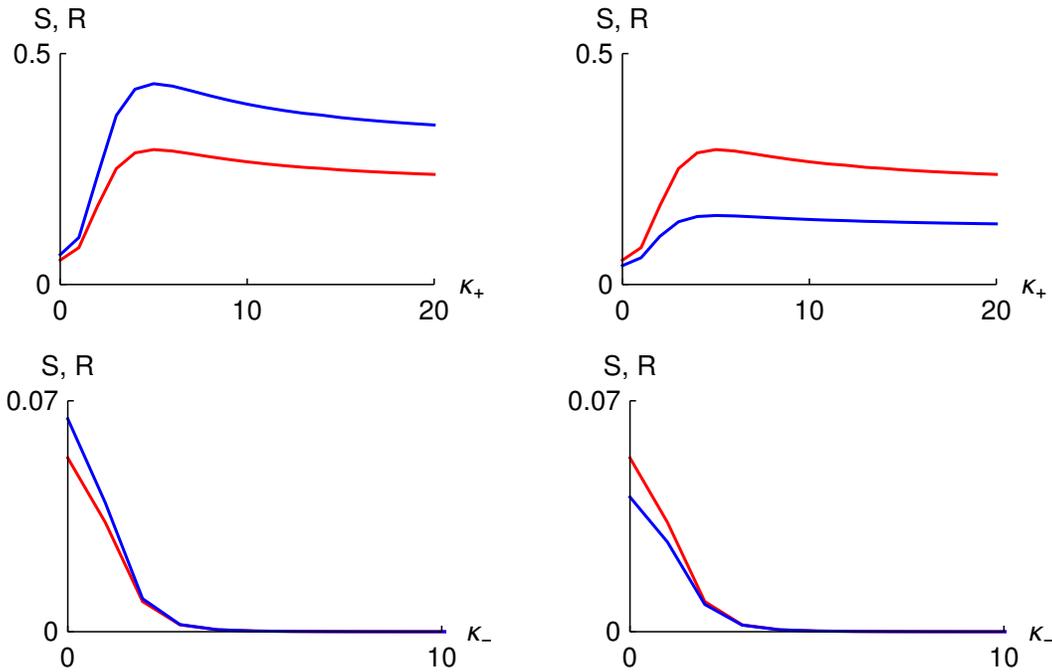


Figura 9.8: Gráficas de las componentes sinérgica ( $S$ ) y redundante ( $R$ ) de la información de orden alto en el espacio de posición (columna izquierda) y en el espacio de momentos (columna derecha) como función del parámetro  $\kappa_{\pm}$ . Caso positivo (fila superior) y caso negativo (fila inferior).  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial de pares atractivo).

### 9.3.2. Ancho del potencial

En este punto estudiamos cómo el ancho o la forma del potencial de tres cuerpos influye en las entropías de Shannon y las medidas de información. El ancho del potencial se modula con el parámetro  $\alpha$  en el exponente del potencial Gaussiano de tres cuerpos.

Un valor pequeño de  $\alpha$  corresponde a un potencial más amplio mientras que uno grande resulta en un potencial más estrecho.

En la **Figura 9.9** se muestran las tendencias de las entropías en función de  $\kappa_+$  para diferentes valores de  $\alpha$ . Además, se observa que con  $\alpha$  más grande los sistemas se localizan en el espacio de posición (entropías más pequeñas) mientras que se deslocalizan en el espacio de momentos (entropías más grandes).

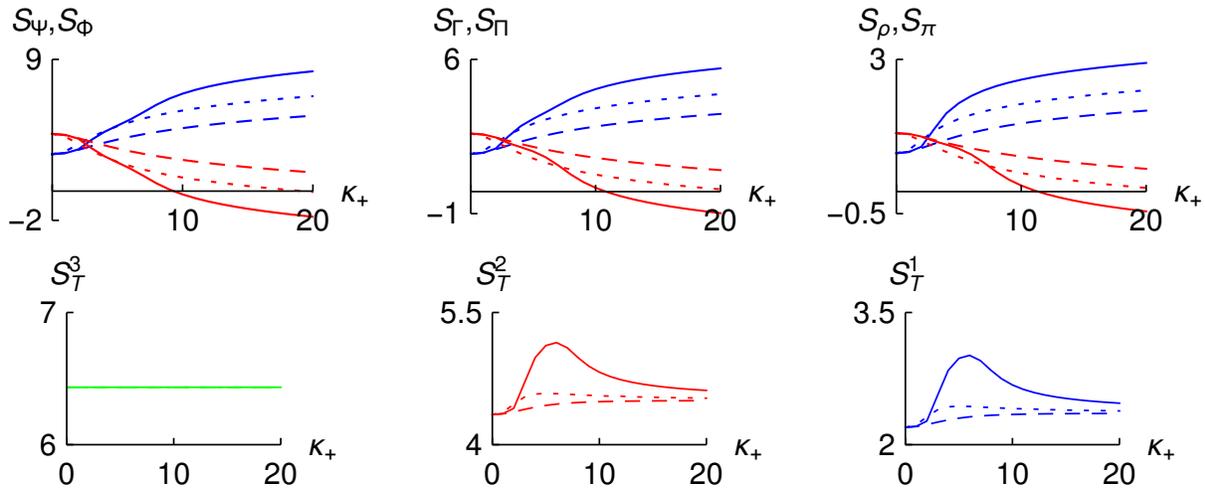


Figura 9.9: Gráficas de las entropías de Shannon para una, dos y tres partículas (primera fila) contra el parámetro  $\kappa_+$  en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo). Para  $\alpha = 0,1$  (línea continua),  $\alpha = 1,0$  (línea punteada) y  $\alpha = 5,0$  (línea discontinua). La segunda fila muestra las sumas entrópicas correspondientes.  $\omega = \lambda = 1$  (potencial de pares atractivo).

Las sumas entrópicas también se presentan en la **Figura 9.9**  $S_T^3$  la cual es constante y su valor no depende de  $\alpha$ . Por otro lado las gráficas de  $S_T^2$  y  $S_T^1$  muestran máximos pronunciados que son más prominentes para valores de  $\alpha$  más pequeños. Con un aumento en  $\alpha$  los máximos desaparecen. Estas curvas ilustran que la presencia de los máximos y los valores de estas sumas entrópicas están controlados por la altura ( $\kappa$ ) y el ancho ( $\alpha$ ) del potencial de tres cuerpos.

Los comportamientos de las medidas de información de orden alto se presentan en la **Figura 9.10** en función de  $\kappa$  para diferentes valores de  $\alpha$ . Aquí también se aprecia la presencia de máximos y mínimos en las curvas de las medidas de información. En donde la altura de los máximos o mínimos depende del valor de  $\alpha$ . Un valor más pequeño de  $\alpha$  induce un máximo más alto. Los máximos o mínimos desaparecen para un  $\alpha$  más grande. Por lo tanto, las magnitudes de la información de orden alto dependen del ancho del

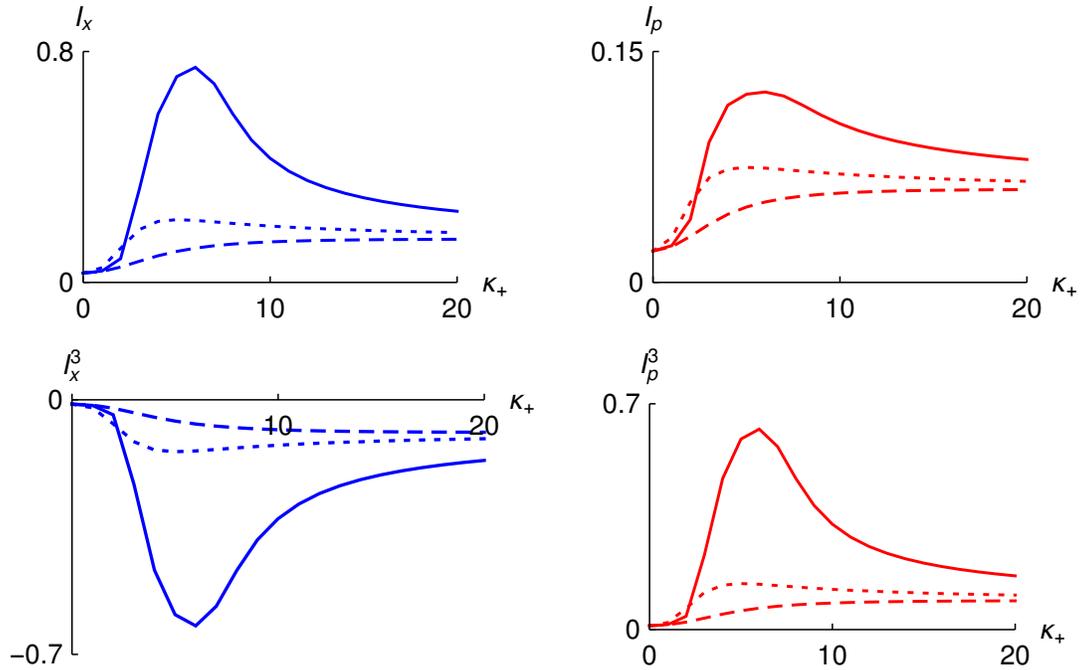


Figura 9.10: Gráficas de la información mutua (primera fila) y la información de alto orden (segunda fila) como función del parámetro  $\kappa_+$  en espacio de posición (azul) y en espacio de momentos (rojo). Para  $\alpha = 0,1$  (línea continua),  $\alpha = 1,0$  (línea punteada) y  $\alpha = 5,0$  (línea discontinua).  $\omega = \lambda = 1$  (potencial de pares atractivo).

potencial de tres cuerpos. Asimismo la posición de los máximos y mínimos cambia con respecto a  $\kappa_+$  y  $\alpha$ .

## 9.4. Potencial producto y potencial Gaussiano alternativo

Otra propuesta natural para estudiar el efecto de un potencial de tres cuerpos es el potencial producto de tres partículas con la siguiente forma (ver **sección 2.6**)

$$\pm \kappa^2 x_1^2 x_2^2 x_3^2. \quad (9.2)$$

En este caso para  $\kappa_-$  (potencial negativo caso repulsivo) no se consiguen energías acotadas. Por lo que las pruebas se hicieron con  $\kappa_+$  (potencial positivo caso atractivo). En la **Figura 9.11** para el potencial producto (9.2) con  $\kappa_+$  y potencial de pares  $\lambda$  (atractivo

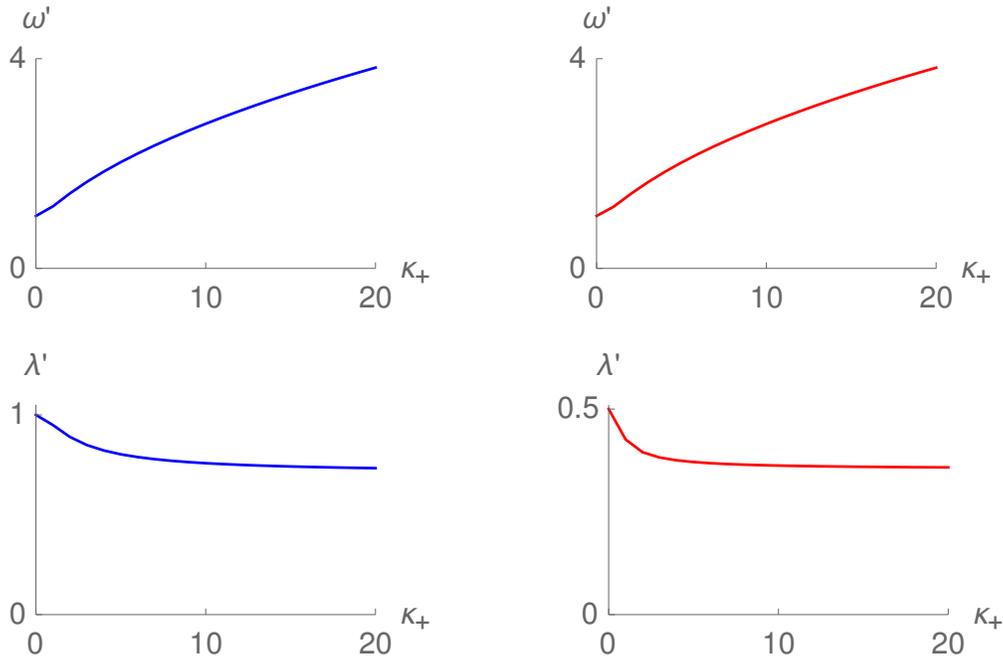


Figura 9.11: Gráficas de los parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  contra el parámetro  $\kappa_+$ . Para potencial de pares positivo (azul) con  $\omega = \lambda = 1$  y potencial de pares negativo (rojo) con  $\omega = 1$  y  $\lambda = 0,5$ .

o repulsivo) se muestra que  $\omega'$  aumenta y  $\lambda'$  disminuye cuando crece  $\kappa$ . En ambos casos predomina el efecto del potencial de un cuerpo el cual se intensifica al aumentar  $\kappa$ . El comportamiento de  $\omega'$  es casi igual y crece monótonamente para ambos casos (potencial de pares atractivo y repulsivo). Por lo tanto el potencial efectivo en función de  $\kappa_+$  depende del valor de  $\omega'$ . En este sentido se comporta como si sólo tuviera términos de un cuerpo, es decir, como un sistema de tres osciladores desacoplados.

También presentamos resultados para el potencial de tres cuerpos (ver **sección 2.6**)

$$\pm \kappa^2 e^{-\alpha \frac{2}{3} [(x_1-x_2)^2 + (x_2-x_3)^2 + (x_3-x_1)^2]}. \quad (9.3)$$

Esta forma particular de potencial ha sido estudiada en la literatura [111]. El cual se puede expresar en términos de las coordenadas relativas de Jacobi como  $\pm \kappa^2 e^{-\alpha' (r_1^2 + r_2^2)}$ .

La **Figura 9.12** muestra los parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  en función de  $\kappa_{\pm}$  donde los potenciales de dos y tres cuerpos son repulsivos o atractivos. Se observan varias diferencias en el comportamiento en comparación con la **Figura 9.1**. En primer lugar los valores de

## CAPÍTULO 9

$\omega'$  son constantes para  $\kappa_{\pm}$  con  $\omega = \omega' = 1$ . Por lo tanto no hay cambios en los términos de un cuerpo del potencial efectivo para valores mayores de  $\kappa_{\pm}$ . En segundo lugar  $\lambda'$  aumenta con  $\kappa_{\pm}$ . Por lo que el potencial efectivo en función de  $\kappa_{\pm}$  depende estrictamente del valor de  $\lambda'$ . El valor se fija como  $\lambda = 1$  para  $\kappa_-$  (atractivo) mientras que  $\lambda = 0,01$  para  $\kappa_+$  (repulsivo).

Estas pruebas muestran que los potenciales efectivos que se generan dependen totalmente de  $\lambda'$  y también las intensidades más grandes del potencial de tres cuerpos corresponden a valores más grandes de  $\lambda'$ . Esto sustenta la idea de que un estudio de las entropías y las medidas de correlación con el aumento de  $\lambda$  puede concebirse como un estudio del potencial efectivo generado por la interacción de tres cuerpos. De hecho las medidas de información mutua y de orden alto generadas a partir de este potencial en función de  $\kappa_+$  tienen el mismo comportamiento de las curvas que se mostraron en la **sección 6** en función de  $\lambda$ .

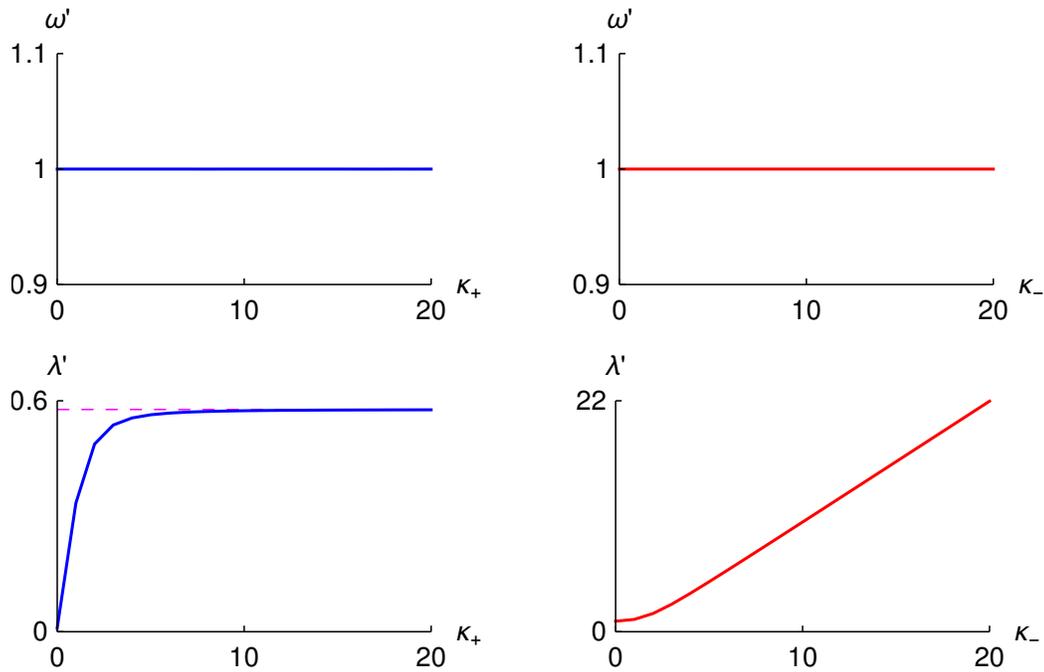


Figura 9.12: Gráficas de los parámetros efectivos  $\omega'$  y  $\lambda'$  contra el parámetro  $\kappa_+$ . Para potenciales de tres cuerpos positivo (azul) y negativo (rojo). Se establece que  $\kappa_-$  con  $\omega = \lambda = \alpha = 1$  (potencial atractivo de pares) y  $\kappa_+$  con  $\omega = \alpha = 1$  y  $\lambda = 0,01$  (potencial repulsivo de pares). El valor límite de  $\lambda' = 1/\sqrt{3}$  para  $\kappa_+$  se muestra como una línea discontinua horizontal.

## 9.5. Conclusiones

- El sistema sujeto a un potencial explícito de tres cuerpos de tipo Gaussiano se estudia como un sistema en términos de un Hamiltoniano efectivo con potenciales efectivos de uno y dos cuerpos.
- Las correlaciones estadísticas de pares y de alto orden se modulan a través del potencial de acoplamiento y con el ancho del potencial de tres cuerpos.
- Las sumas entrópicas para tres variables son constantes al variar el potencial de tres cuerpos. Sin embargo, las sumas entrópicas para dos variables y una variable no son constantes. En los tres casos se cumple la respectiva cota.
- Las correlaciones de pares y de alto orden exhiben máximos locales (o mínimos) al variar el potencial de acoplamiento de tres cuerpos.
- El sistema sujeto al potencial explícito de tres cuerpos de tipo Gaussiano tiene un parámetro adicional que sirve para ajustar el ancho del potencial de tres cuerpos y funciona también para modular la magnitud de las correlaciones estadísticas de pares y de alto orden.
- La posición de los puntos extremos (máximos o mínimos) en las medidas de correlación depende del ancho de potencial y estos desaparecen a medida que dicho potencial crece.

## Conclusiones generales

En un principio se plantearon algunas preguntas cómo hipótesis de trabajo y en este sentido la tesis responde a estas de la siguiente manera.

La primera de estas preguntas es ¿cuál es la mejor manera de medir correlaciones? Para dar respuesta a esto hemos introducido algunas medidas de pares y de orden alto en términos de las densidades acumulativas que tienen acuerdo con las correspondientes medidas informacionales de Shannon. Por otro lado, las medidas basadas en momentos de la densidad de alto orden resultan ser representaciones analíticas para el nivel de dos y tres variables. En particular estas últimas medidas no requieren del cálculo de integrales de forma numérica.

Otra pregunta relacionada con la construcción de las medidas es ¿cómo medir correlaciones de orden superior en sistemas cuánticos? En este caso una consideración importante en este trabajo fue usar analogías que provienen de la teoría de la información para construir medidas que capturan las correlaciones de alto orden en espacio de posición y espacio de momentos en los sistemas de osciladores cuánticos.

Una cuestión importante fue estudiar ¿cuáles son los efectos de estas correlaciones en el comportamiento de los sistemas cuánticos? El acto de medir es fundamental en las ciencias físicas y químicas, así en el intento de explorar nuevas formas de medir la correlación en sistemas cuánticos interactuantes se plantearon alternativas que se basan principalmente en examinar la información que proviene de la densidad. Además, se identificó que existe una relación funcional la cual depende de la intensidad y la naturaleza de los potenciales de interacción en espacio de posición y en espacio de momentos que es consecuencia de la relación entre los potenciales de un cuerpo y dos cuerpos.

Por otro lado nos cuestionamos ¿si las nuevas medidas pueden capturar la información significativa en los sistemas estudiados? La información significativa sí es capturada con las medidas propuestas. En los sistemas estudiados vimos que la interpretación de las medidas informacionales de Shannon se puede complementar con la utilización de las otras medidas basadas en densidades acumulativas y en los momentos de la densidad. Por ejemplo, la presencia de los puntos de cruce en la información de interacción de tercer orden para una representación particular está determinada por la naturaleza del potencial

de interacción y no por la simetría de la función de onda. Asimismo, la presencia en ambos espacios es resultado de la relación que iguala el comportamiento funcional de las funciones de onda en cada representación.

Finalmente, ¿es factible e inmediata la construcción de medidas para estudiar sistemas complejos? Resulta viable la alternativa de construir medidas de alto orden para sistemas multivariados en términos de medidas basadas en momentos de la densidad. En este punto podemos considerar a las medidas de cokurtosis de alto orden como opciones admisibles para ser usadas en sistemas con más de tres partículas.

# Perspectivas

- Estudiar como cambian los sistemas sometidos a potenciales armónicos bajo el control de campos eléctricos y magnéticos.
- Estudiar las medidas basadas en densidades acumulativas para los estados excitados  $|100\rangle$  y  $|011\rangle$ .
- Estudiar cómo cambia el potencial de tres cuerpos  $\kappa$  resolviendo el Hamiltoniano efectivo en la representación de momentos  $p$ .
- Estudiar la entropía de Rényi y la información mutua (con parámetro  $\alpha = 2$ ) en relación con las medidas informacionales para las funciones de Wigner y de Husimi.
- Estudiar los sistemas termales de dos bosones y dos fermiones con un potencial de interacción de pares utilizando las medidas de correlación de órdenes altos en términos de entropías de Shannon y densidades acumulativas. Además, extender el estudio a tres partículas (bosones y fermiones) sin interacción y con interacción.
- Estudiar las medidas informacionales basadas en momentos de orden superior de las densidades para sistemas atómicos (átomo de helio) con la inclusión de la componente angular.
- En el contexto de este trabajo reconocemos que existen otras medidas de información y complejidad las cuales se basan en una partícula (una variable). Tal es el caso de la entropía de Fisher que se construye a partir de la densidad de una variable. Aunque no se estudió dicha medida informacional en este caso la pregunta que nos hacemos es la siguiente ¿cómo se puede extender la definición de la entropía de Fisher a densidades de pares [18] a órdenes altos y así estudiar la correlación?

# Apéndice A

## Coeficiente de correlación para la distribución Gaussiana del estado basal $|000\rangle$

El coeficiente de correlación en densidades reducidas a 2 partículas (para el estado  $|000\rangle$ ) se puede determinar de forma alternativa a la planteada anteriormente. Si consideramos que la solución general para un oscilador armónico en dos dimensiones es una elipse. En nuestro caso para el estado simétrico  $|000\rangle$  escribimos la distribución de la densidad reducida de dos partículas como una distribución Gaussiana en dos dimensiones también conocida como binormal

$$\Gamma(x_1, x_2) = k \exp\left[-\frac{1}{2}(a_{11}x_1^2 - 2a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2)\right], \quad (\text{A1})$$

donde  $k$  es una constante y los coeficientes  $a_{11}$ ,  $a_{12}$  y  $a_{22}$  dependen del parámetro  $\lambda$ .

Para este tipo de distribución el coeficiente de correlación se define como

$$\tau = -\frac{a_{12}}{\sqrt{a_{11}a_{22}}}. \quad (\text{A2})$$

Además, tenemos que al incrementar el valor del parámetro de correlación  $\tau$  el perfil de densidad se comprime en la dirección de la línea recta dada por

$$y(z) = \text{sgn}(\tau) \frac{\sigma_{x_1}}{\sigma_{x_2}} (z - \langle x_1 \rangle) + \langle x_2 \rangle, \quad (\text{A3})$$

en particular para nuestro caso tenemos a la función de densidad Gaussiana con  $\langle x_1 \rangle = \langle x_2 \rangle = 0$ , y al ser indistinguibles  $\sigma_{x_1} = \sigma_{x_2}$  por lo que

$$y(z) = \text{sgn}(\tau)z, \quad (\text{A4})$$

## APÉNDICE A

---

donde la función signo  $sgn(\tau)$  toma los valores

$$sgn(\tau) = \begin{cases} -1 & \text{si } \tau < 0, \\ 0 & \text{si } \tau = 0, \\ 1 & \text{si } \tau > 0, \end{cases}$$

lo cual depende solamente del signo en el coeficiente  $a_{12}$  en la forma cuadrática de la Gaussiana.

Por otro lado de la forma cuadrática general tenemos que

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0, \quad (\text{A5})$$

donde la excentricidad se define como

$$\epsilon = \sqrt{\frac{2\sqrt{(A-C)^2 + B^2}}{\eta(A+C) + \sqrt{(A-C)^2 + B^2}}}, \quad (\text{A6})$$

para un círculo  $\epsilon = 0$  y para una elipse  $0 < \epsilon < 1$ . En ecuación (A6) debemos especificar el valor de la constante  $\eta$  a partir del signo en el determinante de la matriz simétrica  $M$  asociada a la forma cuadrática (A5)

$$\text{si el } \det[M] < 0 \Rightarrow \eta = 1, \quad (\text{A7})$$

$$\text{si el } \det[M] > 0 \Rightarrow \eta = -1, \quad (\text{A8})$$

con

$$\det[M] = \det \begin{bmatrix} A & \frac{B}{2} & \frac{D}{2} \\ \frac{B}{2} & C & \frac{E}{2} \\ \frac{D}{2} & \frac{E}{2} & F \end{bmatrix}.$$

En particular de la ecuación (A1) tenemos

$$\det[M] = \det \begin{bmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ -a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}^2,$$

y la excentricidad

$$\epsilon = \sqrt{\frac{2\sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + a_{12}^2}}{\eta(a_{11} + a_{22}) + \sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + a_{12}^2}}}. \quad (\text{A9})$$

Con este procedimiento se llega a los mismos valores del coeficiente de correlación  $\tau$  que con la ecuación (4.8) para el estado  $|000\rangle$ . Las excentricidades  $\epsilon$  calculadas muestran que la deformación de las elipses están determinadas por el parámetro  $\lambda$ . En la **Figura A1** se observa que el eje mayor de la elipse cuando  $\lambda > 0$  está sobre la recta con pendiente

1 en el espacio de posición donde  $\tau_x > 0$  y en la recta con pendiente  $-1$  en el espacio de momentos donde  $\tau_p < 0$ .

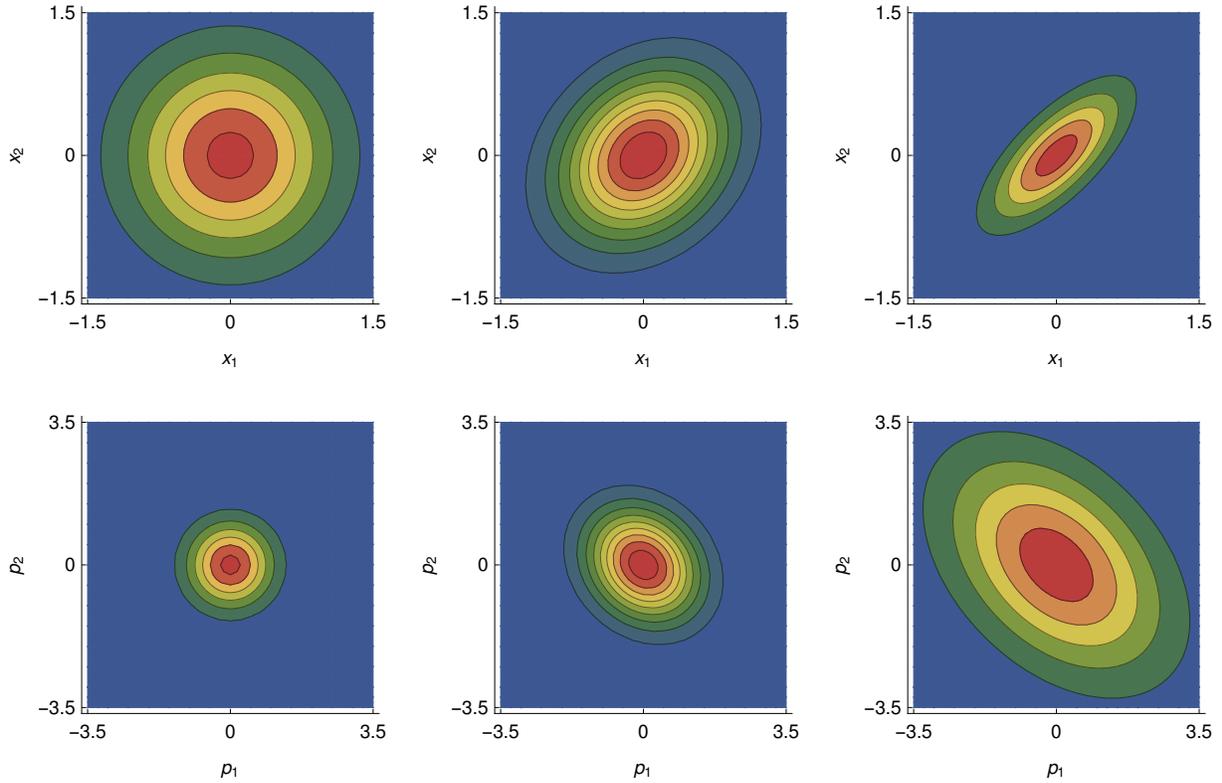


Figura A1: Gráficas de contornos de la función de densidad reducida estado  $|000\rangle$  con potencial atractivo y  $\omega = 1$ . Primera fila: espacio de posición  $\Gamma(x_1, x_2)$  con potencial  $\lambda = 0, 1, 5$  y excentricidad  $\epsilon = 0, 0,22, 0,52$  de izquierda a derecha. Segunda fila: espacio de momentos  $\Pi(p_1, p_2)$  con potencial  $\lambda = 0, 1, 5$  y excentricidad  $\epsilon = 0, 0,22, 0,52$  de izquierda a derecha. El color rojo indica una región de mayor densidad y el color verde una región de menor densidad.

Por otro lado de la **Figura A2** se observa que el eje mayor de la elipse cuando  $0 < \lambda < \frac{1}{\sqrt{3}}$  está sobre la recta con pendiente  $-1$  en el espacio de posición donde  $\tau_x < 0$  y en la recta con pendiente  $1$  en el espacio de momentos donde  $\tau_p > 0$ .

## APÉNDICE A

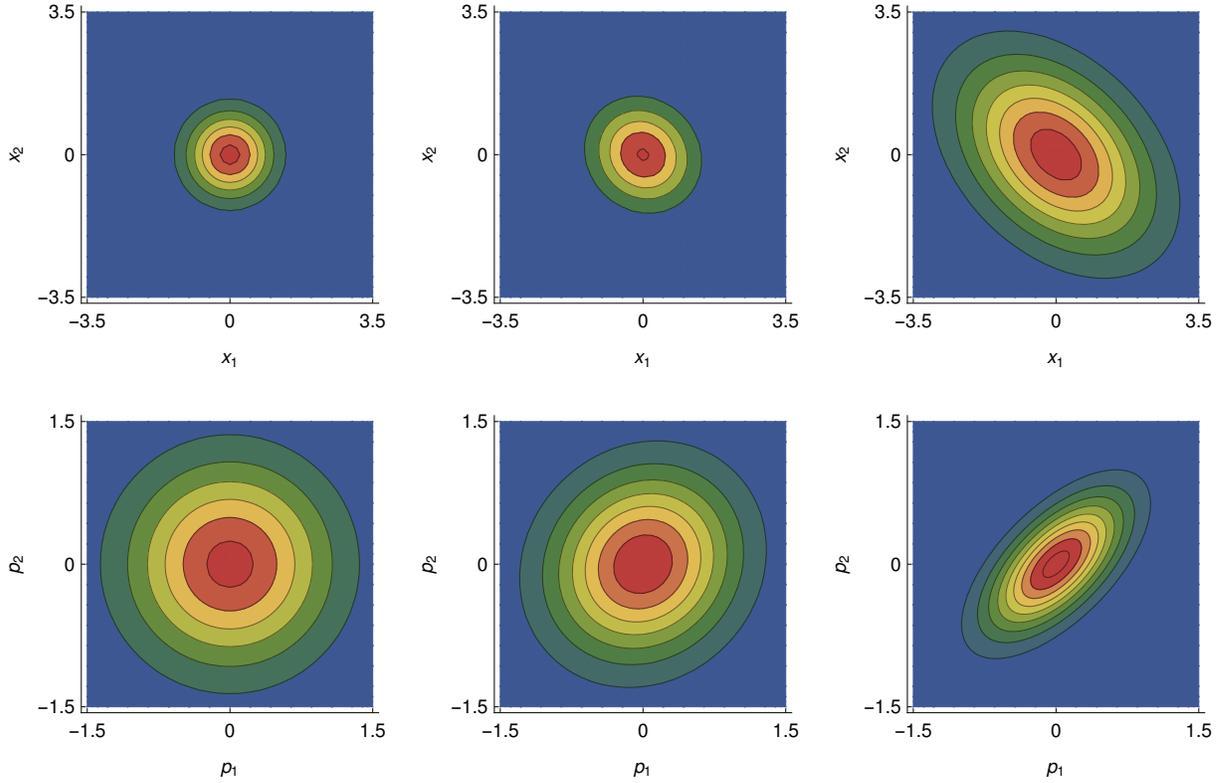


Figura A2: Gráficas de contornos de la función de densidad reducida estado  $|000\rangle$  con potencial repulsivo y  $\omega = 1$ . Primera fila: espacio de posición  $\Gamma(x_1, x_2)$  con potencial  $\lambda = 0, 0,4, 0,57$  y excentricidad  $\epsilon = 0, 0,06, 0,11$  de izquierda a derecha. Segunda fila: espacio de momentos  $\Pi(p_1, p_2)$  con potencial  $\lambda = 0, 0,4, 0,57$  y excentricidad  $\epsilon = 0, 0,06, 0,11$  de izquierda a derecha. El color rojo indica una región de mayor densidad y el color verde una región de menor densidad.

En ambas figuras se muestra que cuando  $\lambda = 0$  entonces el valor de  $\epsilon = 0$  lo cual corresponde a círculos concéntricos donde el valor del coeficiente de correlación es igual a cero.

# Apéndice B

## Relación funcional entre los parámetros de los potenciales $(\omega_{\pm}, \lambda_{\pm})$ en espacios opuestos: 2-Osciladores acoplados

Presentamos el análisis de los valores propios para la matriz de covarianza y la matriz de correlación en el caso de dos osciladores interactuantes con espín. Definimos la matriz de covarianza para dos partículas indistinguibles

$$M_{Cov} = \begin{pmatrix} \sigma_x^2 & Cov(x_1, x_2) \\ Cov(x_2, x_1) & \sigma_x^2 \end{pmatrix}, \quad (B1)$$

con vectores propios

$$\{d_1, d_2\} = \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (B2)$$

y valores propios

$$\{v_1, v_2\} = \{\sigma_x^2 - Cov(x_1, x_2), \sigma_x^2 + Cov(x_1, x_2)\}. \quad (B3)$$

Por otro lado definimos la matriz del coeficiente de correlación

$$M_{\tau} = \begin{pmatrix} 1 & \tau(x_1, x_2) \\ \tau(x_2, x_1) & 1 \end{pmatrix}, \quad (B4)$$

de la cual obtenemos los vectores propios

$$\{e_1, e_2\} = \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (B5)$$

y sus correspondientes valores propios que dependen solamente del coeficiente de correlación

$$\{\nu_1, \nu_2\} = \{1 - \tau, 1 + \tau\}, \quad (\text{B6})$$

donde se cumple que los dos valores propios son iguales cuando  $\tau$  es cero.

En este caso también se cumple la relación inversa para los parámetros  $\{\omega_{\pm}, \lambda_{\pm}\}$  en el espacio de posición y momentos (ver **sección 2.5**)

$$\omega_-^2 \cdot \omega_+^2 = 1, \quad \frac{\omega_-^2}{\lambda_-^2} - \frac{\omega_+^2}{\lambda_+^2} = 2. \quad (\text{B7})$$

La **Figura B1** muestra las gráficas donde se pueden apreciar los valores de  $\lambda_+ = 2$  y  $\lambda_- = 0,66$  que cumplen con la segunda relación en (B7).

de los valores propios y los coeficientes de correlación para el estado  $|01\rangle$  antisimétrico en los casos de potencial atractivo  $\lambda_+$  y repulsivo  $\lambda_-$ . Además se presentan las correspondientes gráficas de contornos de las funciones de densidad de pares **Figura B2**. También en la **Figura B3** se muestran las gráficas de los valores propios y los coeficientes de correlación para el estado  $|10\rangle$  simétrico en los casos de potencial atractivo  $\lambda_+$  y repulsivo  $\lambda_-$ .

En **Figura B4** se tienen las gráficas de contornos de las funciones de densidad de pares. Se impone un valor del parámetro  $\omega = 1$  en todos los casos.

Las cuatro figuras son consistentes con lo analizado previamente en la **sección 7**. Por un lado el valor de  $\lambda$  donde cambia de signo el coeficiente de correlación se da en el punto de cruce de ambos valores propios. La orientación del eje mayor de las elipses (densidades con huecos de simetría) va de acuerdo con el signo y magnitud del coeficiente de correlación.

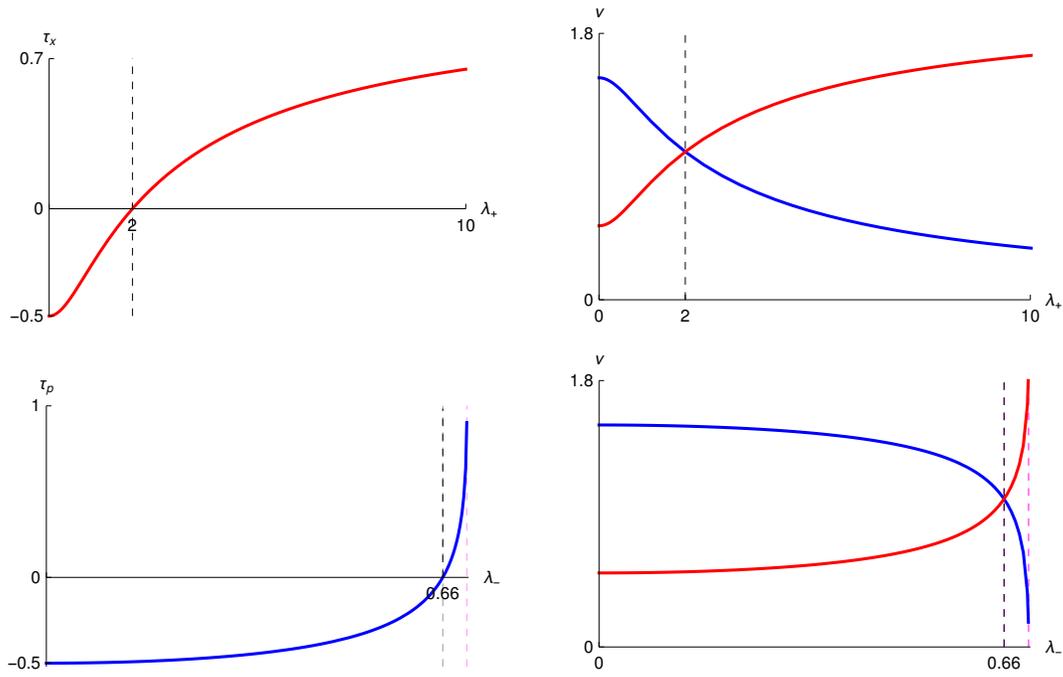


Figura B1: Gráficas del coeficiente de correlación y valores propios  $1 + \tau$  (rojo) y  $1 - \tau$  (azul) estado  $|01\rangle$ . Primera fila espacio de posición y segunda fila espacio de momentos. Línea vertical magenta valor límite de  $\lambda_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .

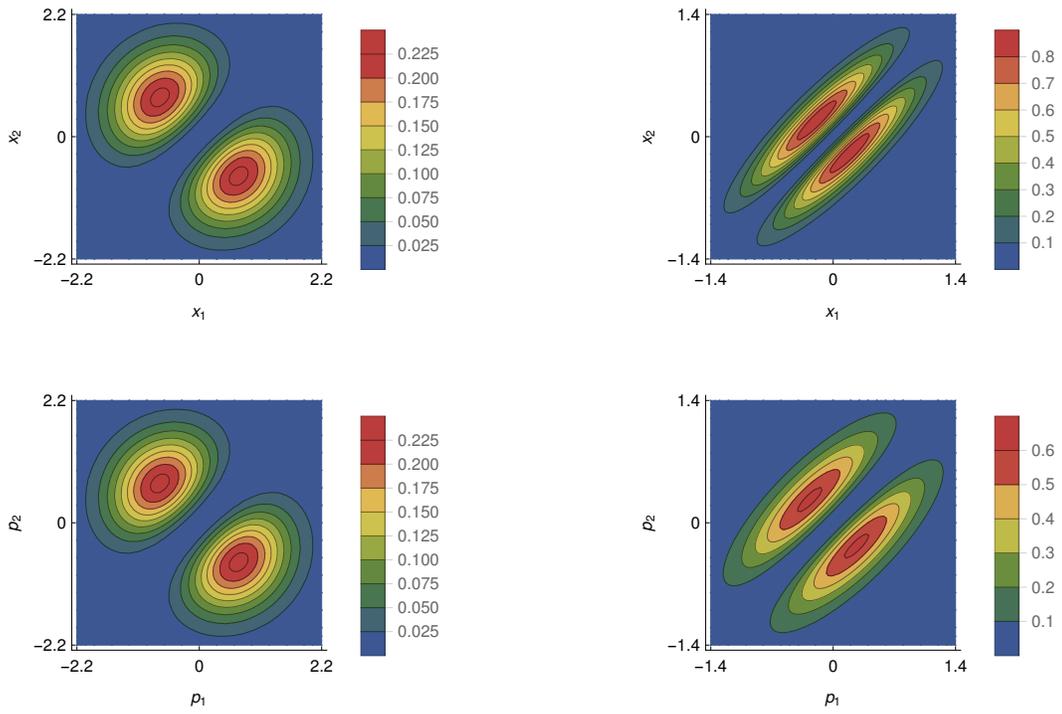


Figura B2: Gráficas de contorno de la función de densidad de pares estado  $|01\rangle$ . Espacio de posición  $\lambda_+ = 0, 10$  (primera fila de izquierda a derecha). Espacio de momentos  $\lambda_- = 0, 0,7$  (segunda fila de izquierda a derecha).

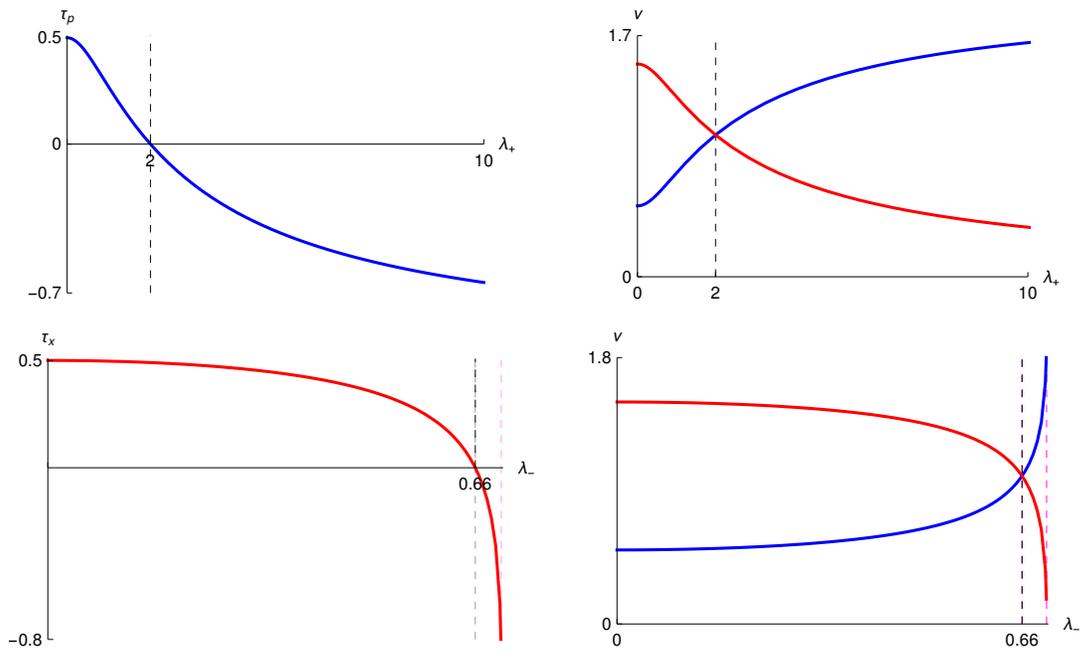


Figura B3: Gráficas del coeficiente de correlación y valores propios  $1 + \tau$  (rojo) y  $1 - \tau$  (azul) estado  $|10\rangle$ . Primera fila espacio de momentos y segunda fila espacio de posición. Línea vertical magenta valor límite de  $\lambda_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .

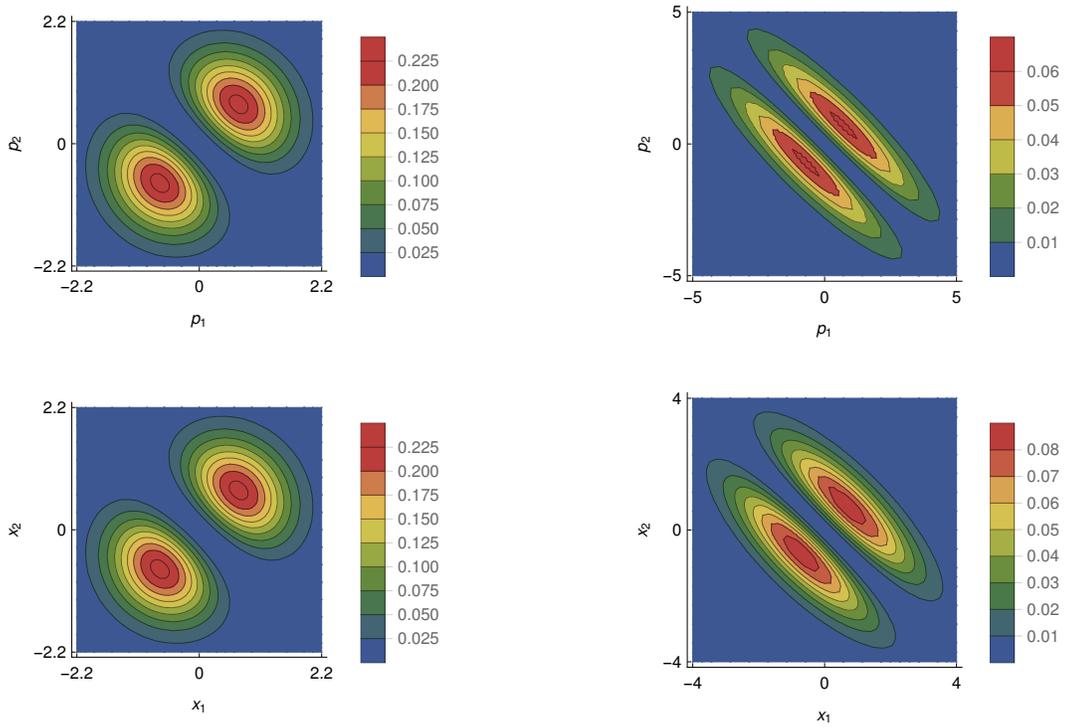


Figura B4: Gráficas de contorno de la función de densidad de pares estado  $|10\rangle$ . Espacio de momentos  $\lambda_+ = 0, 10$  (primera fila de izquierda a derecha). Espacio de posición  $\lambda_- = 0, 0,7$  (segunda fila de izquierda a derecha).

# Apéndice C

## Distribuciones de fase cuánticas y medidas basadas en densidades acumulativas

En esta sección examinamos la construcción de densidades de probabilidad conjunta para variables canónicas continuas que no conmutan en espacio fase  $xp$ . El estudio de las relaciones entre las variables mecánico cuánticas posición y/o momento permite una comprensión más completa de los sistemas cuánticos. En este sentido la función de Wigner se ha utilizado en mediciones de sistemas atómicos, aquí tenemos el trabajo de J. P. Dahl *et al.* que examinó la estructura atómica del estado fundamental del átomo de hidrógeno en espacio fase con la función de Wigner [112, 113]. También existen otros estudios en química cuántica donde se utiliza la función de Wigner [114, 115, 116]. En esta sección estudiamos otra distribución en espacio fase como es el caso de la función de Husimi con la cual evitamos la negatividad en la función de Wigner. En este punto es importante mencionar que las probabilidades cuánticas no son estrictamente Kolmogorovianas [117]. Debido a la existencia de términos de interferencia en la densidad de probabilidad que pueden dar lugar a densidades de probabilidad negativas, o bien porque el valor esperado de una variable dinámica puede tener valores negativos.

La función de Wigner sobre un espacio de Hilbert de dimensión infinita proporciona la descripción más completa de cualquier estado [118, 119, 120, 121]. Además, dicha descripción está relacionada con la matriz de densidad en la representación de variables continuas.

En términos generales la función de Wigner se define como la transformada de Weyl de la función de onda en posición  $f(x - y, x + y)$

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int f(x - y, x + y) e^{-2ipy/\hbar} dy. \quad (\text{C1})$$

También se escribe como la transformada de Weyl de la matriz de densidad  $\rho(x', x'')$

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \langle x + y | \hat{\rho} | x - y \rangle e^{-2ipy/\hbar} dy, \quad (\text{C2})$$

donde, sustituimos  $x' = x + y$ ,  $x'' = x - y$  y aplicamos la transformada de Fourier respecto a la variable  $y$ . Para un estado puro  $\langle x' | \hat{\rho} | x'' \rangle = \Psi^*(x'')\Psi(x')$  se reduce a

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \Psi^*(x - y)\Psi(x + y)e^{-2ipy/\hbar} dy, \quad (\text{C3})$$

esta es una función generadora para todas las funciones de autocorrelación espacial de una función de onda  $\Psi(x)$ .

Además la función de Wigner tiene propiedades que permiten interpretarla como el equivalente cuántico de una densidad de probabilidad en el espacio fase. Sin embargo, la función  $W(x, p)$  puede tomar valores negativos por lo que se considera como una distribución de cuasiprobabilidad en el espacio fase, donde las marginales son

$$\rho(x) = \int W(x, p) dp, \quad (\text{C4})$$

$$\pi(p) = \int W(x, p) dx, \quad (\text{C5})$$

$\rho(x)$  y  $\pi(p)$  están normalizadas a la unidad, por lo que se cumple

$$\int \int W(x, p) dx dp = 1. \quad (\text{C6})$$

El volumen de la parte negativa en la función de Wigner es una característica que indica propiedades no clásicas del estado cuántico. Es decir, cuanto mayor sea el volumen negativo de la función de Wigner, más fuertes son las propiedades cuánticas del estado [122]. La función de Wigner se ha estudiado en sistemas cuánticos como la partícula en la caja y el oscilador armónico [19, 21, 123]. En esta sección estudiamos la función de Wigner y Husimi para los estados excitados de un oscilador.

La función de Wigner para los  $n$ -estados excitados se define como

$$W_n(x, p) = (\pi\hbar)^{-1} (-1)^n e^{-\frac{2iH}{\hbar\omega}} L_n\left(\frac{4H}{\hbar\omega}\right), \quad (\text{C7})$$

donde  $H$  corresponde al Hamiltoniano

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (\text{C8})$$

y  $L_n(z)$  es el  $n$ -ésimo polinomio de Laguerre.

Ahora definimos la entropía de Wigner

$$S_W = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_n(x, p) \ln[W_n(x, p)] dx dp, \quad (C9)$$

y las correspondientes entropías marginales

$$S_W^x = S_x = - \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) \ln[\rho(x)] dx, \quad (C10)$$

$$S_W^p = S_p = - \int_{-\infty}^{\infty} \pi(p) \ln[\pi(p)] dp. \quad (C11)$$

Por otro lado la información mutua para la función de Wigner es

$$I_W^{xp} = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_n(x, p) \ln \left[ \frac{W_n(x, p)}{\rho(x)\pi(p)} \right] dx dp. \quad (C12)$$

Una propuesta para estudiar a la función de Wigner es la introducción de medidas informacionales usando las densidades acumulativas. Así, definimos las entropías residuales acumulativas *CRE* como

$$su_x^W(a) = \int_a^{\infty} \rho(x) dx, \quad (C13)$$

$$CRE_W^x = - \int_{-\infty}^{\infty} su_x^W(a) \ln su_x^W(a) da, \quad (C14)$$

$$su_p^W(a) = \int_a^{\infty} \pi(p) dp, \quad (C15)$$

$$CRE_W^p = - \int_{-\infty}^{\infty} su_p^W(a) \ln su_p^W(a) da. \quad (C16)$$

La entropía residual acumulativa conjunta *JCRE* para la función de Wigner es

$$JCRE_W^x = CRE_W^x + E[\epsilon(b|x)], \quad (C17)$$

donde el término

$$E[\epsilon(b|x)] = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(x, p > b) \ln \left[ \frac{P(x, p > b)}{\rho(x)} \right] db dx, \quad (C18)$$

y

$$P(x, p > b) = \int_b^{\infty} W_n(x, p) dp. \quad (C19)$$

La entropía residual acumulativa cruzada  $CCRE$  de la función de Wigner es

$$CCRE_W^x = CRE_W^x - E[\epsilon(b|x)]. \quad (C20)$$

También se pueden definir estas medidas acumulativas considerando la variable de momentos  $CRE_W^p$  y  $E[\epsilon(b|p)]$ .

La entropía residual acumulativa conjunta modificada  $mJCRE$  de Wigner se define como

$$mJCRE_W^x = - \int_{-\infty}^{\infty} su_x^W(a, a) \ln su_x^W(a, a) da, \quad (C21)$$

donde

$$su_x^W(a, b) = \int_a^{\infty} \int_b^{\infty} W_n(x, p) dx dp. \quad (C22)$$

Por otro lado la entropía residual acumulativa cruzada modificada  $mCCRE$  de la función de Wigner es

$$mCCRE_W^x = 2CRE_W^x - mJCRE_W^x. \quad (C23)$$

La función de Husimi se define como la transformada de Weierstrass aplicada a la distribución de cuasiprobabilidad de Wigner [124, 125, 126, 127]. Por otro lado, se puede ver que la distribución de Husimi es una versión suavizada de la distribución de Wigner a través de una Gaussiana

$$H(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \int W(x, p) e^{-\frac{(x-x')^2}{2s^2}} e^{-\frac{(p-p')^2 2s^2}{\hbar^2}} dx' dp', \quad (C24)$$

donde el parámetro  $s$  es arbitrario y cada elección de  $s$  produce un conjunto de funciones de base diferente  $\{|x, p\rangle\}$  [128]. El parámetro  $s^2$  se conoce como factor de forma y se relaciona con el grado de localización en los espacios de posición y momento [126].

Usando la función de Husimi se evita la negatividad que aparece en algunas regiones de la función de Wigner y se consigue una distribución de probabilidad conjunta. La función de Husimi se obtiene a partir de la convolución con una doble Gaussiana, por lo que no tiene la misma información que la función de Wigner de la cual proviene ya que toda su información ha pasado por un filtro.

La función de Husimi para los  $n$ -estados excitados

$$H_n(x, p) = (2\pi\hbar n!)^{-1} e^{-\frac{H}{\hbar\omega}} \left( \frac{H}{\hbar\omega} \right)^n, \quad (C25)$$

donde  $H$  es el Hamiltoniano  $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ . Las marginales de la función de Husimi

son

$$\rho_H(x) = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x, p) dp, \quad (C26)$$

$$\pi_H(p) = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x, p) dx. \quad (C27)$$

Aquí definimos la entropía de Husimi también conocida como entropía de Wehrl

$$S_H = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x, p) \ln[H_n(x, p)] dx dp, \quad (C28)$$

las entropías marginales de la función de Husimi son

$$S_H^x = - \int_{-\infty}^{\infty} \rho_H(x) \ln[\rho_H(x)] dx, \quad (C29)$$

$$S_H^p = - \int_{-\infty}^{\infty} \pi_H(p) \ln[\pi_H(p)] dp. \quad (C30)$$

La información mutua de la función de Husimi es

$$I_H^{xp} = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x, p) \ln \left[ \frac{H_n(x, p)}{\rho_H(x) \pi_H(p)} \right] dx dp. \quad (C31)$$

Ahora definimos las medidas basadas en densidades acumulativas para la función de Husimi. Las entropías residuales acumulativas *CRE* son

$$su_x^H(a) = \int_a^{\infty} \rho_H(x) dx, \quad (C32)$$

$$CRE_H^x = - \int_{-\infty}^{\infty} su_x^H(a) \ln su_x^H(a) da, \quad (C33)$$

$$su_p^H(a) = \int_a^{\infty} \pi_H(p) dp, \quad (C34)$$

$$CRE_H^p = - \int_{-\infty}^{\infty} su_p^H(a) \ln su_p^H(a) da. \quad (C35)$$

La entropía residual acumulativa conjunta *JCRE* de la función de Husimi es

$$JCRE_H^x = CRE_H^x + E[\epsilon(b|x)], \quad (C36)$$

donde el término

$$E[\epsilon(b|x)] = - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(x, p > b) \ln \left[ \frac{P(x, p > b)}{\rho_H(x)} \right] db dx, \quad (C37)$$

y

$$P(x, p > b) = \int_b^{\infty} H_n(x, p) dp. \quad (\text{C38})$$

La entropía residual acumulativa cruzada *CCRE* de la función de Husimi

$$CCRE_H^x = CRE_H^x - E[\epsilon(b|x)]. \quad (\text{C39})$$

También se pueden definir estas medidas acumulativas considerando la variable de momentos  $CRE_H^p$  y  $E[\epsilon(b|p)]$ .

La entropía residual acumulativa conjunta modificada *mJCRE* de Husimi es

$$mJCRE_H^x = - \int_{-\infty}^{\infty} su_x^H(a, a) \ln su_x^H(a, a) da, \quad (\text{C40})$$

donde

$$su_x^H(a, b) = \int_a^{\infty} \int_b^{\infty} H_n(x, p) dx dp. \quad (\text{C41})$$

Por otro lado la entropía residual acumulativa cruzada modificada *mCCRE* de la función de Husimi

$$mCCRE_H^x = 2CRE_H^x - mJCRE_H^x. \quad (\text{C42})$$

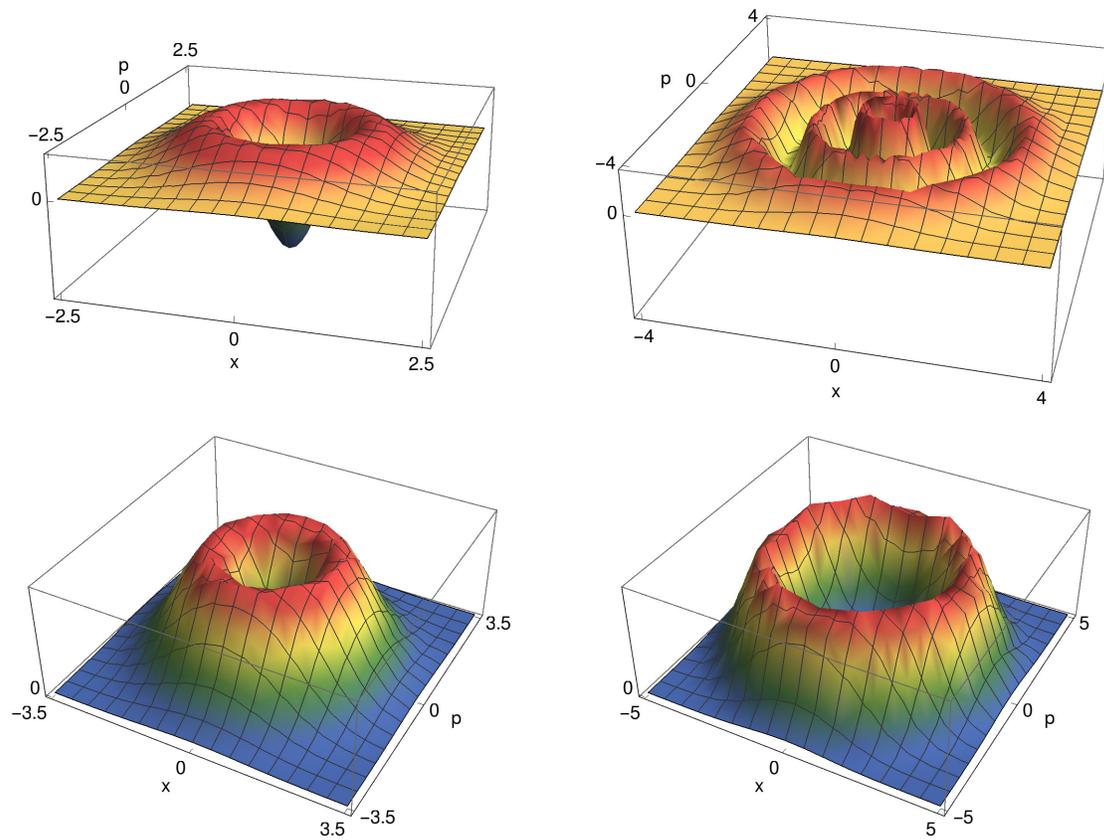


Figura C1: Primera fila: gráficas de la función de Wigner  $W(x, p)$ . Segunda fila: gráficas de la función de Husimi  $H(x, p)$ . En ambos casos con  $\omega = 1$  y valores de  $n = 1, 5$  (de izquierda a derecha).

La **Figura C1** muestra las diferencias entre la función de Wigner  $W(x, p)$  y la función de Husimi  $H(x, p)$ . Aquí se observan regiones negativas en  $W(x, p)$  mientras  $H(x, p)$  no tiene regiones negativas, además  $W(x, p)$  muestra más estructura que  $H(x, p)$ .

## APÉNDICE C

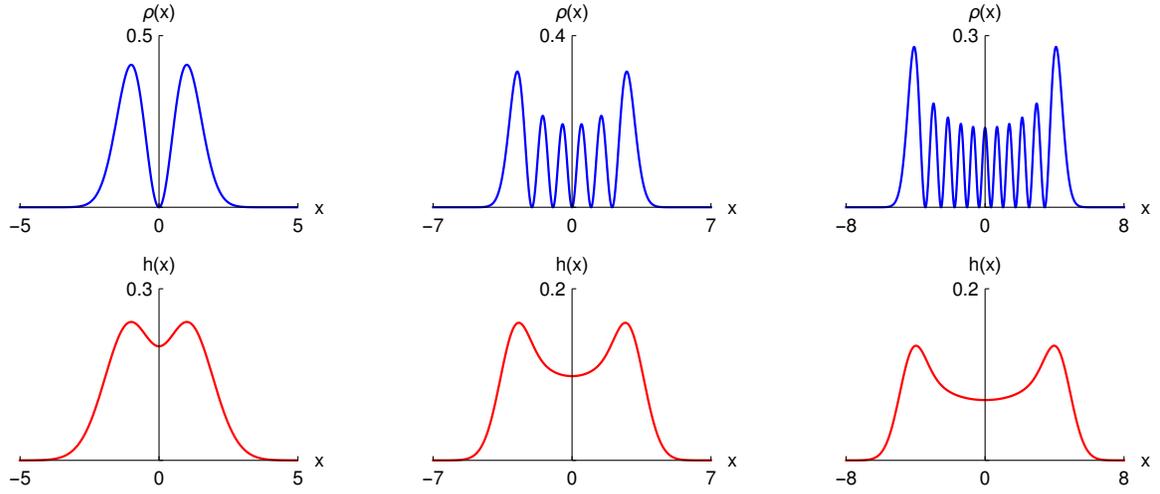


Figura C2: Primera fila: gráficas de las marginales  $\rho(x)$  para la función de Wigner. Segunda fila: gráficas de las marginales  $h(x)$  para la función de Husimi. En espacio de posición con  $\omega = 1$ , para diferentes valores de  $n = 1, 5, 10$  (de izquierda a derecha).

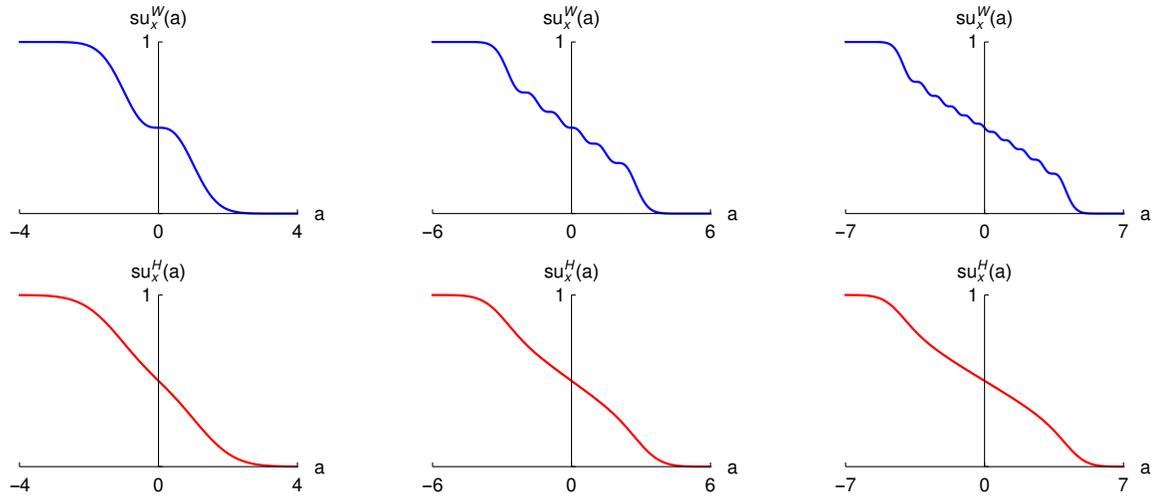


Figura C3: Primera fila: gráficas de funciones survival  $su_x^W(a)$  para la función de Wigner. Segunda fila: gráficas de funciones survival  $su_x^H(a)$  para la función de Husimi. En espacio de posición con  $\omega = 1$ , para diferentes valores de  $n = 1, 5, 10$  (de izquierda a derecha).

Las densidades marginales en espacio de posición  $\rho(x)$  y  $h(x)$  se presentan en la **Figura C2**. En la primera fila tenemos la marginal de la función de Wigner donde vemos la

estructura nodal, sin embargo, en la segunda fila se muestra la marginal de la función de Husimi donde no hay estructura nodal.

Por otro lado, en la primera fila de la **Figura C3** observamos la presencia de estructura (máximos y mínimos) en las funciones survival  $su_x^W(a)$  de la función de Wigner. Mientras que en la segunda fila la estructura desaparece en las funciones survival  $su_x^H(a)$  de la función de Husimi. En este punto es interesante señalar que el número total de máximos y mínimos es igual a  $2n$  respecto al número cuántico  $n$  para la función de Wigner.

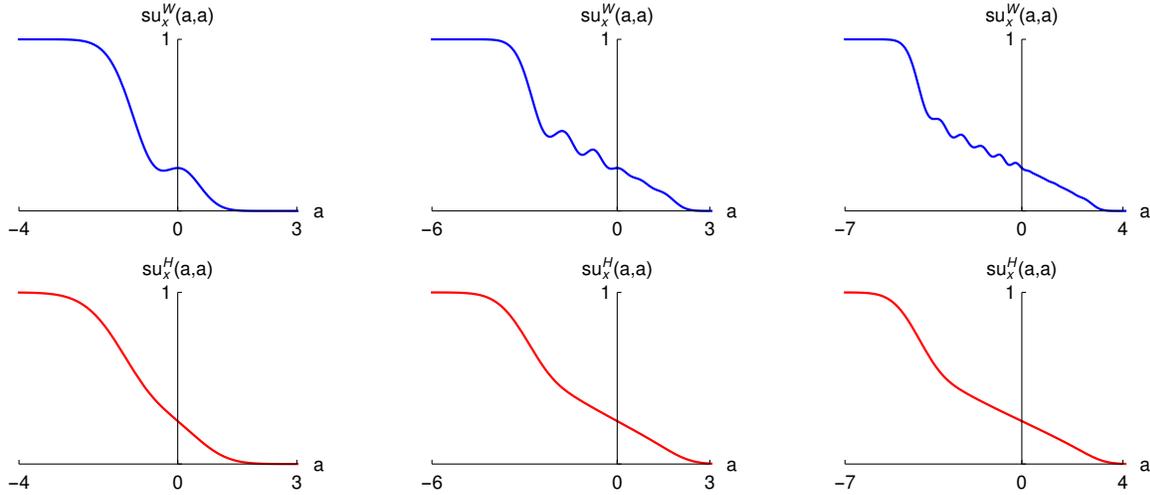


Figura C4: Primera fila: gráficas de funciones survival  $su_x^W(a, a)$  para la función de Wigner. Segunda fila: gráficas de funciones survival  $su_x^H(a, a)$  para la función de Husimi. En espacio de posición con  $\omega = 1$ , para diferentes valores de  $n = 1, 5, 10$  (de izquierda a derecha).

En la **Figura C4** vemos el comportamiento correspondiente a las funciones survival modificadas  $su_x(a, a)$  que están relacionadas con las medidas modificadas  $mJCRE$  y  $mCCRE$ . Además el número total de máximos y mínimos en la región negativa de  $a$  es igual al número cuántico  $n$  que tiene la respectiva función de Wigner. Por lo discutido anteriormente se infiere que las medidas modificadas basadas en densidades acumulativas como  $mJCRE$  y  $mCCRE$  pueden servir como medidas informacionales (de valores reales) que permitan comparar ambas funciones en el espacio fase.

## APÉNDICE C

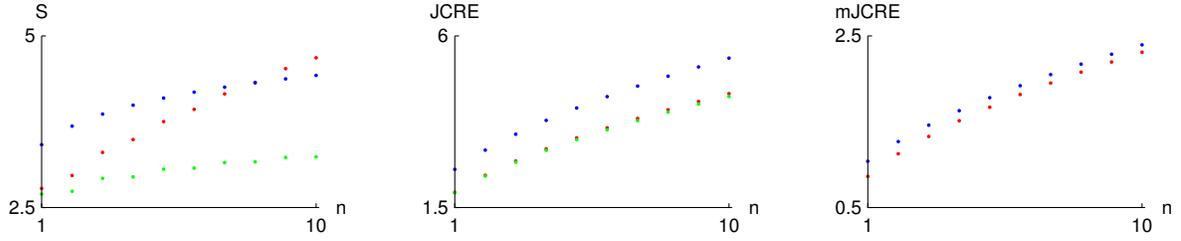


Figura C5: Izquierda: gráficas del valor absoluto de la entropía de Wigner  $|S_W|$  (rojo), parte real de la entropía de Wigner  $\text{Re}[S_W]$  (verde) y la entropía de Husimi  $S_H$  (azul). Centro: gráficas del valor absoluto de la entropía residual acumulativa conjunta de Wigner  $|JCRE_W^x|$  (rojo), parte real de la entropía residual acumulativa conjunta de Wigner  $\text{Re}[JCRE_W^x]$  (verde) y la entropía residual acumulativa conjunta de Husimi  $JCRE_H^x$  (azul). Derecha: gráficas de la entropía residual acumulativa conjunta modificada de Wigner  $mJCRE_W^x$  (rojo) y la entropía residual acumulativa conjunta modificada de Husimi  $mJCRE_H^x$  (azul).

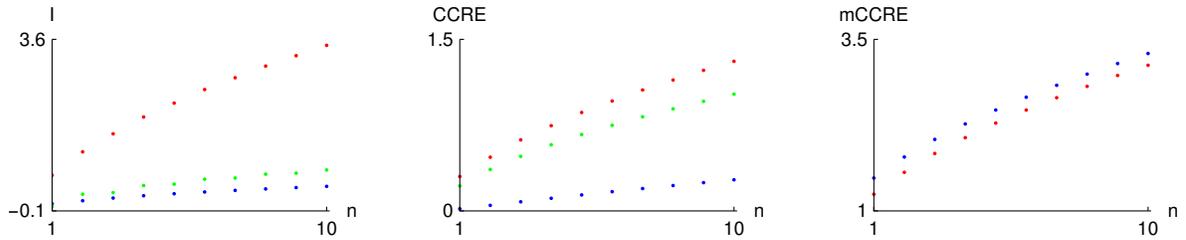


Figura C6: Izquierda: gráficas del valor absoluto de la información de Wigner  $|I_W^{xp}|$  (rojo), parte real de la información de Wigner  $\text{Re}[I_W^{xp}]$  (verde) y la información de Husimi  $I_H^{xp}$  (azul). Centro: gráficas del valor absoluto de la entropía residual acumulativa cruzada de Wigner  $|CCRE_W^x|$  (rojo), parte real de la entropía residual acumulativa cruzada de Wigner  $\text{Re}[CCRE_W^x]$  (verde) y la entropía residual acumulativa cruzada de Husimi  $CCRE_H^x$  (azul). Derecha: gráficas de la entropía residual acumulativa cruzada modificada de Wigner  $mCCRE_W^x$  (rojo) y la entropía residual acumulativa cruzada modificada de Husimi  $mCCRE_H^x$  (azul).

En la **Figura C5** vemos el valor absoluto y las correspondientes componentes reales para las entropías de Wigner y Husimi donde las tendencias son crecientes al aumentar el número cuántico  $n$ . En el caso de la entropía residual acumulativa conjunta de Wigner

$JCRE_W^x$  tanto el valor absoluto como la parte real son casi iguales en magnitud. Es notable observar cómo en el caso de las medidas modificadas  $mJCRE_W^x$  y  $mJCRE_H^x$  parecen estar uniformemente separadas en la misma dirección.

En la **Figura C6** tenemos el valor absoluto y las componentes reales para la información mutua de Wigner y Husimi donde las tendencias son crecientes al aumentar el número cuántico  $n$ . La información mutua de Husimi  $I_H^{xp}$  y la entropía residual acumulativa cruzada de Husimi  $CCRE_H^x$  tienen los valores más bajos al compararse con el valor absoluto y la parte real de la función de Wigner. Es interesante cómo las medidas modificadas  $mCCRE_W^x$  y  $mCCRE_H^x$  también parecen estar uniformemente separadas con la misma tendencia (monótona creciente).

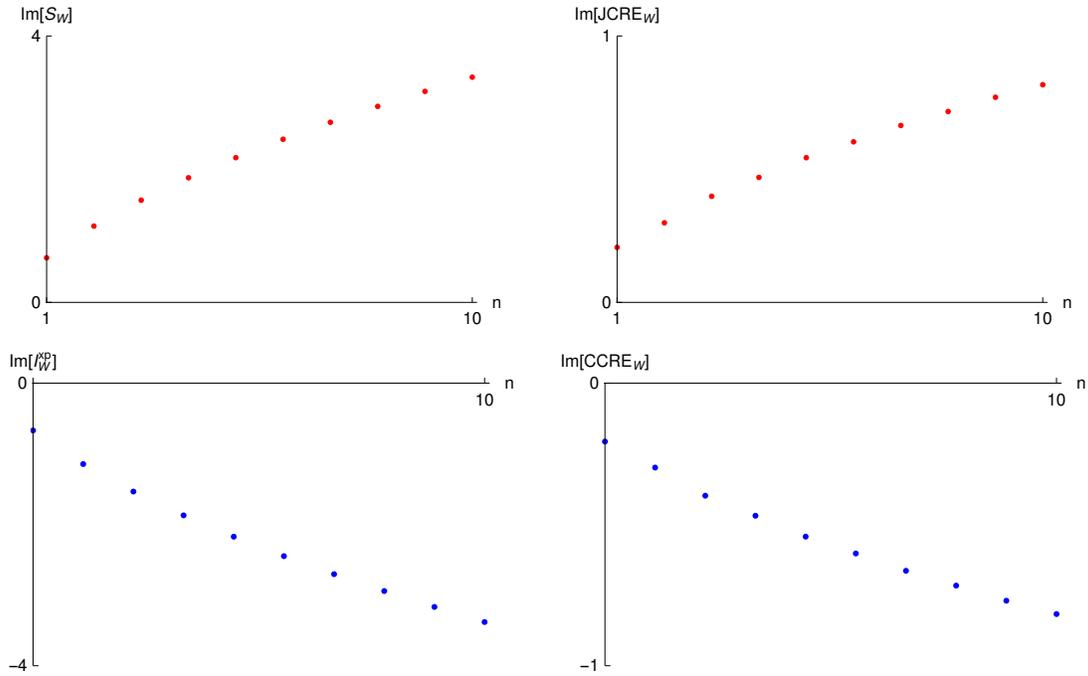


Figura C7: Primera fila: gráficas de la parte imaginaria de la entropía de Wigner  $Im[S_W]$  y de la parte imaginaria de la entropía residual acumulativa conjunta  $Im[JCRE_W]$ . Segunda fila: gráficas de la parte imaginaria de la información mutua de Wigner  $Im[I_W^{xp}]$  y de la parte imaginaria de la entropía residual acumulativa cruzada  $Im[CCRE_W]$ .

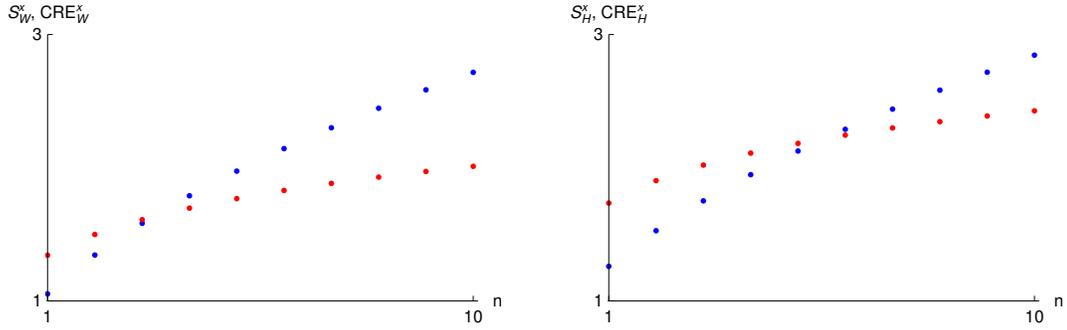


Figura C8: Gráficas de las entropías reducidas de Wigner  $S_W^x$  y de Husimi  $S_H^x$  (rojo). Gráficas de las entropías residuales acumulativas de Wigner  $CRE_W^x$  y de Husimi  $CRE_H^x$  (azul).

En la **Figura C7** tenemos que la parte imaginaria de las medidas informacionales de Wigner  $S_W^x$  y  $I_W^{xp}$  cumplen la condición  $|Im[S_W^x]| = |Im[I_W^{xp}]|$ . Además, en el caso de las medidas basadas en densidades acumulativas se cumple la condición  $|Im[JCRE_W]| = |Im[CCRE_W]|$ .

En la **Figura C8** vemos como la entropía reducida de Wigner y la entropía residual acumulativa de Wigner tienen la misma tendencia creciente. Algo similar se aprecia para la entropía reducida de Husimi y la correspondiente entropía residual acumulativa de Husimi.

En funciones de distribución en espacio fase como Wigner y Husimi se aprecia que las medidas modificadas  $mJCRE$  y  $mCCRE$  que provienen de densidades acumulativas son consistentes para medir la correlación posición-momento evitando la negatividad de la función de Wigner.

# Bibliografía

- [1] M. Moshinsky. How good is the Hartree-Fock approximation. *Am. J. Phys.*, 36:52, 1968. doi: 10.1119/1.1974410.
- [2] J. P. Dahl. Moshinsky atom and density functional theory - a phase space view. *Can. J. Chem.*, 87:784–789, 2009. doi: 10.1139/V09-002.
- [3] C.L. Benavides-Riveros, J.M. Gracia-Bondía, and J. C. Várilly. Lowest excited configuration of harmonium. *Phys. Rev. A*, 86:022525, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.86.022525.
- [4] N.H. March, A. Cabo, F. Claro, and G.G.N. Angilella. Proposed definitions of the correlation energy density from a Hartree-Fock starting point: The two-electron Moshinsky model atom as an exactly solvable model. *Phys. Rev. A*, 77:042504, 2008. doi: 10.1103/PhysRevA.77.042504.
- [5] I. Nagy and J. Pipek. Approximations for the interparticle interaction energy in an exactly solvable two-electron model atom. *Phys. Rev. A*, 81:014501, 2010. doi: 10.1103/PhysRevA.81.014501.
- [6] P.F. Loos. Hooke’s law correlation in two-electron systems. *Phys. Rev. A*, 81:032510, 2010. doi: 10.1103/PhysRevA.81.032510.
- [7] P. A. Bouvrie, A. P. Majtey, A. R. Plastino, M. P. Sánchez, and J. S. Dehesa. Quantum entanglement in exactly soluble atomic models: the Moshinsky model with three electrons, and with two electrons in a uniform magnetic field. *Eur. Phys. J. D*, 66:15, 2012. doi: 10.1140/epjd/e2011-20417-4.
- [8] P. Kościk and A. Okopińska. Correlation effects in the Moshinsky model. *Few-Body Syst*, 54:1637–1640, 2013. doi: 10.1007/s00601-012-0546-4.
- [9] E. Schrödinger. About Heisenberg uncertainty relation. *Preuss. Akad. Wiss. Berlin. Math.Phys.*, 19:296–303, 1930. doi: arXiv:quant-ph/9903100v3.

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [10] W. Kutzelnigg, G. del Re, and G. Bertier. Correlation coefficients for electronic wave functions. *Phys. Rev.*, 172:49–59, 1968. doi: 10.1103/PhysRev.172.49.
- [11] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *Bell Syst. Tech. J.*, 27(3):379–423, 1948. doi: 10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x.
- [12] T. M. Cover and J. A. Thomas. *Elements of Information Theory*. John Wiley and Sons, New York, 1991.
- [13] P. Adriaans and J. van Benthem. *Philosophy of Information*. Elsevier B. V., Oxford, UK., 2008.
- [14] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [15] A. Khinchin. *Mathematical foundations of information theory*. Dover, New York, USA, 1957.
- [16] D. Applebaum. *Probability and information : an integrated approach*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2008.
- [17] S. Kullback. *Information Theory and Statistics*. Dover, Gloucester, UK, 1978.
- [18] Á Nagy and E. Romera. Relation between Fisher measures of information coming from pair distribution functions. *Chem. Phys. Lett.*, 490:242–244, 2010. doi: 10.1016/j.cplett.2010.03.057.
- [19] H. G. Laguna and R. P. Sagar. Shannon entropy of the Wigner function and position-momentum correlation in model systems. *Int. J. Quantum Inf.*, 8:1089–1100, 2010. doi: 10.1142/S0219749910006484.
- [20] M.L. Glasser and I. Nagy. Exact evaluation of entropic quantities in a solvable two-particle model. *Phys. Lett. A*, 377:2317–2319, 2013. doi: 10.1016/j.physleta.2013.07.019.
- [21] H. G. Laguna and R. P. Sagar. Phase-space position-momentum correlation and potentials. *Entropy*, 15:1516–1527, 2013. doi: 10.3390/e15051516.
- [22] F. Pennini and A. Plastino. Localization estimation and global vs. local information measures. *Phys. Lett. A*, 365:263–267, 2007. doi: 10.1016/j.physleta.2007.01.025.
- [23] F. Pennini, A. Plastino, G. L. Ferri, and F. Olivares. Semiclassical localization and uncertainty principle. *Phys. Lett. A*, 372:4870–4873, 2008. doi: 10.1016/j.physleta.2008.05.028.

- 
- [24] F. Pennini, A. Plastino, G. L. Ferri, and F. Olivares. Note on semiclassical uncertainty relations. *Braz. J. Phys.*, 39:503–506, 2009. doi: 10.1590/S0103-97332009000400029.
- [25] B. Mirbach and H. J. Korsch. A generalized entropy measuring quantum localization. *Ann. Phys.*, 265:80–97, 1998. doi: 10.1006/aphy.1997.5775.
- [26] H. Matsuda. Physical nature of higher-order mutual information: Intrinsic correlations and frustration. *Phys. Rev. E*, 62(3):3096–3102, 2000. doi: 10.1103/PhysRevE.62.3096.
- [27] V. S. Yépez, R. P. Sagar, and H. G. Laguna. Higher-order statistical correlations and mutual information among particles in a quantum well. *Few-Body Syst.*, 58:158, 2017. doi: 10.1007/s00601-017-1320-4.
- [28] S. S. Hodgman, R. I. Khakimov, R. J. Lewis-Swan, A. G. Truscott, and K. V. Khurutsyan. Solving the quantum many-body problem via correlations measured with a momentum microscope. *Phys. Rev. Lett.*, 118:240402, 2017. doi: 10.1103/PhysRevLett.118.240402.
- [29] T. Schweigler, V. Kasper, S. Erne, I. Mazets, B. Rauer, F. Cataldini, T. Langen, T. Gasenzer, J. Berges, and J. Schmiedmayer. Experimental characterization of a quantum many-body system via higher-order correlations. *Nature*, 545:323–326, 2017. doi: 10.1038/nature22310.
- [30] E. Lipparini. *Modern Many-Particle Physics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, USA, 2008.
- [31] C. K. Zachos, D. B. Fairlie, and T. L. Curtright. *Quantum mechanics in phase space. An Overview with Selected Papers*. World Scientific Publishing Co., 20050.
- [32] M. Born. Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Zeitschr. Phys.*, 37:863–867, 1926. doi: 10.1007/BF01397477.
- [33] H. P. Robertson. The uncertainty principle. *Phys. Rev.*, 34:163–164, 1929. doi: 10.1103/PhysRev.34.163.
- [34] L. E. Ballentine. The statistical interpretation of quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 42:358–381, 1970. doi: 10.1103/RevModPhys.42.358.
- [35] A. J. Thakkar and V. H. Smith Jr. Statistical electron correlation coefficients for the five lowest states of the heliumlike ions. *Phys. Rev. A*, 23:473, 1981. doi: 10.1103/PhysRevA.23.473.

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [36] P.-O. Löwdin. Quantum theory of many-particle systems. III. Extension of the Hartree-Fock scheme to include degenerate systems and correlation effects. *Phys. Rev.*, 97:1509, 1955. doi: 10.1103/PhysRev.97.1509.
- [37] P.-O. Löwdin. Correlation problem in many-electron quantum mechanics I. Review of different approaches and discussion of some current ideas. *Advan. Chem.*, 2:207, 1958. doi: 10.1002/9780470143483.ch7.
- [38] C. F. Matta and R. J. Gillespie. Understanding and interpreting molecular electron density distributions. *J. Chem. Educ.*, 79:1141, 2002. doi: 10.1021/ed079p1141.
- [39] P. Coppens and A. Volkov. The interplay between experiment and theory in charge-density analysis. *Acta Crystallogr A.*, 60:357–364, 2004. doi: 10.1107/S0108767304014953.
- [40] A. I. Stash and V. G. Tsirelson. Developing WinXPRO: a software for determination of the multipole-model-based properties of crystals. *J. Appl. Crystallogr.*, 47:2086–2089, 2014. doi: 10.1107/S1600576714021566.
- [41] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Observation of interference between two Bose condensates. *Science*, 275:637–641, 1997. doi: 10.1126/science.275.5300.637.
- [42] Y. Castin and J. Dalibard. Relative phase of two Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 55:4330, 1997. doi: 10.1103/PhysRevA.55.4330.
- [43] S. Hofferberth, I. Lesanovsky, B. Fischer, and J. L. Verdú and J. Schmiedmayer. Radiofrequency-dressed-state potentials for neutral atoms. *Nat. Phys.*, 2:710–716, 2006. doi: 10.1038/nphys420.
- [44] E. Weigold. (e,2e) theory and experiment. *Nucl. Phys. A*, 353:327–340, 1981. doi: 10.1016/0375-9474(81)90719-3.
- [45] V. G. Neudatchin, Y.F. Smirnov, A. V. Pavlitchenkov, and V. G. Levin. *Phys. Lett. A*, 66:31, 1977.
- [46] A. Lahmam-Bennani. Recent developments and new trends in (e,2e) and (e,3e) studies. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys*, 2401:837–842, 1991. doi: 10.1088/0953-4075/24/10/001.
- [47] A. Lahmam-Bennani and A. Duguet. Recent advances in (e, 3e) and e,(3-1)e experiments. *Can. J. Phys.*, 74:837–842, 1996. doi: 10.1139/p96-119.

- 
- [48] E. Altman, E. Demler, and M. D. Lukin. Probing many-body states of ultracold atoms via noise correlations. *Phys. Rev. A*, 70:013603, 2004. doi: 10.1103/PhysRevA.70.013603.
- [49] D. Rakshit, J. Mostowski, T. Sowiński, M. Załuska-Kotur, and M. Gajda. On the observability of Pauli crystals in experiments with ultracold trapped Fermi gases. *Sci. Rep.*, 7:15004, 2017. doi: 10.1038/s41598-017-14952-2.
- [50] M. Holten, L. Bayha, K. Subramanian, C. Heintze, P. M. Preiss, and S. Jochim. Observation of Pauli crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 126:020401, 2021. doi: 10.1103/PhysRevLett.126.020401.
- [51] M. Moshinsky, O. Novaro, and A. Calles. The pseudo-atom: A soluble many body problem. *J. Phys. Colloques*, (31):11–12, 1970. doi: 10.1051/jphyscol:1970422.
- [52] A. Gangopadhyaya, J. V. Mallow, and C. Rasinariu. *Supersymmetric Quantum Mechanics An Introduction*. World Scientific Publishing, Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, USA, 2011.
- [53] H. T. Peng and Y. K. Ho. Statistical correlations of the N-particle Moshinsky model. *Entropy*, 17(4):012502, 2015. doi: 10.3390/e17041882.
- [54] C. M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer, New York, USA, 2006.
- [55] A. Kievsky, M. Gattobigio, and E. Garrido. Universality in few-body systems: from few-atoms to few-nucleons. *J. Phys. Conf. Ser.*, 527:012001, 2014. doi: 10.1088/1742-6596/527/1/012001.
- [56] C. H. Schmickler, H.-W. Hammer, and A. G. Volosniev. Universal physics of bound states of a few charged particles. *Phys. Lett. B*, 798:135016, 2019. doi: 10.1016/j.physletb.2019.135016.
- [57] O. Portilho and S. A. Coon. Three-alpha force and the 3- $\alpha$  model of  $^{12}\text{C}$ . *Z. Physik A*, 290:93–105, 1979. doi: 10.1007/BF01408484.
- [58] D. Lee B. N. Lu, T. A. Lähde and U. G. Meißner. Breaking and restoration of rotational symmetry on the lattice for bound state multiplets. *Phys. Rev. D*, 90:034507, 2014. doi: 10.1103/PhysRevD.90.034507.
- [59] N. L. Harshman and A. C. Knapp. Anyons from three-body hard-core interactions in one dimension. *Ann. Phys.*, 412:168003, 2020. doi: 10.1016/j.aop.2019.168003.

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [60] P. Saurabh, P. R. Johnson, and E. Tiesinga. Hubbard model for ultracold bosonic atoms interacting via zero-point-energy induced three-body interactions. *Phys. Rev. A*, 93:4, 2016. doi: 10.1103/PhysRevA.93.043616.
- [61] R. P. Sagar and N. L. Guevara. Relative entropy and atomic structure. *J. Mol. Struct.*, 857:72–77, 2008. doi: 10.1016/j.theochem.2008.02.009.
- [62] P. Glansdorff and I. Prigogine. *Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations*. Wiley-Interscience, London, 1971.
- [63] G. Nicolis and I. Prigogine. *Self-Organization in non-equilibrium systems: from dissipative to order through fluctuations*. Wiley, New York, 1977.
- [64] D. Q. Jiang, M. Qian, and M. P. Qiang. *Mathematical theory of non-equilibrium steady states*. Springer, Berlin, 2003.
- [65] I. Białynicki-Birula and J. Mycielski. Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics. *J. Commun. Math. Phys.*, 44(2):129–132, 1975. doi: 10.1007/BF01608825.
- [66] S. R. Gadre, S. B. Sears, S. J. Chakravorty, and R. D. Bendale. Some novel characteristics of atomic information entropies. *Phys. Rev. A*, 32:2602–2606, 1985. doi: 10.1103/physreva.32.2602.
- [67] W. Beckner. Inequalities in Fourier analysis. *Ann. Math.*, 102(1):159–182, 1975. doi: 10.2307/1970980.
- [68] R. J. Yáñez, W. van Assche, and J. S. Dehesa. Position and momentum information entropies of the D-dimensional harmonic oscillator and hydrogen atom. *Phys. Rev. A*, 50(4):3065–3079, 1994. doi: 10.1103/PhysRevA.50.3065.
- [69] A. Hertz and N. J. Cerf. Continuous-variable entropic uncertainty relations. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 52:173001, 2019. doi: 10.1088/1751-8121/ab03f3.
- [70] N. Flores-Gallegos. On the calculations of Shannon’s entropy in atoms and molecules I: The continuous case in position and momentum spaces. *Chem. Phys. Lett.*, 720:1–6, 2019. doi: 10.1016/j.cplett.2019.01.049.
- [71] M. Rao, Y. Chen, B. C. Vemuri, and F. Wang. Cumulative residual entropy: A new measure of information. *IEEE Trans. Inf. Theory*, 50:1220, 2004. doi: 10.1109/TIT.2004.828057.

- 
- [72] H. G. Laguna and R. P. Sagar. Information theoretical measures from cumulative and survival densities in quantum systems. *Int. J. Quantum Chem.*, 117(15):e25387, 2017. doi: 10.1002/qua.25387.
- [73] R. P. Sagar and N. L. Guevara. Mutual information and electron correlation in momentum space. *J. Chem. Phys.*, 124(13):134101, 2006. doi: 10.1063/1.2180777.
- [74] H. G. Laguna and R. P. Sagar. Statistical correlations in the Moshinsky atom. *Phys. Rev. A*, 84:012502, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.012502.
- [75] W. Li. Mutual information functions versus correlation functions. *J. Stat. Phys.*, 60:823–837, 1990. doi: 10.1007/BF01025996.
- [76] R. P. Sagar and N. L. Guevara. Mutual information and correlation measures in atomic systems. *J. Chem. Phys.*, 123(4):044108, 2005. doi: 10.1063/1.1953327.
- [77] R. P. Sagar, H. G. Laguna, and N. L. Guevara. Conditional entropies and position–momentum correlations in atomic systems. *Mol. Phys.*, 107:2071–2080, 2009. doi: 10.1080/00268970903153675.
- [78] F. Wang and B. C. Vemuri. Non-rigid multi-modal image registration using cross-cumulative residual entropy. *Int. J. Comput. Vis.*, 74:201, 2007. doi: 10.1007/s11263-006-0011-2.
- [79] N. D. Cahill, J. A. Schnabel, J. A. Noble, and D. J. Hawkes. Overlap invariance of cumulative residual entropy measures for multimodal image alignment. *Proc. of SPIE*, 7259:72590I, 2009. doi: 10.1117/12.811585.
- [80] D. Bohm. *Quantum theory*. Dover Publications, Inc., New York, 1989.
- [81] A. Meucci. *Risk and Asset Allocation*. Springer-Verlag, 2005.
- [82] S. J. Fletcher. *Data Assimilation for the Geosciences: From Theory to Application*. Elsevier, 2017.
- [83] R. Christie-David and M. Chaudhry. Coskewness and cokurtosis in futures markets. *J. Empir. Finance*, 8:55–81, 2001. doi: 10.1016/S0927-5398(01)00020-2.
- [84] D. Peña and F. J. Prieto. Multivariate outlier detection and robust covariance matrix estimation. *Technometrics*, 43(3):286–310, 2001. doi: 10.1198/004017001316975899.
- [85] E. Jondeau, E. Jurczenko, and M. Rockinger. Moment component analysis: An illustration with international stock markets. *J. Bus. Econ. Stat.*, 36(4):576–598, 2018. doi: 10.1080/07350015.2016.1216851.

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [86] K. Aditya, H. Kolla, W. P. Kegelmeyer, T. M. Shead, J. Ling, and W. L. Davis IV. Anomaly detection in scientific data using joint statistical moments. *J. Comput. Phys.*, 387:522–538, 2019. doi: 10.1016/j.jcp.2019.03.003.
- [87] G. Arbia, R. Bramante, and S. Facchinetti. Least quartic regression criterion to evaluate systematic risk in the presence of co-skewness and co-kurtosis. *Risks*, 8(95):1–14, 2020. doi: 10.3390/risks8030095.
- [88] S. Kotz, N. Balakrishnan, and N. L. Johnson. *Continuous Multivariate Distributions. Volume 1: Models and Applications*. John Wiley and Sons, 2000.
- [89] S. Panzeri, S. R. Schultz, A. Treves, and E. T. Rolls. Correlations and the encoding of information in the nervous system. *Proc. R. Soc. Lond. B*, 266:1001–1012, 1999. doi: 10.1098/rspb.1999.0736.
- [90] E. Schneidman, W. Bialek, and M. J. Berry. Synergy, redundancy, and independence in population codes. *J. Neurosci.*, 23(37):11539–11553, 2003. doi: 10.1523/JNEUROSCI.23-37-11539.2003.
- [91] P. E. Latham and S. Nirenberg. Synergy, redundancy, and independence in population codes, revisited. *J. Neurosci.*, 25(21):5195–5206, 2005. doi: 10.1523/JNEUROSCI.5319-04.2005.
- [92] M. Beraha, A. B. Metelli, M. Papini, A. Tirinzoni, and M. Restelli. Feature selection via Mutual Information: New theoretical insights. *arXiv*, 1907.07384v1, 2019.
- [93] H. Matsuda. Information theoretic characterization of frustrated systems. *Physica A*, 294(1–2):180–190, 2001. doi: 10.1016/S0378-4371(01)00039-5.
- [94] S. Watanabe. Information theoretical analysis of multivariate correlation. *IBM J. Res. Dev.*, 4(1):66–82, 1960. doi: 10.1147/rd.41.0066.
- [95] T. S. Han. Multiple mutual informations and multiple interactions in frequency data. *Inf. Control*, 46(1):26–45, 1980. doi: 10.1016/S0019-9958(80)90478-7.
- [96] W. J. McGill. Multivariate information transmission. *Psychometrika*, 19(2):97–116, 1954. doi: 10.1007/BF02289159.
- [97] N. J. Cerf and C. Adami. Entropic Bell inequalities. *Phys. Rev. A*, 55(5):3371–3374, 1997. doi: 10.1103/PhysRevA.55.3371.

- 
- [98] B. J. Killian, J. Y. Kravitz, and M. K. Gibson. Extraction of configurational entropy from molecular simulations via an expansion approximation. *J. Chem. Phys.*, 127(2):024107, 2007. doi: 10.1063/1.2746329.
- [99] K. Kladko and P. Fulde. On the properties of cumulant expansions. *Int. J. Quantum Chem.*, 66:377, 1998. doi: 10.1002/(SICI)1097-461X(1998)66:5<377::AID-QUA4>3.0.CO;2-S.
- [100] K. Koizumi, T. Sumikawa, and T. Pavlenko. Measures of multivariate skewness and kurtosis in high-dimensional framework. *J. Math.*, 50:483–511, 2014.
- [101] M. K. Cain, Z. Zhang, and K. H. Yuan. Univariate and multivariate skewness and kurtosis for measuring nonnormality: Prevalence, influence and estimation. *Behav. Res.*, 49:1716–1735, 2017. doi: 10.3758/s13428-016-0814-1.
- [102] S. K. Jakobsen. Mutual information matrices are not always positive semidefinite. *IEEE Trans. Inf. Theory*, 60:2694–2696, 2014. doi: 10.1109/TIT.2014.2311434.
- [103] X. Zhao, P. Shang, and J. Huang. Mutual information matrix analysis for nonlinear interactions of multivariate time series. *Nonlinear Dyn.*, 88:477–487, 2017. doi: 10.1007/s11071-016-3254-7.
- [104] R. Serfling and P. Xiao. A contribution to multivariate L-moments: L-comoment matrices. *J. Multivar. Anal.*, 98:1765–1781, 2007. doi: 10.1016/j.jmva.2007.01.008.
- [105] D. Peña, F. J. Prieto, and J. Viladomat. Eigenvectors of a kurtosis matrix as interesting directions to reveal cluster structure. *J. Multivar. Anal.*, 101:1995–2007, 2010. doi: 10.1016/j.jmva.2010.04.014.
- [106] T. Kolda and B. Bader. Tensor decompositions and applications. *SIAM Review*, 3(51):455–500, 2009. doi: 10.1137/07070111X.
- [107] E. Jondeau and M. Rockinger. Optimal portfolio allocation under higher moments. *Eur. Financial Manag.*, 12(1):29–55, 2006. doi: 10.1111/j.1354-7798.2006.00309.x.
- [108] G. M Athayde and Jr. R. G. Flôres. Finding a maximum skewness portfolio. A general solution to three-moments portfolio choice. *J. Econ. Dyn. Control*, 28(7):1335–1352, 2004. doi: 10.1016/S0165-1889(02)00084-2.
- [109] L. Isserlis. On a formula for the product-moment coefficient of any order of a normal frequency distribution in any number of variables. *Biometrika*, 12(1–2):134–139, 1918. doi: 10.1093/biomet/12.1-2.134.

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [110] P. H. Westfall. Kurtosis as peakedness, 1905 – 2014. R.I.P. *Am. Stat.*, 68(3):191, 2014. doi: 10.1080/00031305.2014.917055.
- [111] M. Gattobigio, A. Kievsky, and M. Viviani. Energy spectra of small bosonic clusters having a large two-body scattering length. *Phys. Rev. A*, 86:042513, 2012. doi: 10.1103/PhysRevA.86.042513.
- [112] J. P. Dahl and M. Springborg. Wigner’s phase space function and atomic structure: I. The hydrogen atom ground state. *Mol. Phys.*, 47:1001–1019, 1982. doi: 10.1080/00268978200100752.
- [113] J. P. Dahl and M. Springborg. Comment on “Wigner phase-space distribution function for the hydrogen atom. *Phys. Rev. A*, 59:4099–4100, 1999. doi: 10.1103/PhysRevA.59.4099.
- [114] M. Springborg and J. P. Dahl. Wigner’s phase-space function and atomic structure: II. Ground states for closed-shell atoms. *Phys. Rev. A*, 36:1050–1062, 1987. doi: 10.1103/PhysRevA.36.1050.
- [115] M. Springborg. Wigner’s phase space function and the bond in LiH. *Theor. Chim. Acta*, 63:349–356, 1983. doi: 10.1007/BF01151612.
- [116] H. Schmider and J. P. Dahl. Nodal structure of the electronic Wigner function of many-electron atoms and molecules. *Int. J. Quantum Chem.*, 60:439–452, 1996. doi: 10.1002/(SICI)1097-461X(1996)60:1;439::AID-QUA43;3.0.CO;2-4.
- [117] A. Khrennikov. *Interpretations of probability*. Walter de Gruyter, Berlin, Germany, 2009.
- [118] S. L. Braunstein P. Van Loock. Quantum information with continuous variables. *Rev. Mod. Phys.*, 77:513, 2005. doi: 10.1103/RevModPhys.77.513.
- [119] M. K Patra and S. L. Braunstein. Quantum Fourier transform, Heisenberg groups and quasi-probability distributions. *New J. Phys.*, 13:063013, 2011. doi: 10.1088/1367-2630/13/6/063013.
- [120] N. J. Cerf, G. Leuchs, and E. S. Polzik. *Quantum information with continuous variables of atoms and light*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., NJ, USA, 2007.
- [121] Z. Van Herstraeten and N. J. Cerf. Quantum Wigner entropy. *Phys. Rev. A*, 104:042211, 2021. doi: 10.1103/PhysRevA.104.042211.

- [122] D. M. Lu. Superposition of photon subtraction and photon addition excited squeezed thermal state and its Wigner function. *Int. J. Theor. Phys.*, 56:3514–3524, 2017. doi: 10.1007/s10773-017-3516-2.
- [123] H. G. Laguna and R. P. Sagar. Quantum uncertainties of the confined harmonic oscillator in position, momentum and phase-space. *Ann. Phys.*, 526:555–566, 2014. doi: 10.1002/andp.201400156.
- [124] K. Husimi. Some formal properties of the density matrix. *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn.*, 22:264–314, 1940. doi: 10.11429/ppmsj1919.22.4.264.
- [125] J. E. Harriman. Some properties of the Husimi function. *J. Chem. Phys.*, 88:6399, 1988. doi: 10.1063/1.454477.
- [126] H. Schmider. *Representations and interpretations of the electronic one-particle density matrix*. Queen’s University, Kingston, Ontario, Canada, 1994.
- [127] E. Colomé, Z. Zhan, and X. Oriols. Comparing Wigner, Husimi and Bohmian distributions: which one is a true probability distribution in phase space? *J. Comput. Electron.*, 14:894–906, 2015. doi: 10.1007/s10825-015-0737-6.
- [128] L. E. Ballentine. *Quantum Mechanics a modern development*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., London, UK, 1998.