



TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

Transiciones de fase cuánticas en un modelo de dos
niveles para la coexistencia átomo-diátomo

Alumno: Ignacio Baena Jiménez

Tutores:

Arias Carrasco, José Miguel
Rodríguez Gallardo, Manuela

Índice

1. Introducción	1
1.1 Fases y transiciones de fase.....	1
1.2 Transiciones de fase clásicas.....	1
1.3 Transiciones de fase cuánticas	4
1.3.1 Incompatibilidad con los conceptos clásicos	4
1.3.2 Redefinición de fase y transición de fase.....	5
2. Modelo de dos niveles.....	7
2.1 Introducción teórica a los operadores del hamiltoniano.....	7
2.2 Hamiltoniano del problema.....	9
2.3 Solución exacta del modelo	10
2.3.1 Energía.....	10
2.3.2 Número de partículas en cada nivel.....	11
2.3.3 IPR	12
2.3.4 Entropía de Rényi	13
2.4 Teoría de Campo Medio.....	15
3. Resultados	20
3.1 Dependencia con N	20
3.2 Dependencia de λc	23
3.3 Teoría de campo medio.....	26
3.4 Entropía.....	31
4. Conclusiones	34
5. Referencias.....	36
6. Apéndices.....	38
6.1 Apéndice A: resolución matricial del problema.....	38
6.2 Apéndice B: autofunciones en el espacio de configuración.....	39
6.3 Apéndice C: Reescritura de la energía en TCM.....	41
6.4 Apéndice D: cálculo de λc	43
6.5 Apéndice E: Códigos de MATLAB	46
6.5.1 Programa principal.....	46
6.5.2 Operadores de creación y destrucción	53
6.5.3 Polinomios de Hermite.....	54
6.5.4 Modelo de campo medio	54

1. Introducción

El objetivo de este proyecto es realizar un estudio sobre las transiciones de fase cuánticas en un modelo de dos niveles. Se trata de describir por mecanismos cuánticos la coexistencia de un gas de átomo-diátomo a temperatura absoluta cero utilizando un modelo de dos niveles que se resolverá con el programa *MATLAB* (apéndice E).

1.1 Fases y transiciones de fase

En un sistema físico, podemos definir fase como aquella en la que el sistema posee unas características uniformes. Por tanto, se puede asociar “fase” con un cierto comportamiento homogéneo del sistema, esto es, no solo su composición química sino su estado físico. Sin embargo, si cambian las condiciones que rodean al sistema de forma adecuada, este comportamiento homogéneo puede cambiar drásticamente. Se dice entonces que tenemos una transición de fase. Nótese que esta definición es deliberadamente ambigua. Es sólo en casos concretos cuando se adquiere cierta rigurosidad. A continuación, particularizamos este concepto para diversos sistemas físicos.

1.2 Transiciones de fase clásicas

En una descripción clásica; por ejemplo, en el caso de estados de agregación de la materia, es sencillo determinar qué es una fase. Las características uniformes vienen dadas por parámetros como la densidad o la capacidad calorífica y las condiciones que rodean al sistema vienen a ser parámetros como la presión y la temperatura. Se define como parámetro o variable de control de una transición de fase como aquella que “controla”, que determina, en qué fase se encuentra el sistema [1].

En este proceso, dada una presión y una temperatura, podemos saber en qué fase nos encontramos. Otros ejemplos de transiciones de fase comunes son los cambios de conductor a superconductor o de paramagnético a ferromagnético. La fase vendría dada por la conductividad y por la imanación espontánea respectivamente y el parámetro de control por la temperatura en ambos casos [2].

Ya que la idea física de una transición de fase es un cambio abrupto en sus propiedades, deberá haber alguna magnitud física, de la que estas dependan, que sufra también un cambio repentino.

Esta es la idea detrás de la teoría de Ehrenfest [3], que explica las transiciones de fase clásicas como reza a continuación.

Las transiciones de fase clásicas son aquellas que ocurren entre dos estados termodinámicos y están gobernadas por una competición entre la energía libre del sistema y la entropía asociada a las fluctuaciones térmicas [4]. Podemos definir entropía desde la mecánica estadística mediante los conceptos de microestado y macroestado [5]. Un microestado es una configuración microscópica de un sistema termodinámico, es decir, un punto su espacio de fases. Por el contrario, un macroestado es una descripción macroscópica, en la que existe al menos una magnitud extensiva, compatible con una ecuación de estado. La entropía se define como una función de estado que caracteriza el número de microestados compatibles con el macroestado de equilibrio. En una descripción termodinámica en la línea de Ehrenfest, la definición de entropía [6] se realiza en base al calor intercambiado en un proceso reversible y en base a la temperatura a la que sucede este intercambio:

$$dS = \left(\frac{dQ}{T} \right)_{\text{proceso reversible}} \quad (1.1)$$

En un sistema clásico, esta competición no existe en el cero absoluto, ya que no hay entropía definida en él.

Paul Ehrenfest clasificó las transiciones de fase clásicas por primera vez introduciendo el concepto de orden de transición, que va ligado al concepto de energía libre de Gibbs. La energía libre de Gibbs, G , es un potencial termodinámico que se puede usar para calcular el trabajo máximo en un proceso reversible isotérmico e isobárico de un sistema. El orden de una transición para Ehrenfest es la derivada de menor orden de la energía libre de Gibbs respecto a una variable termodinámica que presenta discontinuidad. Así, una primera derivada discontinua es indicativo de una transición de primer orden y una derivada discontinua de segundo orden lo es de una transición de segundo orden [7].

En nuestros ejemplos, las transiciones de primer orden serían las dadas por cambios de estado de agregación de la materia, ya que hay cambios discontinuos en la densidad, que tiene que ver con el inverso de la derivada de la energía libre respecto a la presión. Las derivadas primeras relevantes son:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V. \quad (1.2)$$

Para las transiciones de segundo orden estamos hablando de transiciones de fase ferromagnéticas. La primera derivada de la energía libre respecto al campo aplicado es la magnetización, que crece continuamente hasta alcanzar la temperatura de Curie, y decrece para temperaturas superiores. Sin embargo, su segunda derivada presenta una discontinuidad. Sea el calor específico a presión constante C_p , la compresibilidad isotérmica β_T y, el coeficiente de compresibilidad isoterma κ_T , podemos dar expresiones de las segundas derivadas que mencionábamos [6]:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p = -\frac{C_p}{T}, \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P}\right)_p = V \beta_T, \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_T = -V \kappa_T. \quad (1.3)$$

Existe un parámetro introducido por Ehrenfest, llamado parámetro de orden, que se comporta como la energía libre de Gibbs. El parámetro de orden es una medida del grado de orden del sistema. En una transición de fase, normalmente varía entre 0 y un valor distinto de cero [8].

Aunque esta clasificación es muy útil, no sirve para clasificar por completo las transiciones de fase, puesto que no toma en consideración aquellas transiciones en las que la derivada de la energía libre diverge. Esto ocurre con nuestro tercer ejemplo, en las transiciones ferromagnéticas, cuya capacidad calorífica diverge. Este fenómeno también es relevante en transiciones de fase a superconductor, cuya importancia no ha hecho más que aumentar en las últimas décadas. [9]

Una clasificación más moderna distingue entre dos tipos de transiciones, en honor a Ehrenfest, de primer orden o discontinuas y las transiciones continuas.

Las transiciones de primer orden, o discontinuas, son las que involucran un calor latente [6]:

$$L = T \Delta S. \quad (1.4)$$

En estas transiciones el sistema absorbe o emite una cantidad (normalmente grande) de calor por unidad de volumen. Durante este proceso, la temperatura del sistema se mantiene constante y el parámetro de orden cambia discontinuamente en el punto crítico.

En cambio, en las continuas, aparece una discontinuidad en la entropía, por lo que no podemos definir un calor latente [10] y el parámetro de orden cambia continuamente.

1.3 Transiciones de fase cuánticas

Las transiciones de fase cuánticas son aquellas que ocurren a una temperatura absoluta nula. Por lo tanto, las transiciones no ocurren por fluctuaciones térmicas, sino por fluctuaciones cuánticas.

1.3.1 Incompatibilidad con los conceptos clásicos

Ya que la temperatura es nula, no se puede definir un calor latente que nos clasifique la transición. Es más, ni siquiera podemos definir una energía libre que analizar. Como consecuencia, ninguno de los dos criterios de clasificación es aplicable. A lo que sí tenemos acceso es al hamiltoniano cuantizado que describe el sistema. ¿Puede un hamiltoniano describir una transición de fase?

En un problema clásico sencillo como puede ser un vaso de agua que se evapora, el hamiltoniano no puede describir la transición de fase de líquido a vapor. ¿Dónde está la temperatura en un hamiltoniano? Y es que un hamiltoniano no es una energía libre. En cierto modo, un hamiltoniano no es más que un modelo que cuenta interacciones. No obstante, a veces uno puede disfrazar una energía libre de hamiltoniano. Por ejemplo, para un sistema de partículas de posiciones relativas r_{ij} , momentos lineales p_i y cargas eléctricas q_i :

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon r_{ij}}. \quad (1.5)$$

En el vacío $\epsilon = \epsilon_0$, pero en la materia $\epsilon = \epsilon(T)$. En cierto modo, resolver el problema para una permitividad eléctrica está incluyendo la información de la temperatura. Pero esto no siempre (casi nunca) es posible.

Para terminar, estamos obviando el problema más grave: según el tercer principio de la termodinámica, el cero absoluto es inaccesible.

1.3.2 Redefinición de fase y transición de fase

Todo esto quiere decir que las transiciones de fase cuánticas no serían un análogo de las clásicas. Esto no se trata de la cuantización de un problema clásico en el que la temperatura caiga a cero. Si K_B la constante de Boltzmann y \hbar la constante reducida de Planck, lo que sucede es que las fluctuaciones térmicas, del orden de $K_B T$, compiten con las fluctuaciones cuánticas, provenientes del principio de incertidumbre, del orden $\hbar\omega$, donde ω es la frecuencia del oscilador cuántico equivalente [11].

Para temperaturas lo suficientemente bajas, los efectos cuánticos dominan a los termodinámicos y son los responsables del comportamiento del sistema. Se habla entonces de fases y transiciones de fase cuánticas. La teoría es la siguiente: sea un sistema descrito por la cuantización de un hamiltoniano, una transición de fase ocurre cuando hay una discontinuidad en la derivada del hamiltoniano respecto a parámetros del sistema, como pueden ser la presión, el potencial químico o el campo magnético.

Existe un tercer dominio, y sería aquel denominado punto crítico cuántico, en el que las fluctuaciones cuánticas son del orden de las termodinámicas. En este caso la descripción cambia mucho en función de las condiciones del problema concreto y es en general el más complicado. Este tipo de transiciones de fase son útiles en astrofísica, por ejemplo, para la teoría de agujeros negros, o para ciertos resultados de la magnetohidrodinámica relativista.

La idea física que se pretende corroborar en este texto es que, en ausencia de temperatura, un hamiltoniano cuántico describe por completo al sistema físico. Por esto, un cambio abrupto en las propiedades físicas de un sistema va acompañado por discontinuidades en derivadas del hamiltoniano, al igual que ocurría con la energía libre en el caso de transiciones de la física clásica. Esto tiene cierto sentido, ya que en física clásica son los conceptos termodinámicos los que definen las fluctuaciones termodinámicas y es el hamiltoniano cuántico el que nos puede dar información sobre las fluctuaciones cuánticas. Y son unas y otras fluctuaciones en cada caso las responsables del fenómeno de las transiciones de fase.

Esto nos permite redefinir el concepto de fase como aquel delimitado por un subconjunto conexo en el espacio funcional de las magnitudes que dependen de la energía y sus derivadas: llamémoslo espacio energético.

Sea un sistema en un estado A y sea el mismo sistema en un estado B , si existe al menos un proceso en el que puede evolucionar de A a B de forma que las funciones del espacio energético son analíticas, continuas y derivables, se dice que A y B están en la misma fase.

Esta definición delimita un subconjunto conexo por caminos en el que no aparecen cambios de fase. Es decir, delimita una fase. Nótese que en ningún momento hemos pedido que el estado esté dado por variables macroscópicas, conceptos estadísticos o que sea un estado cuántico. Se entiende por estado de un sistema a lo que determina a dicho sistema, y ya esto será una cosa u otra según la rama de la física desde la que se realiza su estudio.

2. Modelo de dos niveles

En física cuántica un sistema de dos niveles (o dos estados) es un sistema que es compatible con una función de onda que se puede escribir como cualquier superposición de dos estados cuánticos independientes y distinguibles físicamente [12].

El ejemplo más común es el de un sistema de partículas de espín $1/2$, por ejemplo, electrones, que interactúan con un campo magnético externo. El estado de este sistema es una combinación lineal de estados con proyección de espín $+1/2$ y proyección de espín $-1/2$.

En esta sección vamos a introducir nuestro modelo de dos niveles desde un punto de vista teórico-práctico. Es decir, vamos a explicar qué operadores, magnitudes y método de resolución vamos a usar.

2.1 Introducción teórica a los operadores del hamiltoniano

En primer lugar, vamos a introducir los operadores de creación y destrucción de bosones. Sean a^\dagger y a dos operadores (uno el conjugado del otro) que cumplen la relación de conmutación $[a, a^\dagger] = 1$. Definamos el problema de autovalores de su producto:

$$a^\dagger a |n_a\rangle = n_a |n_a\rangle, \quad (2.1)$$

donde n_a es el autovalor y $|n_a\rangle$ es el autovector. A partir de su conmutador:

$$[a, a^\dagger]|n_a\rangle = aa^\dagger|n_a\rangle - a^\dagger a|n_a\rangle,$$

$$1 |n_a\rangle = aa^\dagger|n_a\rangle - n_a |n_a\rangle,$$

$$aa^\dagger|n_a\rangle = (n_a + 1)|n_a\rangle. \quad (2.2)$$

Como conclusión, a^\dagger y a cambian el estado cuántico de forma contraria de un autoestado del operador $a^\dagger a$ a otro del mismo operador. Esto es debido a que aplicar ambos operadores en cualquier orden dejan al estado (salvo constante) sin cambiar. Por tanto, hay constantes asociadas a cada operador. Si realizamos unas sencillas comprobaciones, nos damos cuenta de que sólo es consistente que:

$$a^\dagger |n_a\rangle = \sqrt{n_a + 1} |n_a + 1\rangle, \quad (2.3)$$

$$a |n_a\rangle = \sqrt{n_a} |n_a - 1\rangle. \quad (2.4)$$

Es decir, solo así se cumplen las reglas de conmutación y el problema de autovalores. En mecánica cuántica se conoce a a^\dagger como operador de creación de partículas y a como operador de destrucción de partículas. Este nombre se debe a que los autoestados $|n_a\rangle$ son los estados que caracterizan a un sistema de bosones. Estos estados también son los que dan los distintos niveles de energía del oscilador armónico, ya que los estados energéticos del oscilador armónico se pueden escribir como un conjunto de fonones (cuya descripción es bosónica). Sea el hamiltoniano armónico cuantizado:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \quad (2.5)$$

$$\frac{H}{\hbar\omega} = \frac{P^2}{2m\hbar\omega} + \frac{1}{2\hbar}m\omega X^2,$$

$$\frac{H}{\hbar\omega} = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} P \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} P \right) - i \frac{1}{2\hbar} XP + i PX,$$

$$\frac{H}{\hbar\omega} = a^\dagger a - i \frac{1}{2\hbar} [X, P] = a^\dagger a - i \frac{1}{2\hbar} i\hbar = a^\dagger a + \frac{1}{2}.$$

Por tanto,

$$H = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + a^\dagger a \right); \quad (2.6)$$

$$E = \langle n_a | H | n_a \rangle = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n_a \right). \quad (2.7)$$

Por esta razón estos operadores reciben el nombre de operadores en segunda cuantización. No es que estemos cuantizando de nuevo el hamiltoniano clásico, sino que estamos reescribiendo la “primera” cuantización. El operador $a^\dagger a$ será, por tanto, el operador número de partículas. Por último, cabe destacar que existe un estado fundamental sin partículas: el estado vacío $|0\rangle$. Si tratamos de destruir una partícula en un estado en el que no hay ninguna, no obtenemos nada.

$$a |0\rangle = 0, \quad (2.8)$$

Por supuesto, se trata de estados normalizados, y, además, los autovectores correspondientes a autovalores distintos son ortogonales,

$$\langle n_a | n'_a \rangle = \delta_{n_a n'_a}. \quad (2.9)$$

2.2 Hamiltoniano del problema

Suponemos un cierto sistema aislado a temperatura absoluta cero, en el que coexisten átomos y diátomos. Los niveles accesibles por las partículas del sistema serán un nivel de energía inferior y energía ω ocupado por diátomos y un nivel superior de energía ω_0 ocupado por átomos. Esto puede verse en la Fig. 1.

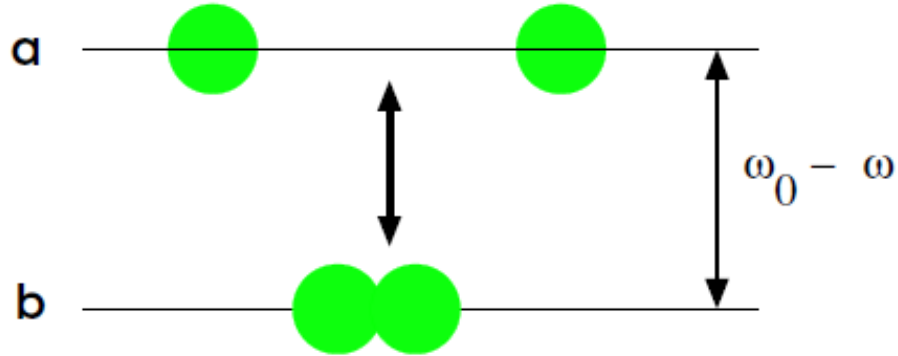


Fig. 1: Diagrama esquemático de un modelo de dos niveles átomo (nivel superior)-diátomo (nivel inferior).

Podemos llamar $\Delta\omega = \omega_0 - \omega$ a la diferencia de energía entre los dos niveles. Estas energías están dadas en unidades arbitrarias. Cabe destacar que no se trataría de, por ejemplo, hidrógeno y helio. En este sistema hay enlace químico, no fusión. Es decir, en este ejemplo, tendríamos hidrógeno monoatómico H , e hidrógeno diatómico H_2 . Vamos a considerar un número par de átomos para que pueda existir un estado en el que todos ellos estén enlazados sin que se quede ninguno sin enlazar.

Si consideramos un sistema de coexistencia átomo-diátomo en el que N es el número total de átomos, libres o en forma molecular, el hamiltoniano que describe el sistema en función de un parámetro de control λ que gobierna la interacción átomo-diátomo es:

$$H = \frac{1}{2} \omega_0 a^\dagger a + \omega b^\dagger b + \frac{\lambda}{\sqrt{2N}} (b^\dagger a a + b a^\dagger a^\dagger). \quad (2.10)$$

Los operadores a^\dagger y a son los operadores de creación y destrucción de átomos y b^\dagger y b de diátomos (diátomo). Ambos operadores son independientes, ya que actúan sobre espacios de partículas distintos. Cabe destacar que la suposición de sistema aislado, hace válida la conservación del número de partículas totales. Como consecuencia, cuando se crea un diátomo, se deben destruir (deben desaparecer) dos átomos. Así mismo, cuando se destruye un diátomo, deben crearse dos átomos. Estos son los términos $b^\dagger a a$ y $b a^\dagger a^\dagger$ respectivamente.

Como vemos, el hamiltoniano puede ser dividido en tres términos,

$$H = H_a + H_b + \lambda H_{ab}. \quad (2.11)$$

H_a y H_b son los términos del hamiltoniano que cuentan la energía debida a la existencia de átomos y diátomos respectivamente. Mientras que λH_{ab} es la parte del hamiltoniano que regula, según el valor de λ , la energía de enlace o rotura de átomo a diátomo.

2.3 Solución exacta del modelo

En esta sección vamos a explicar qué son y cómo se calculan las magnitudes que queremos obtener para estudiar este problema. Estas tendrán distintos valores según el estado cuántico en el que las calculemos, que con los métodos explorados en esta sección puede ser cualquiera. No obstante, es de interés para nosotros calcularlas en el estado fundamental. Esto se debe, no sólo a que la interpretación física de los resultados es inequívoca, sino que además es este estado en el que esperamos que ocurra una transición de fase cuántica.

2.3.1 Energía

Para determinar la energía del sistema, debemos resolver la ecuación de Schrödinger:

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (2.12)$$

que es un problema de autovalores y autovectores. Si bien los estados bosónicos $|n_a\rangle$ son autovectores de H_a y los estados $|n_b\rangle$ son autovectores de H_b , ninguno es autoestado de H_{ab} . Por tanto, para resolver el problema tenemos que pasar a la representación matricial del hamiltoniano y hacer el problema de autovalores y autovectores desde la descripción de Heisenberg de la mecánica cuántica. Para ello, vamos a usar la base dada por el producto directo de estados bosónicos:

$$|n_a\rangle \times |n_b\rangle = |n_a n_b\rangle. \quad (2.13)$$

Esta elección se debe a que es una base completa de todo el espacio y que sabemos cómo actúa el hamiltoniano sobre ella. Los elementos de la matriz del hamiltoniano escritos en cualquier base son:

$$H_{ij} = \langle i|H|j\rangle. \quad (2.14)$$

Donde en este caso $|i\rangle$ y $|j\rangle$ son $|n_a n_b\rangle$ y $|n'_a n'_b\rangle$. Considerando que un condensado de moléculas diatómicas es menos energético que un sistema con todos sus enlaces rotos, la base es el orden creciente de energía:

$$\{|0 (N/2)\rangle, |2 (N/2 - 2)\rangle, |4 (N/2 - 4)\rangle, \dots, |N 0\rangle\}. \quad (2.15)$$

En el apéndice A se desarrolla este procedimiento para un número pequeño de partículas.

Una vez resolvemos matricialmente el problema de autovalores en función de λ , obtenemos los niveles energía $E_n(\lambda)$ asociados a autovectores $|\psi_n\rangle(\lambda)$. Para hacer la construcción de la matriz del hamiltoniano y la posterior diagonalización con la consecuente obtención de autovalores y autovectores, hemos construido un código en MATLAB. Dicho código nos permite obtener todos los autovalores y autovectores en la base que usemos. En particular, nos permite obtener el estado fundamental del sistema, que será el de autovalor menor.

Nótese que usamos el índice n para denotar los autoestados. Como el estado fundamental se corresponde con $n = 0$, habrá $D - 1$ autoestados, donde D es la dimensión de la matriz del hamiltoniano. Esta dimensión es igual a $\binom{N}{2} + 1$. Para N partículas podemos tener de ninguno a $\frac{N}{2}$ diátomos. Contando con el cero, $\binom{N}{2} + 1$. Nótese que como N es un número par, la dimensión está bien definida.

2.3.2 Número de partículas en cada nivel

Otra variable con dependencia en λ de interés será el valor esperado del número de partículas monoatómicas (o diatómicas, da igual, su suma es constante). Se define el valor esperado del operador número de partículas, definido al final de la sección 2.1, como:

$$N_A^{(n)} = \langle \psi_n | a^\dagger a | \psi_n \rangle. \quad (2.16)$$

Una vez más, nos interesa el estado fundamental, $n = 0$. Por simplicidad, definamos en el estado fundamental $N_A^{(0)} \equiv N_A$.

$$N_A = \langle \psi_0 | a^\dagger a | \psi_0 \rangle. \quad (2.17)$$

Esa magnitud se calcula escribiendo el operador que cuenta partículas en forma matricial. Es decir,

$$N_A = \frac{2}{\omega_0} \langle \psi_0 | H_A | \psi_0 \rangle, \quad (2.18)$$

lo cual es simplemente un producto de vectores con una matriz. El autovector del estado fundamental depende de λ , por lo tanto N_A también lo hará.

2.3.3 IPR

Se define IPR, *inverse participation rate*, o coeficiente de participación inversa [13] como:

$$IPR = P^{(k)} = \frac{1}{\sum_i |c_i^{(k)}|^4}. \quad (2.19)$$

Se trata de un concepto que mide la deslocalización del estado cuántico en una base concreta. Los coeficientes $c_i^{(k)}$ son los del desarrollo de dicho estado (indexado con la letra k) en la base en la que está escrito. En nuestro caso son las componentes de los autovectores.

Como sabemos, cualquier estado se puede expresar como combinación lineal de elementos de una base. Si en esta combinación *participa* principalmente sólo uno de los elementos, esto significa que un $c_i^{(k)}$ determinado será muy cercano a la unidad mientras que el resto serán despreciables.

Si ese es el caso:

$$IPR_{min} = \frac{1}{\sum_i |c_i^{(k)}|^4} = \frac{1}{0 + \dots + 1^4 + \dots + 0} = 1. \quad (2.20)$$

Si, por el contrario, el estado cuántico es una contribución equitativa de todos los estados, la condición de normalización $\sum_i |c_i^{(k)}|^2 = 1$ se reescribe de la siguiente forma:

$$\sum_i |c_i^{(k)}|^2 = D |c_i^{(k)}|^2 = 1.$$

Donde recordamos que D era la dimensión de la matriz. Por tanto, despejando,

$$|c_i^{(k)}| = \frac{1}{\sqrt{D}}, \quad (2.21)$$

y el IPR en este caso sería:

$$IPR_{max} = \frac{1}{\sum_i |c_i^{(k)}|^4} = \frac{1}{\sum_i \frac{1}{D^2}} = \frac{1}{D \cdot \frac{1}{D^2}} = D = \frac{N}{2} + 1. \quad (2.22)$$

El IPR será un valor comprendido entre 1 y $\frac{N}{2} + 1$. No tiene por qué llegar a estos valores, depende del problema, pero este es el rango de valores posible.

En nuestro caso, tendremos un $IPR = 1$ si los autovectores del hamiltoniano son los del oscilador armónico, cosa que solo es posible para $\lambda = 0$, porque solo en este caso el hamiltoniano ya es diagonal en la base del oscilador armónico. Para λ lo suficientemente pequeño, habrá un coeficiente muy próximo a la unidad y otros cercanos a cero, que, al elevarlos a la cuarta, se hacen despreciables. Por tanto, para λ pequeño o cero, esperamos que el IPR sea un valor cercano a la unidad o la unidad y se espera que para λ mayor el valor crezca hasta un valor indeterminado.

Este coeficiente puede escribirse para cualquier autovector, así que lo particularizaremos para el estado fundamental, en función de λ .

2.3.4 Entropía de Rényi

En teoría de la información, una entropía cuántica es una medida de la aleatoriedad e incertidumbre de un sistema. Entre las diferentes entropías cuánticas que se pueden definir, vamos a trabajar con la entropía de Rényi por su importancia en el campo [14].

Como recoge el distinguido profesor José C. Príncipe, de la universidad de Florida, Alfred Rényi tenía como objetivo encontrar la definición más general de medición de información. Para ello analizó la entropía que había desarrollado Shannon anteriormente.

Tanto Rényi como Shannon, partieron de la ecuación funcional de Cauchy, que dice que, si consideramos eventos independientes p_1 y p_2 , de probabilidades $I(p_1)$ y $I(p_2)$, la probabilidad

$I(p_1 p_2) = I(p_1)I(p_2)$. Esto es consistente con la entropía de Hartley, que consideró que $I(p) = -\ln p$.

Ahora bien, la información total será el valor esperado de esta variable. Asumamos que tenemos M eventos con probabilidades $P = \{p_1, p_2 \dots p_M\}$. Si $I_k = I(p_k)$,

$$I(P) = \sum_{k=1}^M p_k I_k. \quad (2.23)$$

Esto puede ser definido como la entropía de Shannon. En nuestro caso, estamos sumando sobre una variable continua, la posición, de modo que debemos extender el sumatorio como una integral. La probabilidad estaría dada por el módulo cuadrado de la función de onda. Por tanto, la entropía de Shannon, S es:

$$S = - \int \rho(q) \ln \rho dq, \quad (2.24)$$

donde q representa a las coordenadas generalizadas del problema, en nuestro caso, las posiciones x e y . La densidad de probabilidad está dada por $\rho = \rho_n = |\psi_n(x, y)|^2$. Por tanto,

$$S = \iint |\psi_n(x, y)|^2 \ln |\psi_n(x, y)|^2 dx dy. \quad (2.25)$$

Sin embargo, Rényi, razonó que había una suposición implícita en la ecuación de Shannon, y es que usa la media lineal, $\sum_{k=1}^M p_k I_k$, la cual no es la única posibilidad. En la teoría, la información debería cumplir una propiedad matemática que implica que existe una función g invertible tal que:

$$I(P) = g^{-1} \left(\sum_{k=1}^M p_k g(I_k) \right). \quad (2.26)$$

Lo cual tiene dos soluciones:

$$g(x) = c x, \quad (2.27)$$

$$g(x) = c^{-2(1-\alpha)x}. \quad (2.28)$$

La primera, la ecuación (2.27), lleva a la forma lineal de Shannon mientras que la segunda, (2.28) nos conduce a:

$$I_\alpha(P) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(\sum_{k=1}^M p_k^\alpha \right), \quad (2.29)$$

para α positivo y distinto de la unidad. Haciendo el mismo paso a la integral, obtenemos la expresión para la entropía de Rényi [15]:

$$R^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \int \rho^\alpha(q) dq \quad \forall \alpha \in [0,1) \cup (1, \infty). \quad (2.30)$$

En nuestro problema, esto se traduce a:

$$R_n^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \iint |\psi_n(x, y)|^{2\alpha} dx dy \quad \forall \alpha \in [0,1) \cup (1, \infty). \quad (2.31)$$

Para resolver la integral, debemos calcular la representación en el espacio de configuración de los autovectores que vienen de resolver la ecuación de Schrödinger. Para pasar de un vector a una función dependiente de las coordenadas espaciales, vamos a escribir esta ψ como combinación lineal de autofunciones del oscilador armónico.

En el apéndice B detallamos cómo podemos hacer esto con los cálculos y explicaciones pertinentes. En resumidas cuentas, nuestra matriz estaba escrita en la base del oscilador armónico. Por tanto, la matriz de cambio de base que nos lleva de la base del oscilador armónico a la base propia, (la que diagonaliza al hamiltoniano), será la de autovectores puestos por columnas. Es la matriz que hemos calculado con MATLAB. Por tanto, las autofunciones del hamiltoniano son una combinación lineal de autofunciones del oscilador armónico (que sabemos cómo son en el espacio de configuración) y los coeficientes de esta combinación lineal son las componentes de los autovectores. Es decir,

$$\psi_0(x, y) = \sum_{n_a} \sum_{n_b} C_{n_a n_b} \mathcal{N}_{n_a} H_{n_a}(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \mathcal{N}_{n_b} H_{n_b}(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right). \quad (2.32)$$

Solo quedaría sustituir esta expresión en la entropía de Rényi para calcularla y resolver la integral aplicando los métodos correspondientes en MATLAB.

2.4 Teoría de Campo Medio

En teoría de campo medio (TCM) se estudia el comportamiento de modelos estocásticos de un número elevado de grados de libertad. Para ello, resuelve un modelo más simple que el original en el que se reducen los grados de libertad. En la TCM, el efecto de cada uno de los elementos de un sistema es sustituido por la media de sus efectos. Pasaríamos de un problema de muchos cuerpos a un problema reducido, normalmente de 1 cuerpo o 2.

Modelar nuestro problema con la teoría de campo medio nos permite, reescribiendo el hamiltoniano, aproximar nuestro problema por dos osciladores armónicos. En el apéndice C está realizado el cálculo pertinente con más detalle. La idea fundamental es reescribir el hamiltoniano de forma que podamos tener términos del estilo del oscilador armónico con resultados aproximables para N grande. En primer lugar, definimos los siguientes operadores:

$$K_+ \equiv \frac{1}{2} a^\dagger a^\dagger, \quad (2.33)$$

$$K_- \equiv \frac{1}{2} aa, \quad (2.34)$$

$$K_0 \equiv \frac{1}{2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (2.35)$$

Introducimos también las relaciones de Holstein-Primakoff. Estas son:

$$K_+ = C^\dagger \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2}, \quad (2.36)$$

$$K_- = \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2} C, \quad (2.37)$$

$$K_0 = C^\dagger C + \frac{1}{4}. \quad (2.38)$$

Con estos cambios, y las reglas de conmutación demostradas en el apéndice C, obtenemos el hamiltoniano escrito de la siguiente forma:

$$H = \omega_0 C^\dagger C + \omega b^\dagger b + \sqrt{\frac{2}{N}} \lambda \left(\left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2} b^\dagger C + b C^\dagger \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2} \right). \quad (2.39)$$

Como hacíamos en el caso del oscilador armónico, vamos a pasar al espacio de posiciones y momentos (adimensionales). Sean (x, p) posiciones y momentos de átomos libres y (y, q) los correspondientes a moléculas diatómicas:

$$\begin{aligned} C &= \sqrt{N} \frac{x + ip}{\sqrt{2}}, & C^\dagger &= \sqrt{N} \frac{x - ip}{\sqrt{2}}, \\ b &= \sqrt{N} \frac{y + iq}{\sqrt{2}}, & b^\dagger &= \sqrt{N} \frac{y - iq}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Por tanto, el hamiltoniano quedaría como:

$$H = H_0 + H_{int}^{(1)} + H_{int}^{(2)}. \quad (2.41)$$

Donde estos operadores son:

$$H_0 = \omega_0 \frac{N}{2} (x^2 + p^2) + \omega \frac{N}{2} (y^2 + q^2), \quad (2.42)$$

$$H_{int}^{(1)} = \sqrt{\frac{N}{2}} \lambda \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{N}{2} (x^2 + p^2)} (xy + pq + ipy - iqx), \quad (2.43)$$

$$H_{int}^{(2)} = \sqrt{\frac{N}{2}} \lambda (xy + pq - ipy + iqx) \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{N}{2} (x^2 + p^2)}. \quad (2.44)$$

Ahora bien. Nuestra idea es que la descripción cuántica tiende a la clásica para un número elevado de partículas. Es fácil ver en este supuesto que el término en (2.43) y (2.44) de $\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{N}{2} (x^2 + p^2)} \approx \sqrt{\frac{N}{2} (x^2 + p^2)}$. Siendo esto igual para un número infinito de partículas.

Con esta aproximación, podemos dividir por el número de partículas. Sean las cantidades por partículas las dadas por (2.45):

$$h = \frac{H}{N}, \quad h_0 = \frac{H_0}{N}. \quad (2.45)$$

Podemos escribir la ecuación (2.41) dividida por el número de partículas como:

$$h = h_0 + \frac{\lambda}{2} \left(\sqrt{x^2 + p^2} (xy + pq + ipy - iqx) + (xy + pq - ipy + iqx) \sqrt{x^2 + p^2} \right). \quad (2.46)$$

Si bien cuánticamente no podemos conseguir energía igual a cero, podemos ver qué ocurre cuando no hay energía cinética y todo es energía potencial, es decir, sea $V(x, y) = \lim_{p, q \rightarrow 0} h(p, q)$,

$$V(x, y) = \frac{\omega_0}{2} x^2 + \frac{\omega}{2} y^2 + \lambda x^2 y. \quad (2.47)$$

Además, el operador que nos cuenta partículas, $a^\dagger a + 2b^\dagger b$ escrito con las mismas relaciones y dividido por el número de partículas totales N da como resultado:

$$x^2 + p^2 + y^2 + q^2 = 1. \quad (2.48)$$

Esta es una condición de conservación de la energía asociada a la conservación de las partículas. En nuestro caso de límite a energía potencial, $x^2 + y^2 = 1$. Es decir, podemos hacer un cambio de variables a polares.

$$V(\theta) = \frac{\omega}{2} + \frac{\omega_0 - \omega}{2} \cos^2 \theta + \lambda \cos^2 \theta \sin \theta. \quad (2.49)$$

Si derivamos respecto a θ y calculamos los mínimos de energía, obtenemos que según los valores de λ , habrá un valor mínimo posible distinto. Como está demostrado en el apéndice D, el λ a partir del cual podemos encontrar un valor de mínimos de energía distinto será el valor crítico:

$$\lambda_c = \frac{\omega_0 - \omega}{2}. \quad (2.50)$$

Por tanto, la energía mínima en función de λ es:

$$V_c(\lambda) = \frac{\omega}{2} + (\lambda_c + \lambda \sin \theta_c) \cos^2 \theta_c. \quad (2.51)$$

Donde,

$$\theta_c(\lambda) = \begin{cases} (2k+1)\frac{\pi}{2} \quad \forall k \in \mathbb{Z} & \text{para } \lambda \leq \lambda_c \\ \arcsen\left(\frac{-\Delta\omega \pm \sqrt{(\Delta\omega)^2 + 12\lambda^2}}{6\lambda}\right) & \text{para } \lambda > \lambda_c \end{cases} \quad (2.52)$$

La fracción de partículas monoatómicas es $x = \cos \theta$. En el estado fundamental será $x = \cos \theta_c$. Es decir,

$$x_c(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{para } \lambda \leq \lambda_c \\ \cos\left(\arcsen\left(\frac{-\Delta\omega \pm \sqrt{(\Delta\omega)^2 + 12\lambda^2}}{6\lambda}\right)\right) & \text{para } \lambda > \lambda_c \end{cases} \quad (2.53)$$

Podemos saber qué transición de fase tendríamos según la teoría de campo medio. Para ello, vamos a usar $\lambda_c = 0.5$. Para distinguir el orden de transición, lo que debemos hacer es calcular la primera y la segunda derivada de la energía y estudiar su continuidad. En la figura 2, representamos el valor de la primera derivada de la ecuación (2.51) frente a λ .

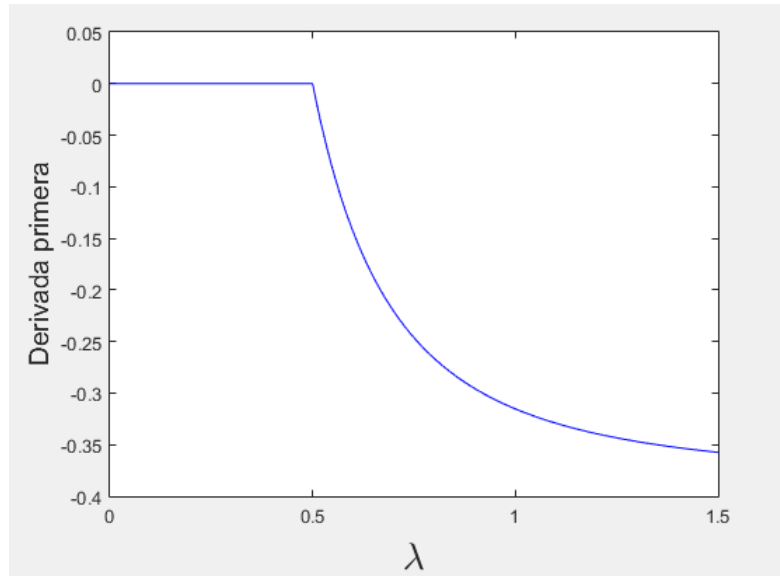


Fig. 2. Primera derivada de la energía mínima frente a λ para $\lambda_c = 0.5$.

No existe ninguna discontinuidad en la primera derivada. Por lo tanto, no debe ser una transición de primer orden. Pasamos a representar frente a λ la segunda derivada en la figura 3.

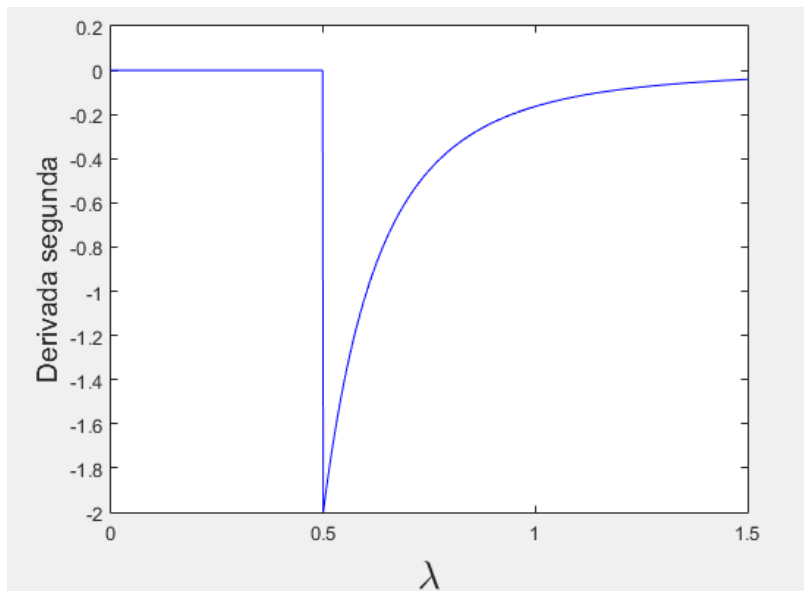


Fig. 3. Segunda derivada de la energía mínima frente a λ para $\lambda_c = 0.5$.

Como aparece una discontinuidad en la segunda derivada, se trata de una transición de segundo orden.

3. Resultados

Si este hamiltoniano puede modelar un sistema cuántico en el que hay una transición de fase, las magnitudes que hemos ido definiendo, deberían sufrir cambios drásticos a partir de ciertos valores del parámetro λ .

Sin embargo, λ no es lo único que afecta al valor de estas magnitudes. Tenemos otras variables como el número de partículas N , que era importante en la deducción de λ_c , y el valor de ω y ω_0 . Para analizar los resultados, vamos a fijar el valor de ω y ω_0 , lo cual nos da un valor crítico del parámetro de control, λ_c si lo que acabamos de demostrar teóricamente es correcto. Estudiaremos el valor de las magnitudes definidas anteriormente en función de λ para distintos valores de N . Luego, para un valor “apropiado” de N (veremos qué significa esto), probaremos a cambiar el valor crítico λ_c cambiando los valores de ω y ω_0 . A partir de ahí concluiremos si los resultados son consistentes con la teoría.

3.1 Dependencia con N

En esta sección vamos a establecer $\omega = 1$ y $\omega_0 = 2$ y, por tanto, $\lambda_c = (\omega_0 - \omega)/2 = 0.5$.

En la figura 4, vamos a representar la energía del estado fundamental frente a λ para distintos N , desde un valor bajo a un valor alto.

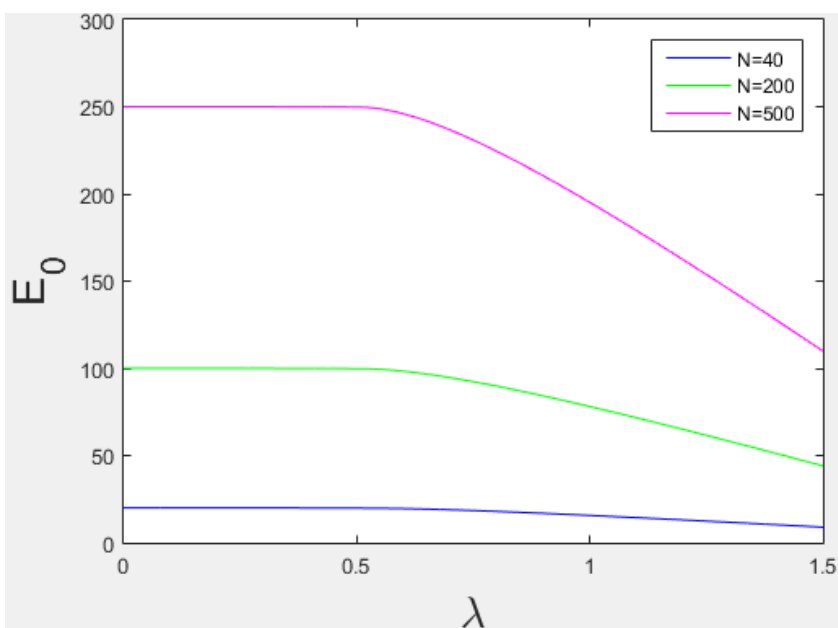


Fig. 4: Energía del estado fundamental E_0 frente a λ para $\lambda_c = 0.5$.

Como cabía esperar, tenemos más energía cuantas más partículas hay. Además, efectivamente se observa que la energía sufre un cambio brusco a partir del valor que esperábamos de λ_c . Mientras más partículas tenemos, más pronunciado es el cambio en la energía fundamental.

En la figura 5, vamos a hacer lo mismo con el valor esperado del número de átomos libres. Es decir, vamos a representar N_A en frente a λ .

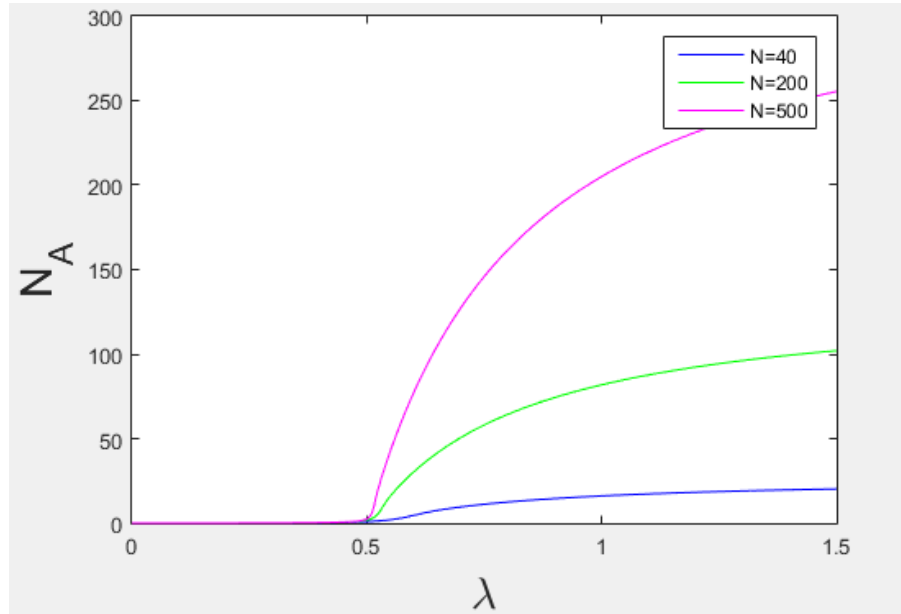


Fig. 5: Valor medio de N_A frente a λ para $\lambda_c = 0.5$.

Este valor es cero o prácticamente cero cuando el sistema se encuentra en una fase y su número se dispara hasta alcanzar el equilibrio con el número de moléculas diatómicas, a cuyo valor medio podemos llamarle (siendo coherentes con la notación) N_B . Y es que el valor de N_A tiende a ser dos tercios de N , mientras que N_B tiende a ser un tercio del mismo número. Esto es visible en la figura 6 si representamos hasta λ mayores el valor de N_A por partícula (fracción de átomos libres) para N grande ($N = 500$).

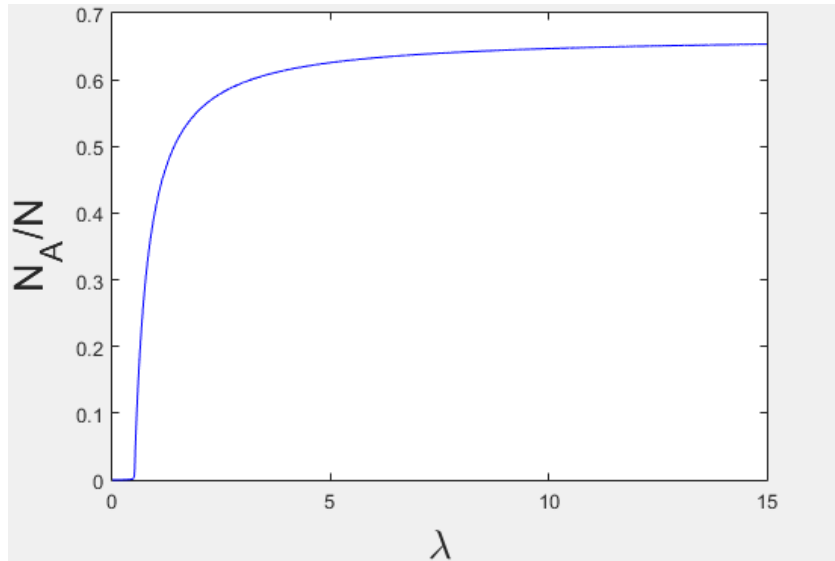


Fig. 6: Valor medio de N_A/N frente a λ , para $\lambda_c = 0.5$ y $N = 500$.

Como conclusión, habría el mismo número de núcleos sin enlazar, que enlazados. Una vez analizados los observables fundamentales, energía y valor medio de átomos libres N_A , vamos a analizar otra magnitud que esperamos que nos pueda marcar la presencia de una transición de fase. Vamos a continuar con el IPR, que definimos en la sección (2.3.3). Se recuerda al lector que se trata de un valor que pide la polarización de un estado, en este caso el fundamental, en la base. En la figura 7 se representa el IPR para el estado fundamental del sistema frente al parámetro de control, λ .

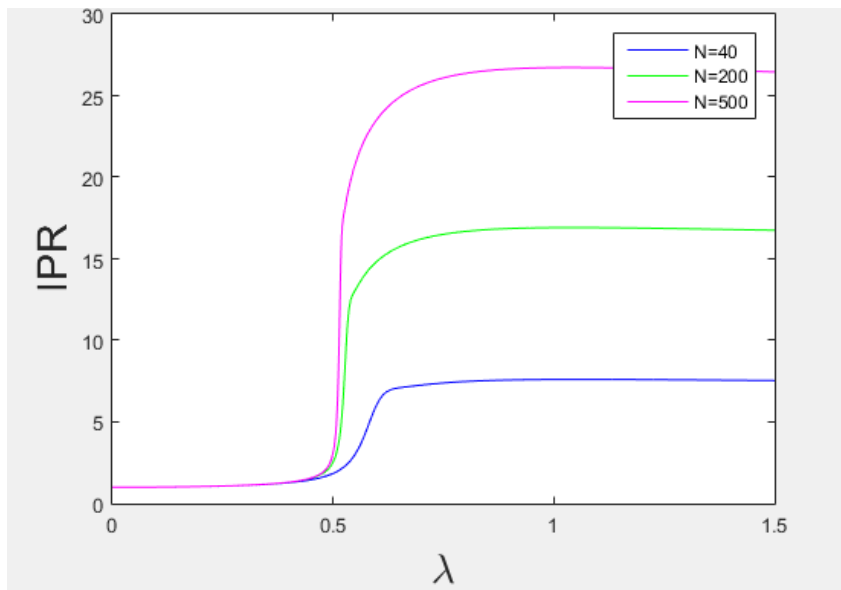


Fig. 7: IPR frente a λ para $\lambda_c = 0.5$.

Como preveíamos, el IPR comienza siendo cercano a la unidad, y crece drásticamente hasta saturar en un valor. Sin embargo, este no es el valor máximo que podría alcanzar. Esto es indicativo de que el sistema parte del equilibrio en el estado es el de más baja energía del oscilador armónico, y llega a otro estado de equilibrio que es una combinación de varios autoestados del hamiltoniano.

A la vista de estos resultados, cuando λ es lo suficientemente pequeño, tenemos un condensado de bosones diatómicos. Por tanto, el número de átomos libres N_A es prácticamente cero y el estado cuántico tiene pocas contribuciones de la base. Realmente sólo una significativa, la del estado $|0 N/2 \rangle$ que es un estado compatible con 100% de diátomo.

A partir del valor crítico de λ , que en este caso es 0.5, la energía del cambio de átomo-diátomo se hace relevante. Entonces, el número de átomos libres aumenta (creándose una mezcla átomo-diátomo), la energía disminuye y contribuyen los estados compatibles con la mezcla. Entonces, se tiende a un valor constante de átomos y del IPR. Estamos entonces en el caso de coexistencia átomo-diátomo en equilibrio.

Este estado de equilibrio en coexistencia será combinación de un número de autoestados del hamiltoniano en el que podamos encontrar valores los números de partículas que corresponden. Es por esto que el IPR no llega a su valor máximo, pero sí satura.

3.2 Dependencia de λ_c

Una vez hemos comprobado la dependencia con N , vamos a hacer uso de una magnitud más significativa del sistema, la energía del estado fundamental por partícula.

Veamos si el valor de λ_c es consistente con lo predicho en la teoría. Vamos a darle varios valores a ω_0 y ω . Siempre respetando que $\omega_0 > \omega$, ya que es la forma en la que los dos niveles energéticos están definidos. Como el modelo que nos predice λ_c funciona mejor para un número grande de partículas, vamos a representar las magnitudes anteriores para distintos valores de $\omega_0 - \omega$, con N constante y grande, 700 partículas, por ejemplo. Usamos unos valores recogidos en la Tabla 1.

ω_0	ω	λ_c
2	1	0,5
4	2	1
5,5	2,5	1,5

Tabla 1: Valores de las energías del modelo de dos niveles y su λ_c correspondiente

Los colores que se recogen en la tabla 1 son representativos de los colores de las curvas de cada representación gráfica de esta sección.

Para la energía del estado fundamental, en la Fig. 8 se representan los distintos valores de las energías para aquellos valores de los dos niveles dados por la tabla 1.

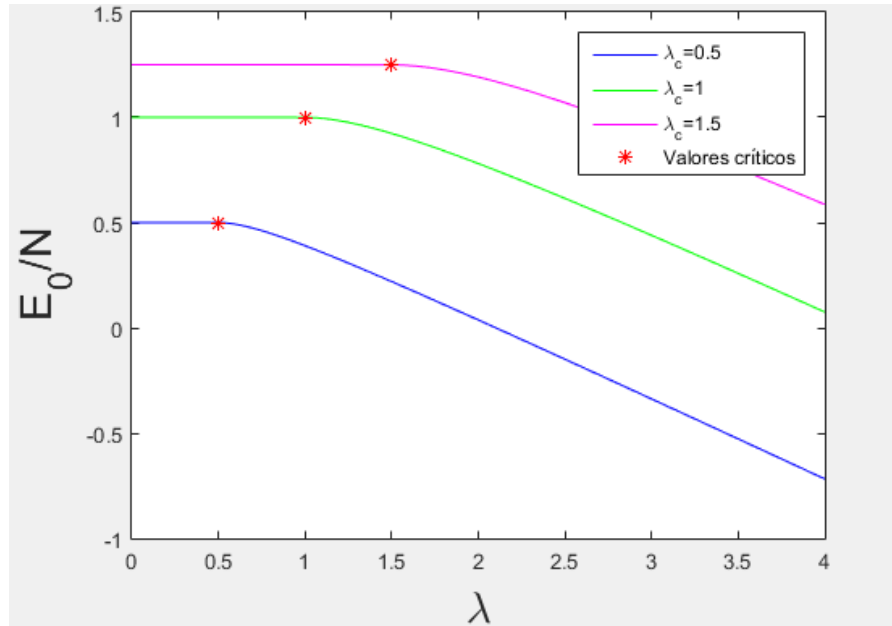


Fig. 8: E_0/N frente a λ para $N = 700$ y los valores de λ_c de la Tabla 1.

Están marcados con asteriscos los valores correspondientes a λ_c señalados en la tabla 1, para que sea apreciable que, efectivamente, el valor crítico λ_c va cambiando de la forma predicha. Además, la energía para $\lambda < \lambda_c$ es distinta para cada curva.

Esto se corresponde de una forma razonablemente buena con la expresión aproximada dada por la ecuación (2.51) en el modelo de la teoría de campo medio:

Si $\lambda < \lambda_c$, entonces $(\lambda_c + \lambda \sin \theta_c) > 0$, al igual que $\cos^2 \theta_c \geq 0$. En ese caso, la energía mínima es $\omega/2$. Es decir, el coseno se anula, como ya hemos discutido. Efectivamente, mirando la tabla 1, $\omega/2$ valdría 0.5, 1 y 1.25. Una vez $\lambda > \lambda_c$, entramos en los valores ya comentados de θ_c que hacen disminuir la energía.

En la figura 9 se presenta el comportamiento de la fracción de átomos frente a λ para distintas energías de separación entre los dos niveles del sistema.

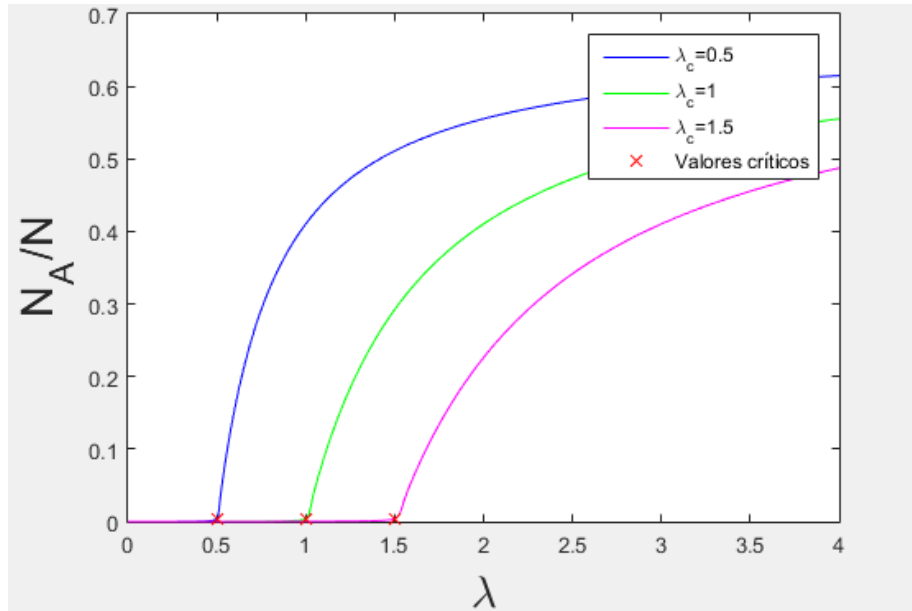


Fig. 9: N_A/N para para $N = 700$ y los valores de λ_c de la Tabla 1.

El valor de N_A/N sigue la tendencia prevista, y efectivamente el valor de λ en el que cambia drásticamente su valor concuerda con los de λ_c de la tabla 1. Como ocurre con la energía, también se ajusta a su ecuación predicha por el modelo de campo medio, (2.52). La fracción de partículas monoatómicas vale cero para un parámetro de orden menor que el crítico y, al superarlo, aumenta hasta aplanarse en un valor.

Por último, podemos representar el IPR para estos valores de las energías en unidades arbitrarias y comprobar si es consistente con lo obtenido para el resto de magnitudes. Lo vemos en la figura 10.

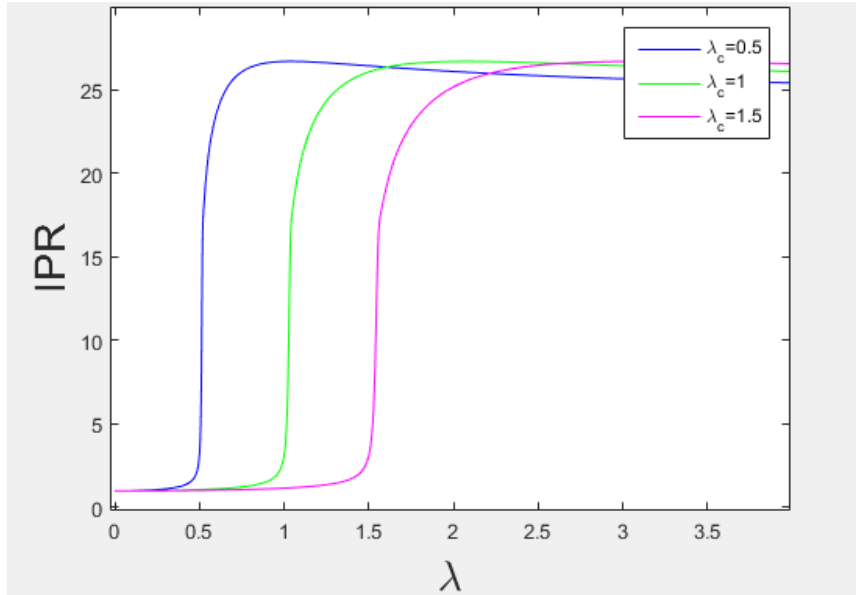


Fig. 10: IPR para $N = 700$ y los valores de λ_c de la Tabla 1.

En dicha figura observamos que, al cambiar el equilibrio de energías, cambia λ_c , sin embargo, el comportamiento a izquierda y derecha es el mismo. Partimos de una fase de condensado de diátomos con una sola contribución de la base y acabamos en una fase de coexistencia con las contribuciones que son adecuadas para mantener el equilibrio.

Analizando estos resultados, podemos comprobar que efectivamente el valor crítico del parámetro de control es consistente con la expresión que hemos deducido para un número grande de partículas. Por tanto, queda bien definido λ_c .

3.3 Teoría de campo medio

Si representamos por partícula tanto la energía del estado fundamental como el valor esperado de átomos libres para distintos valores de N , obtenemos prácticamente la misma curva, aunque sí es cierto que existen pequeñas diferencias, como vemos en las figuras 11 y 12.

La aproximación de campo medio es válida para un número infinito de partículas. Se espera, por tanto, que pueda funcionar cuando su número es grande y que haya diferencias considerables cuando tengamos pocas. Si representamos $V_c(\lambda)$, la energía mínima en función de los valores de λ , y $x(\lambda)$ podemos comparar los resultados del problema exacto con el modelo de campo medio.

En primer lugar, vamos a visualizar en la figura 11 la energía por partícula para valores de N grande, N pequeño y lo vamos a comparar con el valor del modelo de campo medio.

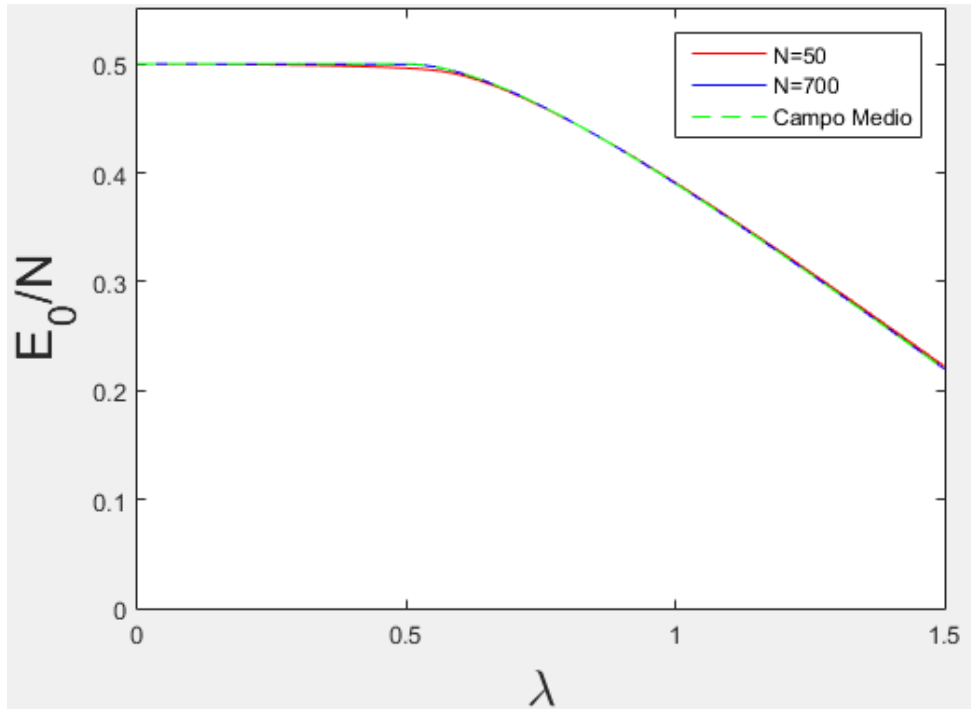


Fig. 11: E_0/N frente a λ para valores extremales de N y $\lambda_c = 0.5$.

Además, vamos a hacer lo mismo con la fracción de partículas libres en la figura 12. Comentaremos ambas figuras conjuntamente, debido a que manifiestan el mismo comportamiento.

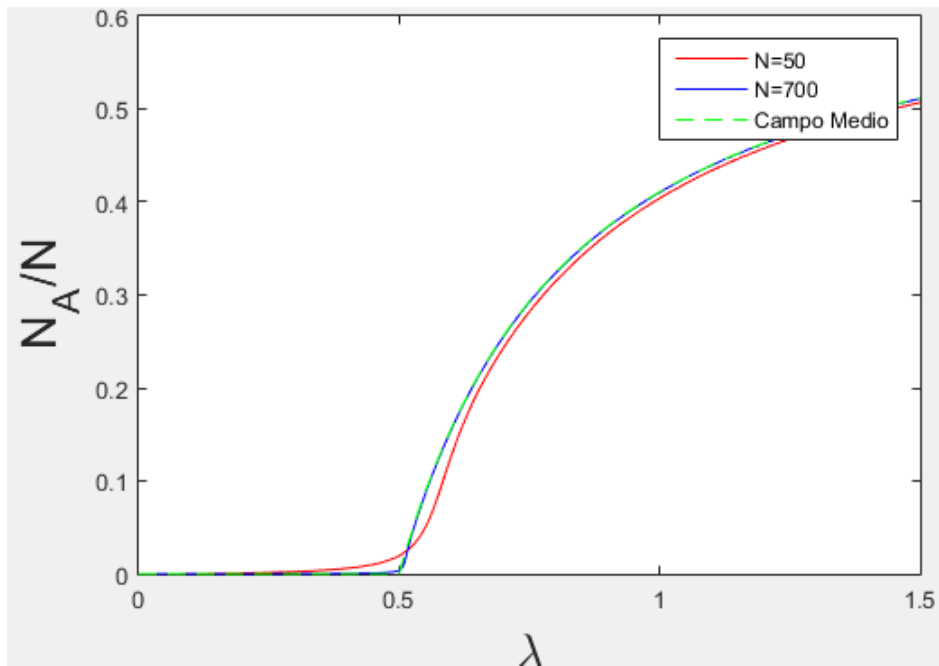


Fig. 12: N_A/N frente a λ para valores extremales de N y $\lambda_c = 0.5$.

En las gráficas 11 y 12 confirmamos que para N pequeño existen notables diferencias con el modelo del campo medio, mientras que para N más grande, estas apenas son apreciables a esta escala. Cabe destacar que es cerca del punto crítico, donde hay una singularidad en el comportamiento, donde se aprecian más diferencias con el modelo de campo medio. Al fin y al cabo, estamos modelando un comportamiento con discontinuidades (derivadas infinitas) en un problema que tiene solución exacta. No existe una transición de fase en el universo que ocurra a velocidad infinita ni existe un número infinito de partículas.

Una buena medida de la validez de la aproximación de campo medio es representar lo que difieren ambas curvas para distintos valores de N . Para medir de alguna manera esta magnitud, vamos a calcular el error relativo término a término para cada valor de λ entre los puntos obtenidos resolviendo el problema exacto y lo predicho en el modelo de campo medio. Los datos obtenidos resolviendo el problema de forma exacta son los valores reales y los datos obtenidos por el modelo de campo medio son los aproximados. Cabe destacar que este error relativo depende de cuántos puntos representemos en la gráfica, no es universal, pero es una buena medida comparativa entre valores del número de partículas.

$$\epsilon(\lambda) (\%) = \frac{|\text{campo medio}(\lambda) - \text{cálculo exacto}(\lambda)|}{\text{cálculo exacto}(\lambda)} \cdot 100\%, \quad (3.1)$$

donde *campo medio* y *cálculo exacto* son dos vectores cuyas componentes se corresponden con distintos valores de λ . Por tanto, un error por cada valor de λ . Su media será el error relativo:

$$\epsilon(\%) = \frac{1}{\lambda_{max}} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \epsilon(\lambda) = \frac{1}{\lambda_{max}} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} \frac{|\text{campo medio}(\lambda) - \text{cálculo exacto}(\lambda)|}{\text{cálculo exacto}(\lambda)} \cdot 100\%. \quad (3.2)$$

Si representamos la magnitud definida en (3.2) frente a valores de N discretos, obtenemos la figura 13. A partir de ella, podemos comprobar si las diferencias entre el valor de campo medio van disminuyendo con N .

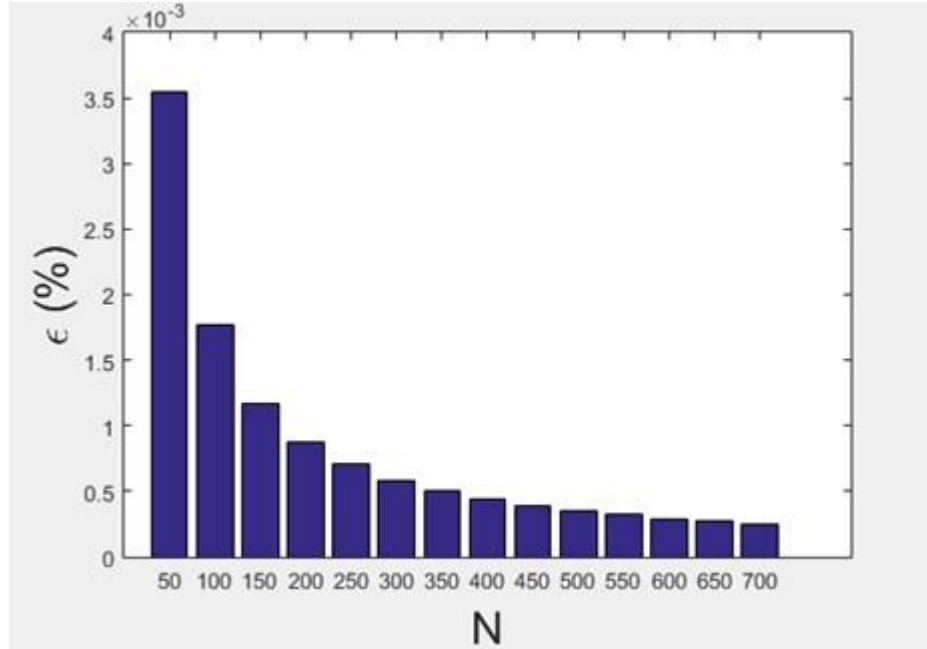


Fig. 13: Error relativo de E_0/N frente a N discreto para $\lambda_c = 0.5$.

Efectivamente, como esperábamos, lo que difieren las curvas disminuye conforme aumenta el número de partículas. Esto es lo que esperábamos desde el marco teórico y es un resultado satisfactorio.

En cuanto a la fracción de átomo, N_A/N , tenemos la dificultad de que hay valores exactos que son nulos y que, por tanto, no pueden formar parte del error relativo. Aunque no sea tan representativo de la diferencia entre las dos curvas en (%), vamos a representar el valor absoluto de lo que difiere cada punto de cada curva y ver la dependencia con N , que es lo que queremos demostrar.

$$desviacion(N) = \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{max}} |\text{campo medio}(\lambda, N) - \text{cálculo exacto}(\lambda, N)|. \quad (3.3)$$

De este modo, como decíamos, podemos ver al menos si tenemos una mejor o peor validez de la aproximación respecto a N . Esto es visible en la figura 14, donde representamos la desviación frente a un conjunto discreto de valores de N .

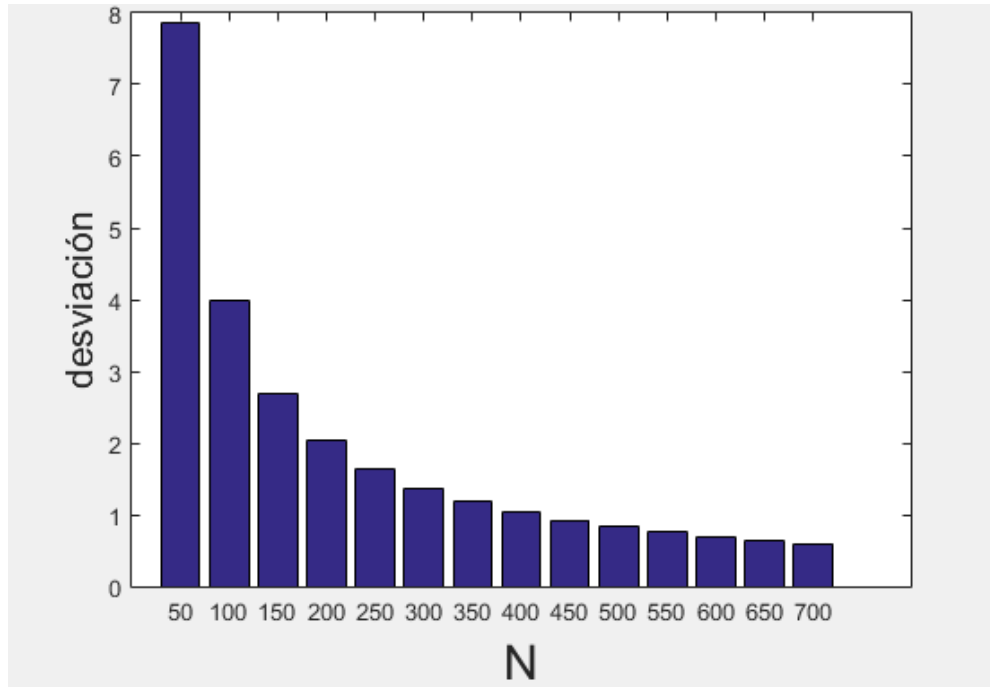


Fig. 14: Desviación de N_A/N frente a N discreto para $\lambda_c = 0.5$.

Obtenemos en la figura 14 exactamente la misma dependencia con N que en el caso de la energía.

Como conclusión, hemos probado que el modelo del campo medio funciona razonablemente bien sólo cuando tenemos un número muy elevado de partículas. Es decir, si N es lo suficientemente grande, con muy buena aproximación, podemos predecir el comportamiento del sistema sin resolver el problema exacto.

Una vez hemos confirmado la validez de la teoría de campo medio para un número alto de partículas, podemos darles veracidad a las predicciones realizadas por la teoría de campo medio para este problema. Una de ellas era acerca del orden de la transición: no sólo tendríamos una transición de fase (cosa que de momento es indiscutible) sino que, además, sería de segundo orden.

Sin embargo, aunque la TCM lo sugiere, no hemos demostrado en el problema exacto que la transición de fase sea compatible con una de segundo orden. Esto sería posible mediante el concepto de entropía desarrollado en la sección 2.3.4. Si la teoría de la información en física cuántica ha capturado bien el concepto de entropía, deberíamos ser capaces de determinar el orden de la transición estudiando su continuidad.

3.4 Entropía

Para calcular la entropía sólo es necesario resolver las integrales (2.25) y (2.31). Esto, una vez más, lo debemos programar con MATLAB.

La entropía ha sido calculada para $N = 100$, puesto que una menor dimensión agiliza la integral a resolver. La entropía no es un concepto que hayamos predicho por la TCM, así que un número N pequeño o grande es irrelevante para lo que tratamos de confirmar. Es más, lo que precisamente nos interesa es aquel comportamiento que difiere significativamente del modelo de campo medio.

Lo que esperamos obtener si representamos una entropía frente a λ , en un comportamiento que nos permita distinguir dos fases bien diferenciadas. Podemos comenzar con la primera entropía que hemos definido, la entropía de Shannon, representada en la figura 15 para $\lambda_c = 0.5$.

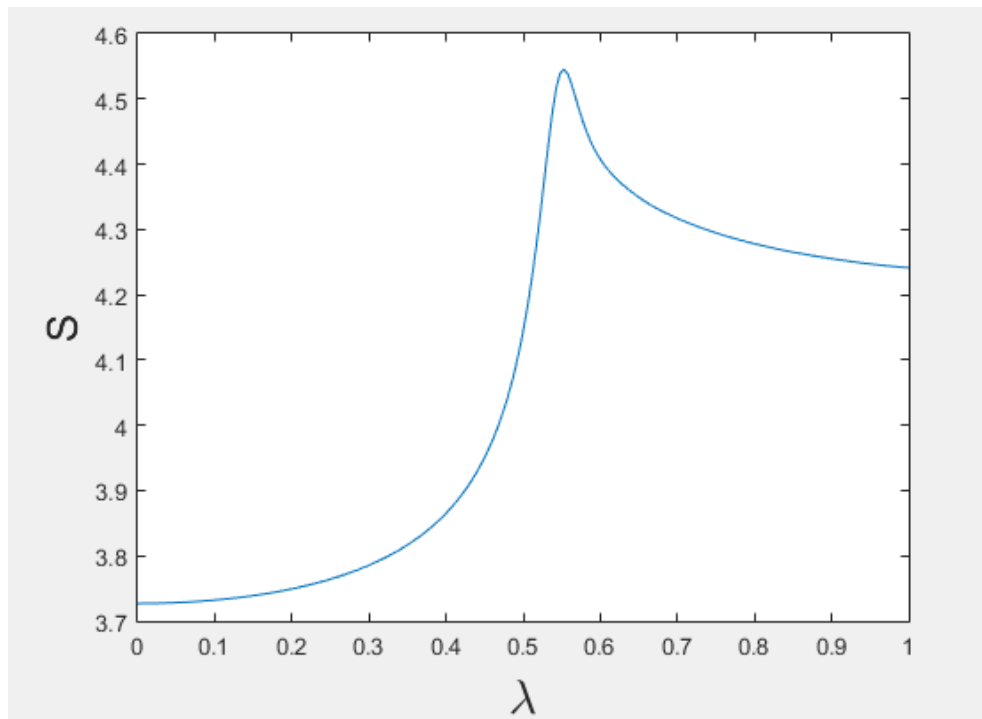


Fig. 15: Entropía de Shannon frente a λ para $\lambda_c = 0.5$ y $N = 100$.

En esta, vemos dos fases diferenciadas caracterizadas por dos valores de la entropía. Hay un máximo en la transición de fase debido al enorme cambio de probabilidades, al cambiar los autoestados relevantes del sistema. La entropía debería ser menor en la fase de condensado de moléculas diatómicas, por la localización del estado cuántico y mayor en la fase de coexistencia. Efectivamente, concuerda con el resultado obtenido.

Sabemos que la entropía de Rényi, R^α en (2.31) tiende a la de Shannon cuando $\alpha \rightarrow 1$. Lo que tenemos que determinar es qué sucede para $\alpha > 1$ y para $\alpha < 1$. En primer lugar, podemos escoger un valor de α entre 0 y 1, por ejemplo $\alpha = 1/2$. Si calculamos el valor de la entropía de Rényi para este valor, $R^{1/2}$ en función de λ , obtenemos la figura 16.

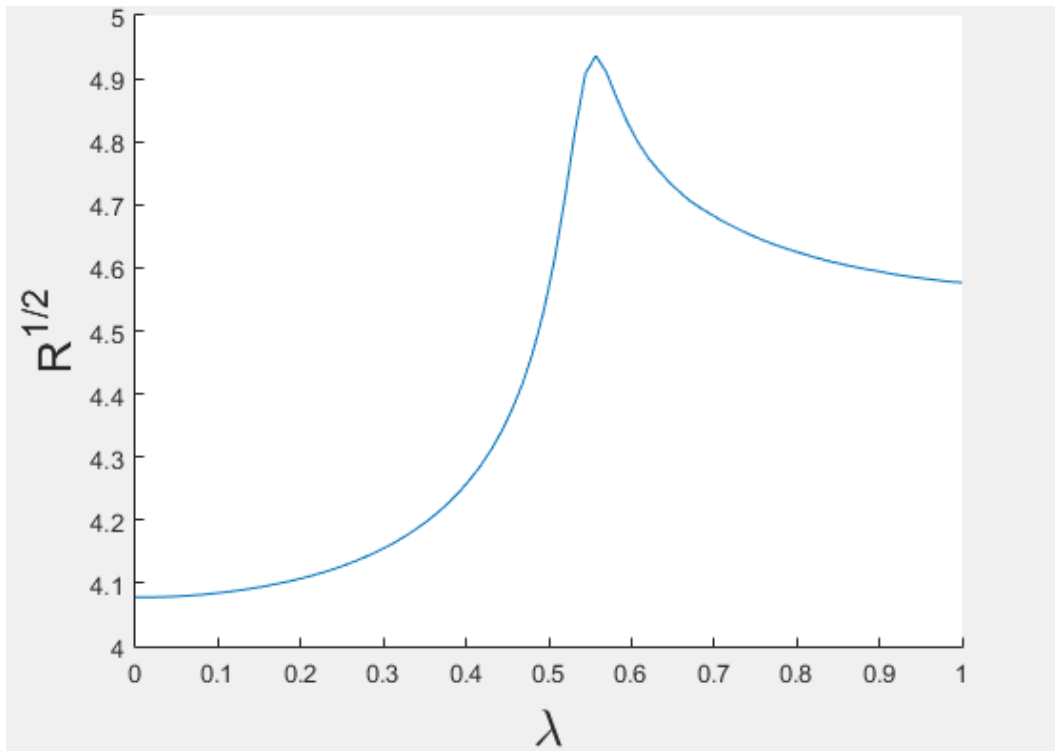


Fig. 16 Entropía de Rényi para $\alpha = 1/2$, $N = 100$ y $\lambda_c = 0.5$.

Es una figura con cierto parecido a la de Shannon, con dos fases diferenciadas por diferentes valores de la entropía, menor y mayor para las fases mencionadas con anterioridad. Atendiendo a la ecuación (2.30) o a la (2.31), para $\alpha \rightarrow 0$ la entropía pesa a todos los eventos de forma más igualitaria independientemente de su densidad de probabilidad, dada por $|\psi_n(x, y)|^2$. Por tanto, obtenemos un valor parecido al que obtenemos con la expresión de Shannon, pero la diferencia

entre las entropías a izquierda y derecha es menor. Por tanto, lo contrario debería ocurrir si aumentamos α . En la figura 17 representamos la entropía de Rényi para $\alpha = 2$.

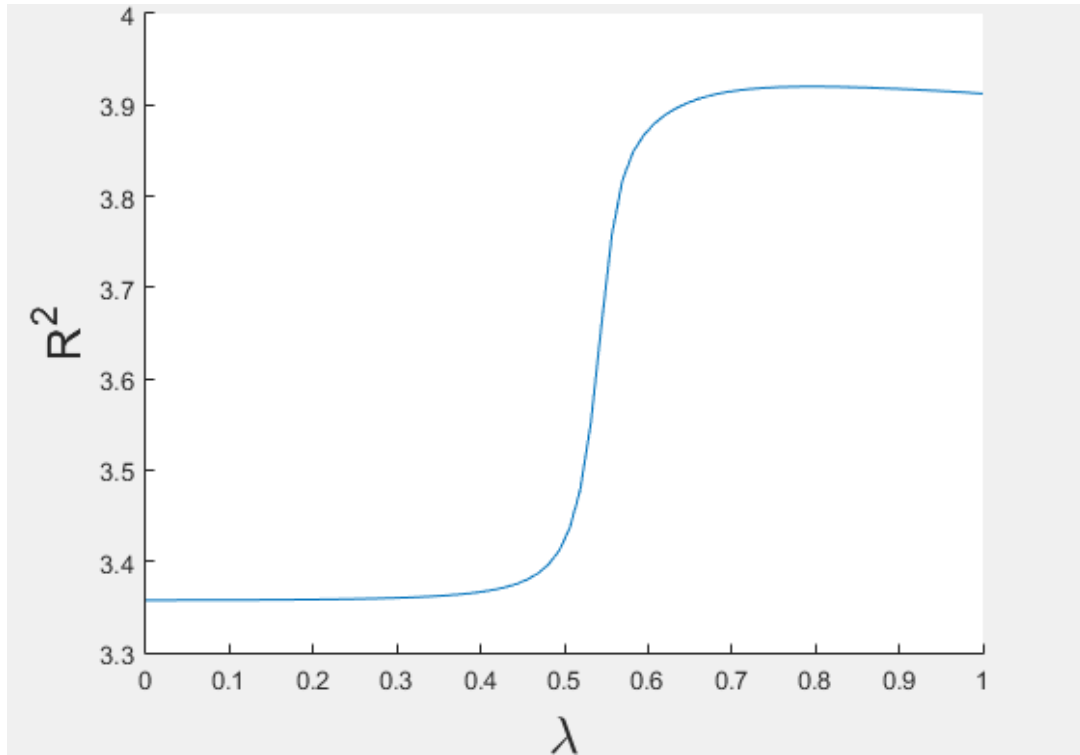


Fig. 17 Entropía de Rényi para $\alpha = 2$, $N = 100$ y $\lambda_c = 0.5$.

En este caso, podemos apreciar incluso más claramente un comportamiento de transición de fase. Además, con cambio bastante brusco, considerando el bajo valor de N . No sólo se cumple lo anterior, sino que la diferencia entre los valores de la entropía de cada fase es mucho mayor. Este comportamiento de la entropía es análogo al que se da en una transición de segundo orden al que nos apuntaba el modelo de campo medio. La clasificación de esta transición de fase está dada ahora tanto por la resolución exacta del problema como por su aproximación en el modelo de campo medio.

4. Conclusiones

Hemos modelado un sistema de dos niveles mediante un hamiltoniano en segunda cuantización y hemos resuelto su problema de autovalores y autovectores. A partir de estos, hemos calculado magnitudes relevantes, definidas en la sección 2.3, que pudiesen poner de manifiesto que ocurre una transición de fase cuántica para el nivel fundamental.

En las secciones 3.1, 3.2 y 3.4 hemos comprobado que para distintos valores de N y de las energías de cada nivel, siempre existe para el estado fundamental un comportamiento diferenciado en dos fases: una fase con moléculas diatómicas y otra con coexistencia átomo-diátomo. En estas fases tenemos propiedades diferenciadas: la energía, el valor medio de las partículas en cada nivel energético, el IPR y la entropía. En la sección 3.3 hemos comprobado que este comportamiento tiende a lo predicho por el modelo de campo medio para un número lo suficientemente elevado de partículas. Por tanto, no sería necesario resolver el problema exacto bajo estas condiciones.

Por tanto, hemos comprobado que efectivamente un sistema descrito por un hamiltoniano de estas características podría en su estado fundamental estar en dos fases cuánticas diferenciadas y que realizaría una transición de una a otra cambiando bruscamente sus propiedades. Es decir, que existiría una transición de fase cuántica tal y como hemos postulado en la introducción, para un sistema de dos niveles. También hemos comprobado por el modelo exacto y el modelo de campo medio que la transición de fase sería de segundo orden o continua.

Cabe destacar que esto no prueba la existencia de transiciones de fase cuánticas. Como comentábamos en la sección 1.3.1, un hamiltoniano no es más que un modelo, como todo tratamiento en física. Es tarea de la disciplina experimental comprobar para qué sistema real, si alguno, se tiene un comportamiento que se corresponda con muy buena aproximación con un hamiltoniano de estas características. Es decir, lo que hemos demostrado no es que existan las transiciones de fase cuánticas, sino que para un sistema cuántico que se describe como en nuestro modelo, existiría una transición de fase cuántica.

No obstante, dado que modelos tan idílicos y simples como el oscilador armónico, la partícula libre o el gas ideal funcionan razonablemente bien en determinadas circunstancias, sería lógico que se puedan dar nuestras hipótesis en un sistema real. Al fin y al cabo, sólo estamos considerando que el hamiltoniano de un sistema de dos niveles está dado por la energía debida a las partículas

que hay en cada nivel y por una interacción simple de paso de un nivel a otro. La única hipótesis adicional que puede chocar con un problema real es que nos hemos restringido a un sistema con un número par de partículas. Si bien es cierto que esto puede suponer diferencias en los resultados para un valor de N muy pequeño, las propiedades de un sistema de muchas partículas no van a cambiar de forma significativa por añadir o eliminar una. Es decir, $N \pm 1 \approx N$. De hecho, el modelo de campo medio (que considera $N \rightarrow \infty$) no tiene este problema. Además, hemos demostrado que este modelo de TCM funciona de forma suficientemente parecida a resolver el problema exacto, que tiene su restricción de N par. Por lo tanto, se confirma que N par es sólo una condición para hacer más ventajoso el cálculo, sin que esto altere significativamente las propiedades del sistema [5].

Por todo esto, si hay un sistema real descrito por este hamiltoniano, se cumplirían las definiciones de fase y transición de fase en la sección 1.3.2. Es un hecho que en la naturaleza se observan cambios bruscos en las propiedades de los sistemas a partir de valores críticos de parámetros que gobiernan sus comportamientos. Y ya sea en física clásica o en física cuántica, estos cambios bruscos se traducen en comportamientos en ciertas magnitudes que se pueden modelar como discontinuos. En todos los fenómenos conocidos, dichas magnitudes estarían relacionadas con conceptos energéticos. Por lo tanto, damos por satisfactoria la redefinición de transición de fase y su descripción cuántica.

5. Referencias

- [1] Cracknell, A. P., Lorenc, J., & Przystawa, J. A. Landau's theory of second-order phase transitions and its application to ferromagnetism. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 9(9), 1731–1758. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/9/9/015>, (1976).
- [2] Yeomans, J. M., & Rudnick, J. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. *Physics Today*. 46(7) 80 <https://doi.org/10.1063/1.2808979>, (1993).
- [3] Jaeger, Gregg. "The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution". *Archive for History of Exact Sciences*. **53** (1): 51–81, (1998).
- [4] Fernández Tejero, C & Baus, M. *Física Estadística del Equilibrio: fases de la materia*. Aula documental de investigación, (2000).
- [5] Reif, F., & Scott, H. L, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. *American Journal of Physics*. <https://doi.org/10.1119/1.19073>, (1998).
- [6] Zamora, M *Termino I: un estudio de los sistemas termodinámicos*. Publicaciones de la Universidad de Sevilla, (1998)
- [7] Pokrovsky, V. L, Landau and modern physics. *Physics-Uspeski*, 52(11), 1169–1176. <https://doi.org/10.3367/ufne.0179.200911j.1237> (2009).
- [8] McNaught, A. D. & Wilkinson, A. *Compendium of chemical terminology- the "Gold book."* In Blackwell Scientific. <https://doi.org/10.1351/goldbook.I03352>, (1997).
- [9] Sachdev, S. Quantum phase transitions. In *Physics World* (Vol. 12, Issue 4). <https://doi.org/10.1088/2058-7058/12/4/23>, (1999).
- [10] Blundell, S. J., & Blundell, K. M. *Concepts in Thermal Physics*. In *Concepts in Thermal Physics*. Oxford Scholarship Online. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199562091.001.0001>, (2010).
- [11] Carr, L. Understanding quantum phase transitions. In *Understanding Quantum Phase Transitions*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b10273>, (2010).
- [12] Dubbers, D., & Stöckmann, H.-J. *Quantum Physics: The Bottom-Up Approach*. In *From the Simple Two-Level System to Irreducible Representations*. Springer. (2013)

[13] Juan Gamito, Trabajo Fin de Máster "Análisis de un quantum quench en el modelo de Lipkin anarmónico", Universidad de Sevilla, 2019 y referencias en él

[14] Sarah S Chehade and Anna Vershynina (2019), Scholarpedia, 14(2):53131.
doi:10.4249/scholarpedia.53131

[15] Romera, E., del Real, R., Calixto, M., Nagy, S., & Nagy, Á. (2013). Rényi entropy of the U(3) vibron model. Journal of Mathematical Chemistry. <https://doi.org/10.1007/s10910-012-0106-7>

6. Apéndices

A continuación, presentamos aquellos cálculos que se han omitido por no ser relevantes para el informe científico, pero que complementan la información que se da en el mismo. Así mismo, presentamos el código realizado en MATLAB con el que hemos conseguido toda la información relevante.

6.1 Apéndice A: resolución matricial del problema

En esta sección vamos a ilustrar cómo se resolvería el problema exacto. Comenzamos representando las matrices:

Al ser base propia de H_a y H_b , estos son diagonales y en la diagonal aparece el número de bosones monoatómicos y diatómicos respectivamente que hay en cada estado. H_{ab} tiene ceros en la diagonal y términos distintos de cero con coordenadas $H_{i\ i\pm 1}$ sin exceder los límites de la dimensión de la matriz. Para un sistema con 6 partículas la base viene dada por los siguientes vectores: $\{|0\ 3\rangle, |2\ 2\rangle, |4\ 1\rangle, |6\ 0\rangle\}$.

$$H_a \leftrightarrow \frac{1}{2} \omega_0 \begin{pmatrix} \langle 0\ 3|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 0\ 3|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 0\ 3|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 0\ 3|a^\dagger a|6\ 0\rangle \\ \langle 2\ 2|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 2\ 2|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 2\ 2|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 2\ 2|a^\dagger a|6\ 0\rangle \\ \langle 4\ 1|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 4\ 1|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 4\ 1|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 4\ 1|a^\dagger a|6\ 0\rangle \\ \langle 6\ 0|a^\dagger a|0\ 3\rangle & \langle 6\ 0|a^\dagger a|2\ 2\rangle & \langle 6\ 0|a^\dagger a|4\ 1\rangle & \langle 6\ 0|a^\dagger a|6\ 0\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.A.1)$$

Como hemos introducido, el operador $a^\dagger a$ cuenta el número de partículas n_a , y como los autovectores de un oscilador armónico son ortonormales:

$$H_a \leftrightarrow \frac{1}{2} \omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}. \quad (6.A.2)$$

De forma análoga:

$$H_b \leftrightarrow \omega \begin{pmatrix} \langle 0\ 3|b^\dagger b|0\ 3\rangle & \langle 0\ 3|b^\dagger b|2\ 2\rangle & \langle 0\ 3|b^\dagger b|4\ 1\rangle & \langle 0\ 3|b^\dagger b|6\ 0\rangle \\ \langle 2\ 2|b^\dagger b|0\ 3\rangle & \langle 2\ 2|b^\dagger b|2\ 2\rangle & \langle 2\ 2|b^\dagger b|4\ 1\rangle & \langle 2\ 2|b^\dagger b|6\ 0\rangle \\ \langle 4\ 1|b^\dagger b|0\ 3\rangle & \langle 4\ 1|b^\dagger b|2\ 2\rangle & \langle 4\ 1|b^\dagger b|4\ 1\rangle & \langle 4\ 1|b^\dagger b|6\ 0\rangle \\ \langle 6\ 0|b^\dagger b|0\ 3\rangle & \langle 6\ 0|b^\dagger b|2\ 2\rangle & \langle 6\ 0|b^\dagger b|4\ 1\rangle & \langle 6\ 0|b^\dagger b|6\ 0\rangle \end{pmatrix},$$

$$H_b \leftrightarrow \omega \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.A.3)$$

Una vez más, aplicamos los operadores para H_{ab} :

$$\lambda H_{ab} \leftrightarrow \frac{\lambda}{\sqrt{2 \cdot 6}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} \sqrt{2} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{1} \sqrt{2} \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \sqrt{2} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{4} \sqrt{2} \sqrt{3} & 0 & \sqrt{1} \sqrt{5} \sqrt{6} \\ 0 & 0 & \sqrt{1} \sqrt{5} \sqrt{6} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda H_{ab} \leftrightarrow \frac{\lambda}{\sqrt{12}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ \sqrt{6} & 0 & 2\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2\sqrt{6} & 0 & \sqrt{30} \\ 0 & 0 & \sqrt{30} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.A.4)$$

Evidentemente, obtenemos una matriz H hermítica.

Usamos el símbolo \leftrightarrow para denotar que un operador “se corresponde” con una matriz. Lo cual es conceptualmente distinto a que el operador sea una matriz. Un operador existe como elemento abstracto en un cierto espacio vectorial y una matriz es una representación en una base concreta de dicho operador.

6.2 Apéndice B: autofunciones en el espacio de configuración

En esta sección vamos a ver cómo se representan en el espacio de configuración los autovectores obtenidos de resolver la ecuación de Schrödinger (2.12).

Recordamos que para construir el hamiltoniano en forma matricial habíamos escrito sus componentes en (2.14)

$$H_{ij} = \langle i | H | j \rangle. \quad (2.14)$$

Donde los vectores $|i\rangle$ y $|j\rangle$ son los autovectores de un problema del oscilador armónico. Al diagonalizar el hamiltoniano, lo que estamos haciendo es “girar” los vectores con una matriz V definida como:

$$V|i\rangle \equiv |i'\rangle. \quad (6.B.1)$$

Es relevante comentar que operador se define por cómo actúa sobre una base completa.

Sea D la matriz del hamiltoniano escrito en su base propia (por lo tanto, diagonal):

$$D_{ij} = \langle i'|H|j'\rangle = \langle i|V^{-1} H V|j\rangle = \langle i|D|j\rangle.$$

Por tanto,

$$V^{-1} H V = D. \quad (6. B. 2)$$

Y esta matriz V que diagonaliza el hamiltoniano es la matriz de los autovectores puestos por columna, como sabemos de diagonalización de matrices. Es decir, la matriz de cambio de base que me lleva de la base del oscilador armónico a la base propia del hamiltoniano es la que hemos calculado al resolver el problema de autovalores. Una matriz de cambio de base tiene por columnas las coordenadas de la base nueva en función de la base antigua. Sea $|\psi_n\rangle$ una autofunción del hamiltoniano, podemos escribir el cierre:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{n_a} \sum_{n_b} |n_a n_b\rangle \langle n_a n_b | \psi_n\rangle, \quad (6. B. 3)$$

donde $\langle n_a n_b | \psi_n\rangle$ es un escalar $C_{n_a n_b}$ con el que hacemos la combinación lineal de elementos del oscilador armónico. Son las coordenadas de la base nueva respecto a la antigua. Es decir, como acabamos de razonar, estos coeficientes son las componentes de los autovectores que hemos obtenido matricialmente:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{n_a} \sum_{n_b} C_{n_a n_b}^{(n)} |n_a n_b\rangle. \quad (6. B. 4)$$

Los coeficientes $C_{n_a n_b}^{(n)}$ serán distintos para cada estado $|\psi_n\rangle$. Vamos a suponer que estamos trabando con $|\psi_0\rangle$, el estado fundamental, por simplicidad en la notación. En este caso, como con N_a en la ecuación (2.17), prescindiremos de la etiqueta para las $C_{n_a n_b}$.

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n_a} \sum_{n_b} C_{n_a n_b} |n_a n_b\rangle. \quad (6. B. 5)$$

Multiplicamos por el *bra* $\langle xy|$ para proyectar nuestra autofunción en el espacio de posiciones

$$\psi_0(x, y) = \langle xy | \psi_0\rangle = \sum_{n_a} \sum_{n_b} C_{n_a n_b} \langle xy | n_a n_b\rangle. \quad (6. B. 6)$$

Las autofunciones de un oscilador armónico vienen dadas por:

$$\langle x|n\rangle = \varphi_n(x) = \mathcal{N}_n H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \quad (6.B.7)$$

Con $\mathcal{N}_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}}$ Como la base $|n_a n_b\rangle = |n_a\rangle \times |n_b\rangle$, entonces $\langle xy|n_a n_b\rangle = \langle x|n_a\rangle \langle y|n_b\rangle = \phi_{n_a n_b}(x, y)$:

$$\phi_{n_a n_b}(x, y) = \mathcal{N}_{n_a} H_{n_a}(x) \exp(-x^2/2) \mathcal{N}_{n_b} H_{n_b}(y) \exp(-y^2/2). \quad (6.B.8)$$

Como conclusión, recuperamos la ecuación (2.32):

$$\psi_0(x, y) = \sum_{n_a} \sum_{n_b} C_{n_a n_b} \mathcal{N}_{n_a} H_{n_a}(x) \exp(-x^2/2) \mathcal{N}_{n_b} H_{n_b}(y) \exp(-y^2/2).$$

6.3 Apéndice C: Reescritura de la energía en TCM

En esta sección vamos a ver cómo reescribimos el Hamiltoniano en la teoría de campo medio. El hamiltoniano podía ser redefinido utilizando las relaciones (2.33) a (2.38). Comenzamos con las relaciones (2.33) a (2.35). Recordamos que estas eran:

$$K_+ \equiv \frac{1}{2} a^\dagger a^\dagger, \quad K_- \equiv \frac{1}{2} a a, \quad K_0 \equiv \frac{1}{2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right).$$

Cuyas relaciones de conmutación son:

$$[K_0, K_\pm] = \pm K_\pm, \quad (6.C.1)$$

$$[K_+, K_-] = -2K_0. \quad (6.C.2)$$

Vamos a demostrarlo:

$$[K_0, K_+] = \left[\frac{1}{2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \frac{1}{2} (a^\dagger a^\dagger) \right] = \frac{1}{4} [a^\dagger a, a^\dagger a^\dagger].$$

Donde hemos aplicado que una constante conmuta con cualquier operador. Operamos usando las propiedades de los conmutadores: $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$.

$$[K_0, K_+] = \frac{1}{4} a^\dagger a^\dagger [a, a^\dagger] + \frac{1}{4} a^\dagger [a, a^\dagger] a^\dagger + \frac{1}{4} a^\dagger [a^\dagger, a^\dagger] a + \frac{1}{4} [a^\dagger, a^\dagger] a a^\dagger.$$

Como cualquier operador conmuta consigo mismo, $[a^\dagger, a^\dagger] = 0$ y además $[a, a^\dagger] = 1$:

$$[K_0, K_+] = \frac{1}{4} a^\dagger a^\dagger + \frac{1}{4} a^\dagger a^\dagger = \frac{1}{2} a^\dagger a^\dagger = K_+.$$

Análogamente:

$$[K_0, K_-] = \left[\frac{1}{2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \frac{1}{2} (a a) \right] = \frac{1}{4} [a^\dagger a, a a].$$

Resolvemos el conmutador:

$$[K_0, K_-] = \frac{1}{4} a^\dagger a [a, a] + \frac{1}{4} a^\dagger [a, a] a + \frac{1}{4} a [a^\dagger, a] a + \frac{1}{4} [a^\dagger, a] a a.$$

Una vez más $[a, a] = 0$, pero en este caso $[a^\dagger, a] = -[a, a^\dagger] = -1$.

$$[K_0, K_-] = -\frac{1}{4} a a - \frac{1}{4} a a = -\frac{1}{2} a a = -K_-.$$

Que son efectivamente las expresiones en (6.C.1). Por último, vamos a demostrar la relación

$[K_+, K_-] = -2K_0$:

$$[K_+, K_-] = \left[\frac{1}{2} a^\dagger a^\dagger, \frac{1}{2} a a \right] = \frac{1}{4} a^\dagger a [a^\dagger, a] + \frac{1}{4} a^\dagger [a^\dagger, a] a + \frac{1}{4} a [a^\dagger, a] a^\dagger + \frac{1}{4} [a^\dagger, a] a^\dagger a,$$

$$[K_+, K_-] = -\frac{1}{4} (a^\dagger a + a^\dagger a + a a^\dagger + a^\dagger a) = -\frac{1}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger).$$

Como queremos algo que se parezca a K_0 , usamos las reglas de conmutación aplicadas en (2.2):

$$[K_+, K_-] = -\frac{1}{2} (a^\dagger a + a^\dagger a + 1) = -\left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = -2K_0.$$

Que es efectivamente la relación (6.C.2). Reescribimos el hamiltoniano utilizando estas definiciones anteriores:

$$H = \omega_0 K_0 - \frac{1}{4} \omega_0 + \omega b^\dagger b + \sqrt{\frac{2}{N}} \lambda (b^\dagger K_- + b K_+). \quad (6.C.3)$$

Las relaciones de Holstein-Primakoff recogidas en (2.36) a (6.38) son:

$$K_+ = C^\dagger \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2}, \quad K_- = \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2} C, \quad K_0 = C^\dagger C + \frac{1}{4}.$$

Las relaciones de conmutación, según lo que acabamos de ver, son:

$$[C, C^\dagger] = 1, \quad [b, b^\dagger] = 1. \quad (6.C.4)$$

Las relaciones para los operadores de creación y destrucción de pares son iguales a las de partículas individuales, como es lógico. La escritura quedaría hasta este momento como:

$$H = \omega_0 C^\dagger C + \omega b^\dagger b + \sqrt{\frac{2}{N}} \lambda \left(b^\dagger \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2} C + b C^\dagger \left(\frac{1}{2} + C^\dagger C \right)^{1/2} \right). \quad (6.C.5)$$

El operador b^\dagger conmuta con C y C^\dagger puesto que se refiere a partículas distintas (actúan sobre espacios distintos). Por tanto, podemos escribir el hamiltoniano como en la relación (2.39) con la que trabajamos en la sección 2.4. Por último, ya que $N = n_a + 2n_b$, si escribimos el operador \hat{N} , que cuenta las partículas totales que hay (N):

$$\hat{N} = a^\dagger a + 2b^\dagger b = 2K_0 - \frac{1}{2} + 2b^\dagger b = 2(C^\dagger C + b^\dagger b),$$

si dividimos por N , tenemos el operador identidad, que es isomorfo de la unidad. Además, si escribimos estos operadores en el espacio de configuración utilizando las relaciones en (2.40), obtenemos lo siguiente:

$$1 = 2 \frac{1}{2} (x^2 + p^2 + y^2 + q^2) \Rightarrow x^2 + p^2 + y^2 + q^2 = 1.$$

Que es la ecuación (2.48).

Reescribiendo el hamiltoniano por partícula y tomando el límite para energía cinética nula, y realizando el cambio de coordenadas a polares tal y como se explica hasta la ecuación (2.49).

$$V(\theta) = \frac{\omega}{2} + \frac{\omega_0 - \omega}{2} \cos^2 \theta + \lambda \cos^2 \theta \sin \theta.$$

5.4 Apéndice D: cálculo de λ_c para la TCM

En esta sección, vamos a realizar el cálculo de λ_c . Este se consigue usando una condición de mínimo:

$$\left. \frac{dV(\theta)}{d\theta} \right|_{\theta_c} = 0. \quad (6.D.1)$$

$$-\frac{\omega_0 - \omega}{2} 2 \cos \theta_c \sin \theta_c - \lambda 2 \cos \theta_c \sin^2 \theta_c + \lambda \cos^3 \theta_c = 0.$$

Independientemente del valor de λ , siempre vamos a tener como solución

$$\cos \theta_c = 0 \Rightarrow \theta_c = (2k + 1) \frac{\pi}{2}. \quad (6.D.2)$$

Puede haber otra solución si

$$\begin{aligned} -\frac{\omega_0 - \omega}{2} 2 \operatorname{sen} \theta_c - \lambda 2 \operatorname{sen}^2 \theta_c + \lambda \cos^2 \theta_c &= 0, \\ -\Delta\omega \operatorname{sen} \theta_c - \lambda 2 \operatorname{sen}^2 \theta_c + \lambda (1 - \operatorname{sen}^2 \theta_c) &= 0, \\ 3\lambda \operatorname{sen}^2 \theta_c + \Delta\omega \operatorname{sen} \theta_c - \lambda &= 0, \\ \operatorname{sen} \theta_c &= \frac{-\Delta\omega \pm \sqrt{(\Delta\omega)^2 + 12\lambda^2}}{6\lambda}. \end{aligned} \quad (6.D.3)$$

Existen dos soluciones para el seno siempre, ya que el radicando es estrictamente positivo. A continuación, trataremos de encontrar una cota para el valor de λ tal que sea posible encontrar una solución. Sea $\lambda' \equiv \frac{\lambda}{\Delta\omega}$, el parámetro de control reducido:

$$\operatorname{sen} \theta_c = \frac{1}{\lambda'} \left(\frac{-1 \pm \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} \right). \quad (6.D.4)$$

La condición que debe cumplir la función seno es que

$$-1 \leq \operatorname{sen} \theta_c \leq 1. \quad (6.D.5)$$

O lo que es lo mismo:

$$\frac{1}{\lambda'} \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} \right) \leq 1, \quad (6.D.6)$$

$$\frac{1}{\lambda'} \left(\frac{-1 - \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} \right) \geq -1. \quad (6.D.7)$$

De la primera ecuación (6.D.6):

$$\sqrt{1 + 12 (\lambda')^2} \leq 6\lambda' + 1.$$

La raíz es positiva y es la cota inferior de $6\lambda' + 1$, que entonces es positivo también. Si elevamos al cuadrado dos números positivos se sigue cumpliendo su desigualdad:

$$1 + 12 (\lambda')^2 \leq (6\lambda' + 1)^2,$$

$$1 + 12 (\lambda')^2 \leq 36(\lambda')^2 + 12\lambda' + 1,$$

$$24(\lambda')^2 + 12\lambda' \geq 0,$$

$$\lambda' \geq -\frac{12}{24} = -\frac{1}{2}, \quad (6.D.8)$$

lo cual no nos dice mucho. Esto ya lo podíamos prever porque $\lambda' \geq 0$. La inecuación (6.D.6) no presenta ningún problema de continuidad. Se anula sólo en el origen y no llega a superar el valor del seno.

$$\lim_{\lambda' \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda'} \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} \right) = \lim_{\lambda' \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda'} \frac{\sqrt{12 (\lambda')^2}}{6} = \frac{\sqrt{12}}{6} = \frac{\sqrt{3}}{3} < 1,$$

$$\lim_{\lambda' \rightarrow -\infty} \frac{1}{\lambda'} \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} \right) = \lim_{\lambda' \rightarrow -\infty} \frac{1}{\lambda'} \frac{\sqrt{12 (\lambda')^2}}{6} = -\frac{\sqrt{12}}{6} = -\frac{\sqrt{3}}{3} > -1,$$

$$\lim_{\lambda' \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda'} \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} \right) = \frac{0}{0} (Ind) = \lim_{\lambda' \rightarrow 0} \frac{12\lambda'}{6\sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}} = 0.$$

Sin embargo, la segunda inecuación, (6.D.7) sí nos permite conocer el λ' a partir del cual existen soluciones para la ecuación de la energía, cuyo valor será el λ' crítico.

$$\lim_{\lambda' \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda'} \frac{-1 - \sqrt{1 + 12 (\lambda')^2}}{6} = \infty.$$

Lo que quiere decir que para cierto valor próximo a cero se espera el valor crítico. La inecuación es:

$$-\sqrt{1 + 12 (\lambda')^2} \geq -6\lambda' + 1. \quad (6.D.9)$$

A la izquierda tenemos un número negativo, que es la cota superior. Por tanto, $\lambda' \geq \frac{1}{6}$. Al elevar al cuadrado se cambia la desigualdad de sentido

$$1 + 12 (\lambda')^2 \leq (-6\lambda' + 1)^2,$$

$$1 + 12 (\lambda')^2 \leq 36(\lambda')^2 - 12\lambda' + 1,$$

$$24(\lambda')^2 - 12\lambda' \geq 0,$$

$$\lambda' \geq \frac{12}{24} = \frac{1}{2}, \quad (6.D.10)$$

es decir, el valor mínimo de λ' a partir del cual puede encontrarse un mínimo distinto en la energía del estado fundamental será 0.5. Este cambio en el comportamiento de la energía del estado fundamental nos marcaría un cambio de fase. Si deshacemos el cambio,

$$\lambda_c = \frac{\Delta\omega}{2} = \frac{\omega_0 - \omega}{2}. \quad (6.D.11)$$

6.5 Apéndice E: Códigos de MATLAB

En esta sección se escribirán los diversos códigos, complementarios entre sí, que hemos escrito para conseguir lo expuesto en la sección 3 (resultados). El código está comentado adecuadamente para ir siguiendo qué es lo que se hace en cada momento y por qué.

6.5.1 Programa principal

```
%% Modelo Exacto
% Tenemos el problema exacto, que vamos a resolver paso a paso

% Existen varias formas de configurar el programa en función de lo que
queramos concretamente

% Esta es la versión más general y adaptable a cada necesidad.

%% Parametros del problema

% Si queremos calcular la entropía de Rényi
Entropia_value=false;
% Si queremos magnitudes por partícula
Porparticula_value=true;
% Podemos cambiar colores fácilmente con la siguiente variable
stringer=['b' 'r' 'g' 'm' 'k']; % Debe tener al menos tanta longitud como N
% Si queremos calcular las magnitudes E0 y NA en el punto crítico
critico_value=false;
% Si queremos una forma aproximada de la ec de autovalores. No tiene mayor
% interés
ajustepolinomico_value=false;

% En las primeras versiones del programa, se introducía "a mano" el valor
% de N. La idea es no tener que ir a las primeras líneas continuamente para
% ir probando distintos N.
% Es posible sustituirlo simplemente por cualquier valor

% Elegimos N. Puede ser un vector si queremos el mismo cálculo para varios
% N. No es aconsejable hacerlo para la entropía de Rényi.
```



```

N=input('Elige número de partículas N= ');
Nlength=length(N);

for kn=1:Nlength
% Admitimos que N debe ser real, par y positivo.
% Introducimos condiciones para arreglar los posibles valores ilógicos que
% el ejecutante del programa pueda introducir

if imag(N(kn))~=0 % Corrección para números con parte imaginaria
warning('N debe ser real')
N(kn)=real(N(kn));
fprintf('N(kn)= Parte real de N: %0.3f \n',N)
end

if round(N(kn))~=N(kn) % Corrección para números con parte decimal
warning('N debe ser entero')
N(kn)=round(N(kn));
fprintf('N= parte entera de N: %0.0f \n',N(kn))
end

if N(kn)<0
warning('N debe ser positivo')
N(kn)=-N(kn);
fprintf('N= valor absoluto de N: %0.0f \n',N(kn))
end

if mod(N(kn),2)~=0 % Corrección para números impares
warning('N=N+1 (debe ser par)')
N(kn)=N(kn)+1;
fprintf('Valor de N= %0.0f \n',N(kn))
end

if N(kn)==0
N(kn)=2*round(200*rand); % Número aleatorio de partículas
fprintf('Valor aleatorio de N= %0.0f \n',N(kn))
end

end

for kn=1:Nlength
%% Contrucción de la base

% La base está dada por v=[C Na Nb] que son:
% C = constante que multiplica al ket. Si C=1, el estado está normalizado
% Na = número de partículas atómicas
% Nb = número de partículas diatómicas

% Definimos los estados en los que puede estar el sistema, desde el nivel
% fundamental [1 0 N], primero excitado: [1 1 N-2], etc.

Nb=linspace(0,N(kn)/2,N(kn)/2+1);
D=length(Nb); % Dimensión de la base
Aux=zeros(1,D);

```

```

Na=N(kn)-Nb*2;

% Vamos a almacenar cada vector de la base en una fila distinta
% de una matriz. La dimensión de la matriz será D x 3.

base=ones(D,3);
for i=1:D
    base(D+1-i,2)=Na(i);
    base(D+1-i,3)=Nb(i);
end
% La base está ordenada. El autovalor con menor energía debería ser el
% primero que aparezca en la matriz diagonal. Si no nos damos cuenta de
% esto, el programa se encarga de encontrar este valor más adelante

%% hamiltoniano adimensional actuando sobre vectores de la base

% Sin considerar las constantes delante de cada operador.
% Tenemos 4 términos. Son, por orden, los del anunciado.
% Definimos  $H | \text{base} \rangle = E$ 

Ea=zeros(D,3);
Eb=zeros(D,3);
Eab1=zeros(D,3);
Eab2=zeros(D,3);

% Las siguientes M-funciones están en otros ficheros. Son los operadores a,
% a daga, b, b daga.
for i=1:D

Ea(i,:)=adaga(a(base(i,:)));
Eb(i,:)=bdaga(b(base(i,:)));
Eab2(i,:)=(bdaga(a(a(base(i,:)))));
Eab1(i,:)=b(adaga(adaga(base(i,:))));

end
% Aquí tenemos cómo actúa cada elemento adimensional del hamiltoniano sobre
% cada elemento de la base, almacenado en matrices

%% Valor medio del hamiltoniano (contribuciones adimensionales)

%  $\langle \text{base} | \text{hamiltoniano adimensional} | \text{base} \rangle$ 
%  $\langle \text{base} | \text{Matrices Ea, Eb...} \rangle$ 
%  $\langle C \text{ Na Nb} | C' \text{ Na}' \text{ Nb}' \rangle$  (Donde  $C=1$ )
% Esto será cero,  $\{\text{zeros}(D,D)\}$  a no ser que  $\text{Na}=\text{Na}'$  y  $\text{Nb}=\text{Nb}'$ .
% Por tanto:  $\langle 1 \text{ Na Nb} | C' \text{ Na}' \text{ Nb}' \rangle = C' \text{ o } 0$ .
Ha=zeros(D,D);
Hb=zeros(D,D);
Hab1=zeros(D,D);
Hab2=zeros(D,D);

% Cada if le pregunta a un hamiltoniano adimensional sobre lo anterior
for i=1:D

```

```

for j=1:D
    if base(i,2)==Ea(j,2) && base(i,3)==Ea(j,3)

        Ha(i,j)=Ea(j,1);
    end
    if base(i,2)==Eb(j,2) && base(i,3)==Eb(j,3)

        Hb(i,j)=Eb(j,1);
    end
    if base(i,2)==Eab1(j,2) && base(i,3)==Eab1(j,3)

        Hab1(i,j)=Eab1(j,1);
    end

    if base(i,2)==Eab2(j,2) && base(i,3)==Eab2(j,3)

        Hab2(i,j)=Eab2(j,1);
    end

end

end

% Ahora solo tenemos que sumar las contribuciones con sus respectivas
% constantes, omega, omega0 y lambda

%% Cálculo de magnitudes

omega=1; omega0=2; % Podríamos cambiar estos parámetros
omega0red=omega0/2;
critico=(omega0-omega)/2; % punto crítico. Lo calculamos para graficarlo
también
Cn=1/sqrt(2*N(kn));

% A continuación, calculamos la energía del estado fundamental para
% distintos valores de lambda que contienen al punto de interés.

if Entropia_value==true
    lambda=linspace(0,2*critico,80);
else
    lambda=linspace(0,3*critico,1000); % lambda conteniendo el punto de
interés
end
% el cálculo para rényi es mucho menor para poder aligerar el programa.

L=length(lambda);
E0=zeros(1,L); % Aquí almacenamos la energía del estado fundamental
F_onda=zeros(D,L); %Aquí almacenamos la F. de onda del estado fundamental
ValorMedioHa=zeros(1,L); % Almacenamos aquí el valor medio
IPR=zeros(1,L); % Almacenamos aquí los valores del IPR en función de lambda

% en un único bucle calculamos IPR, E0, NA y funciones de onda

```

```

for i=1:L
H=omega0red*Ha+omega*Hb+(Hab1+Hab2)*lambda(i)*Cn; % Matriz Hamiltoniano
[V,Diagonal]=eig(H); % Resolución problema autovalores y autovectores
Autovalores=diag(Diagonal)';
E0(i)=Autovalores(1);
% La base está en orden para ahorrarnos el comando min(Autovalores)
F_onda0(:,i)=V(:,1);
% Calculamos el valor medio
ValorMedioHa(i)=F_onda0(:,i)'*Ha*F_onda0(:,i);

% IPR
IPR(i)=1/sum(V(:,1).^4);

end
if Porparticula_value==true
E0=E0/N(kn);
ValorMedioHa=ValorMedioHa/N(kn);
end

% V = matriz autovectores
% Diagonal = hamiltoniano diagonalizado
% Autovalores = vector fila formado por autovalores
% E0=energía del estado fundamental para cada lambda

% Representamos las energías del estado fundamental frente a lambda
figure(1)
plot(lambda,E0,stringer(kn))
% axis([0 3*critico min(E0) max(E0)+5])
axis([0 1.5 0 0.55])
title('Energía estado fundamental frente a {\lambda}','FontSize',20)
xlabel('{\lambda}','FontSize',20)
ylabel(['E_{' int2str(0) '}','FontSize',20);
hold on

% Para poner el * en el valor crítico. E0 para el lambda crítico:
if critico_value==true
H=omega0red*Ha+omega*Hb+(Hab1+Hab2)*critico*Cn;
[V,Diagonal]=eig(H);
Autovalores=diag(Diagonal)';
Ecritico=Autovalores(1);
% Y lo representamos en rojo
plot(critico,Ecritico,'*r')
legend('Energía fundamental','Valor Crítico')
end

% Representamos ahora el IPR
figure(2)
plot(lambda,IPR,stringer(kn))
title('IPR frente a {\lambda} para N=500')
xlabel('{\lambda}')
ylabel('Coeficiente de participación inversa')

%% NA

```

```

figure(3) % Lo representamos
plot(lambda,ValorMedioHa,stringer(kn))
hold on
subindex='A';
title('Valor medio de N_A frente a {\lambda}','FontSize',20)
xlabel('{\lambda}','FontSize',20)
ylabel('N_A','FontSize',20)

% Para poner el * en el valor crítico
if critico_value==true
F_onda0Critico=V(:,1); % En V está almacenado el valor crítico
ValorMedioHaCritico=F_onda0Critico*Ha*F_onda0Critico;
plot(critico,ValorMedioHaCritico,'rx')
legend('Valor medio de Ha', 'Critico')
end

%% Si quisiesemos la ecuación de autovalores dependiente de lambda

if ajustepolinomico_value==true

cE0=polyfit(lambda,E0,D); % Me da la E0 en función de lambda
%

% Comprobación gráfica
E0pol=0;
for i=1:length(cE0)
    E0pol=E0pol+cE0(i)*lambda.^(D-i+1);
end
figure(1)
plot(lambda,E0pol,'r')

end

end

%% Entropía de Renyi

if Entropia_value==true
alpha=1/2;
C_Ralpha=1/(1-alpha);
dosalpha=2*alpha;

% los números cuánticos son:

```

```

na=base(:,2)';
nb=base(:,3)';

%% ENTROPIA DE RENYI
% descomentar para Renyi:
% limite=40;
% pasos=0.1;

% Shannon
limite=13; % comentar para Shannon
pasos=0.02; % igual

x=-limite:pasos:limite;
y=x;
xlength=length(x);

I=zeros(xlength,xlength);
S=I;
Ralpha=zeros(1,L);
Shannon=Ralpha;

n1=0:1:N(kn)/2;
n2=N(kn)/2+2:2:N(kn);
n=[n1 n2];
nlength=length(n);
LordHermite=zeros(N(kn)+1,xlength);

% Aquí calculamos los polinomios de hermite relevantes
for i=1:nlength
    for j=1:xlength
        LordHermite(n(i)+1,j)=hermite2(n(i),x(j))*exp(-
x(j)^2/2)/sqrt(2^(n(i)).*factorial(n(i))*sqrt(pi));
    end
end

% Aquí calculamos las entropías de Shannon o Rényi para cada lambda
for t=1:L

    % Aquí calculamos el integrando de las expresiones correspondientes
    for i=1:xlength
        for j=1:xlength
            IH=0;
            for k=1:D

IH=IH+F_onda0(k,t)*LordHermite(na(k)+1,i)*LordHermite(nb(k)+1,j);
            end

%             I(i,j)=abs(IH)^dosalpha; % Rényi

% Entropía de Shannon:

```

```

        if IH~=0
            IH=abs(IH);
            S(i,j)=IH*log(IH);

        end

% Fin de entropía de Shannon

        end

        end
        % E integramos:
        % Ralpha(t)=C_Ralpha*log(trapz(y,trapz(x,I,2))); % Renyi
        Shannon(t)=-trapz(y,trapz(x,S,2)); % Shannon
        I=zeros(xlength,xlength);
        S=I; % Shannon

end

% Rényi
% figure(4)
% hold on
% plot(lambda,Ralpha)
%
% xlabel('\lambda','FontSize',20)
% ylabel('R^{1/2}','FontSize',18)

% Shannon
figure(5)
plot(lambda,Shannon)
xlabel('\lambda','FontSize',20)
ylabel('S','FontSize',18)
hold on

end

```

6.5.2 Operadores de creación y destrucción

En esta sección se exponen los 4 operadores relevantes. Estos son:

Operador de creación de partícula libre

```

function [B]=adaga(A)

if A(1)==0
    B=zeros(1,3);
else
    B(1)=A(1)*sqrt(A(2)+1);
    B(2)=A(2)+1;
    B(3)=A(3);
end
end

```

Operador de creación de partícula diatómica

```

function[B]=bdaga(A)
if A(1)==0
    B=zeros(1,3);
else
    B(1)=A(1)*sqrt(A(3)+1);
    B(2)=A(2);
    B(3)=A(3)+1;
end
end

```

Operador de destrucción de partícula libre:

```

function[B]=a(A)
if A(1)==0
    B=zeros(1,3);
else
    B(1)=A(1)*sqrt(A(2));
    B(2)=A(2)-1;
    B(3)=A(3);
end
end

```

Operador de destrucción de partícula diatómica:

```

function[B]=b(A)
if A(1)==0
    B=zeros(1,3);
else
    B(1)=A(1)*sqrt(A(3));
    B(2)=A(2);
    B(3)=A(3)-1;
end
end

```

6.5.3 Polinomios de Hermite

```

function [h] = hermite2 (n, x)
% h = hermite(n, x) devuelve el polinomio de Hermite de grado n evaluado en x

h = zeros(1,n+1);
n_fact = factorial(n);
m = 0:floor(n/2);
h(2*m+1) = n_fact .* (-1).^m ./ (factorial(m) .* factorial(n-2.*m)) .* 2.^(n-2.*m);

if exist('x','var')
h = polyval(h, x);
end
end

```

6.5.4 Modelo de campo medio

```

% desviacion_value será true si queremos calcular la diferencia de lo
% calculado anteriormente por el modelo de campo medio.
desviacion_value=false;

```



```

%% Derivadas de la energía
V=@(lam) 0.5+(0.5+lam*(-1-sqrt(1+12*lam^2))/(6*lam))*cos(asin((-1-
sqrt(1+12*lam^2))/(6*lam)))^2;
Vtheta=@(theta, lam)
omega0/2*cos(theta)^2+omega/2*sin(theta)^2+lam*cos(theta)^2*sin(theta);
dV=@(lam) (2*lam*((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1)^2/(36*lam^2) - 1)/(12*lam^2 +
1)^(1/2) - (((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1)^2/(18*lam^3) - (2*((12*lam^2 + 1)^(1/2)
+ 1))/(3*lam*(12*lam^2 + 1)^(1/2)))*((12*lam^2 + 1)^(1/2)/6 - 1/3);

dV2=@(lam) (2*((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1)^2/(36*lam^2) - 1)/(12*lam^2 +
1)^(1/2) - ((12*lam^2 + 1)^(1/2)/6 - 1/3)*((8*((12*lam^2 + 1)^(1/2) +
1))/(12*lam^2 + 1)^(3/2) - ((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1)^2/(6*lam^4) -
8/(12*lam^2 + 1) + (2*((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1))/(lam^2*(12*lam^2 +
1)^(1/2))) - (4*lam*((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1)^2/(18*lam^3) - (2*((12*lam^2 +
1)^(1/2) + 1))/(3*lam*(12*lam^2 + 1)^(1/2)))/(12*lam^2 + 1)^(1/2) -
(24*lam^2*((12*lam^2 + 1)^(1/2) + 1)^2/(36*lam^2) - 1)/(12*lam^2 + 1)^(3/2);

% dV=@(theta, lam) lam*cos(theta)^3 - cos(theta)*sin(theta) -
2*lam*cos(theta)*sin(theta)^2;
% dV2=@(theta, lam) 2*lam*sin(theta).^3 - cos(theta).^2 + sin(theta).^2 -
7*lam*cos(theta).^2*sin(theta);

thetacritico=[asin(1) asin(-1) asin(1/3)];
E0teo=zeros(1,L);
dVc=E0teo;
dV2c=E0teo;
Nateo=E0teo;

thetalambda=asin((-ones(1,L)-sqrt(ones(1,L)+12*lambda.^2))./(6*lambda));
thetalambdamal=asin((-ones(1,L)+sqrt(ones(1,L)+12*lambda.^2))./(6*lambda));
for i=1:L
    if lambda(i)<0.5
        E0teo(i)=0.5;
        % Nateo(i)=0;

    else
        dVc(i)=dV(lambda(i));
        dV2c(i)=dV2(lambda(i));
        E0teo(i)=V(lambda(i));
        Nateo(i)=cos(asin((-1-sqrt(1+12*lambda(i)^2))/(6*lambda(i))))^2;

    end
end

figure(1)
hold on
plot(lambda,E0teo,'--g')
legend('N=50', 'N=700', 'Campo Medio')

figure(3)
hold on
plot(lambda,Nateo,'--g')

```

```

legend('N=50', 'N=700', 'Campo Medio')

%
%
figure(4)
plot(lambda,dVc,'m')
title('Primera Derivada de la energía mínima')
xlabel('\lambda','FontSize',20)
ylabel('Derivada primera','FontSize',14)
axis([0 1.5 -0.4 0.05])

figure(5)
plot(lambda,dV2c,'m')
title('Segunda Derivada de la energía mínima')
xlabel('\lambda','FontSize',20)
ylabel('Derivada segunda','FontSize',14)
axis([0 1.5 -2 0.2])

% Ejecutar sólo tras el principal
if desviacion_value==true

desviacionE0=zeros(1,Nlength);
desviacionE0lambda=zeros(Nlength,L);

figure(6)
hold on
xlabel('\lambda','FontSize',20);
ylabel('\epsilon (%)','FontSize',20);
for i=1:Nlength
%     desviacionE0(i)=mean(abs(E0_campomedio(i,:)-
E0teo)./E0_campomedio(i,:));
desviacionE0lambda(i,:)=(abs(E0_campomedio(i,:)-
E0teo)./E0_campomedio(i,:));
plot(lambda,desviacionE0lambda(i,:))

end
legend('N=50', 'N=700')
% figure(7)
% bar(N,desviacionE0)

% title('Error relativo E_0/N frente a N','FontSize',18)
% xlabel('N','FontSize',20)
% ylabel('\epsilon (%)','FontSize',20);

% axis([0 750 4*10^-3 0])

```

```

% figure(1)
% legend('N=50','N=100','N=200','N=400','N=600')

%% Campo medio (partículas)

desviacionNa=zeros(1,Nlength);
desviacionNalambda=zeros(Nlength,L);

figure(8)
hold on
for i=1:Nlength
%     desviacionNa(i)=sum(abs(Na_campomedio(i,:)-Nateo));
    desviacionNalambda(i,:)=(abs(Na_campomedio(i,:)-Nateo));
    plot(lambda,desviacionNalambda(i,:))
end
legend('N=50','N=700')

% figure(9)
% bar(N,desviacionNa)

% title('Desviacion de N_a/N frente a N','FontSize',16)
% xlabel('N','FontSize',20)
% ylabel('desviación','FontSize',16);

end

```