

---

# Estudio de transiciones de fase cuánticas en sistemas de dos niveles

---



TESIS DOCTORAL

Pedro Pérez Fernández

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Facultad de Física

Universidad de Sevilla

Abril 2011

Documento maquetado con T<sub>E</sub>X<sup>I</sup>S v.1.0+.

# Estudio de transiciones de fase cuánticas en sistemas de dos niveles

*Memoria que presenta para optar al título de Doctor en Física*

**Pedro Pérez Fernández**

*Dirigida por los Doctores*

**D. José Miguel Arias Carrasco**

**D. Jorge Dukelsky Bercovich**

**D. Armando Relaño Pérez**

**Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear**

**Facultad de Física**

**Universidad de Sevilla**

**Abril 2011**



*A mis padres*



# Agradecimientos

El presente trabajo es aproximadamente el resultado de cuatro años de trabajo, aunque por el camino quedaron atrás también muchas ideas y cálculos que sirvieron para aprender nuevos conceptos y nuevas herramientas. Cuatro años que por otra parte han pasado muy rápidos, casi sin darme cuenta. De hecho, parece que fuera ayer cuando le pregunté a Pepe si estaría dispuesto a dirigirme una beca de colaboración. Es por ello que le quisiera dirigir mis primeras líneas de agradecimiento, por darme la oportunidad de trabajar con él, por estar siempre dispuesto a resolverme cualquier duda por insignificante que fuera y sobre todo por su amistad. Además de enseñarme física, me ha enseñado una metodología de trabajo, a ser más ordenado y a intentar ver todo desde un punto de vista más físico.

Tampoco me puedo olvidar de mis otros dos directores de tesis, Armando y Jorge. Agradecerles el buen recibimiento que me han dispensado en Madrid en todas las ocasiones en que he estado por allí, sus consejos para orientar el presente trabajo y también por su amistad.

Quisiera también agradecer a José Enrique por haberme facilitado muchos detalles técnicos tanto en el manejo del Mathematica, como con las transformaciones de Bogoliubov y la TDA cuando empecé a trabajar en esos temas.

A Curro, por toda su ayuda con el modelo vibrónico  $U(3)$  y su interés por querer aplicar todas las herramientas que había aprendido para llevar a cabo cálculos más allá de campo medio. Sin su ayuda, el capítulo 3 no hubiera sido posible.

A Pavel Cejnar, por haberme dado la oportunidad de trabajar con él, recibéndome en Praga y por transmitirme su contagioso entusiasmo por la física. El capítulo 5 se basa en lo aprendido y trabajado durante mi estancia con él, una estancia muy fructífera por otra parte. No me puedo olvidar de Michal Macek, amigo y compañero de trabajo, durante mi estancia en Praga. Agradecerle todas las conversaciones sobre física y buenos momentos pasados durante las excursiones que realizamos, aparte de resolverme algún que otro problemilla burocrático.

También me gustaría darle las gracias a Mark Caprio por recibirme en la universidad de Notre Dame. Y como siempre que se va a otro país es agradable encontrarse con gente que hable el mismo idioma, me gustaría agradecer a Antonio Delgado y a Jorge de Blas toda la ayuda prestada para que me sintiera más cómodo en los Estados Unidos. Por supuesto, tampoco podría olvidarme de Andrew Brinkerhoff, por todos aquellos lunes por la noche en el pub irlandés donde tocaba.

Quisiera expresar también mi gratitud hacia mis compañeros del departamento, por crear un ambiente de trabajo tan agradable. En especial quisiera mencionar a Antonio Moro, al que siempre le estoy dando la lata con mis problemas en linux y todos los programas que dejan de funcionar correctamente de una manera un tanto misteriosa. Cada vez estoy más convencido de que el ordenador necesita un formateo e instalarle Ubuntu. A Alberto, Juan y Mouloud, ellos han sabido crear un clima propicio para trabajar y juntos hemos compartido muchas horas de trabajo.

A Miguel, amigo y compañero de despacho, con el que he pasado muy buenos momentos en nuestros viajes durante los cursos de doctorado, muchas horas de trabajo compartidas y alguna que otra salida nocturna. Aparte de todos los almuerzos, cafés y paseos alrededor del campus.

A Nagi, por todo el entusiasmo que pone cuando discutimos de física y los buenos momentos que pasamos hablando de matemáticas, aparte también de todos los cafés, almuerzos y paseos alrededor del campus.

A Manuel, que aunque hace el doctorado en Alemania, siempre que podemos nos vemos. Por los buenos ratos que echamos en Munich, en Berlín y en Praga, aparte de cuando viene por Sevilla.

A Sergio, Andrés, Juanma, Eloy y Antonio (Braulio para los amigos), por su amistad que valoro mucho.

No me puedo olvidar de Lay, Raúl, JuanPi, Manoli, Antonio Lasanta, Armando, Rafa, Antonio “el químico”, también por todos los almuerzos y cafés.

Y tampoco quisiera olvidarme en general de todos aquellos amigos que tengo, tanto en el pueblo como aquí en Sevilla, de manera que hago extensivo mi agradecimiento a ellos también. En particular, quisiera mencionar por una parte a Haro, amigo y compañero de piso. Y por otra parte a Ángel, por todas aquellas fiestas los fines de semana.

A Marián, por su amistad, los buenos ratos que hemos echado o bien tomando café o almorzando, por su interés por la física y en saber en qué consiste mi trabajo, porque cuando le hablé acerca del concepto de la decoherencia quedó encantada, a ella le dedico en especial el capítulo 2.

Y finalmente agradecer a mi padres tanto su apoyo como la confianza



depositada en mí. Gracias a ellos por haberme dejado estudiar lo que yo deseaba. A ellos dedico este trabajo.



# List of publications and contributions

## Publications

- A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos, and P. Pérez-Fernández, Phys. Rev. A **78**, 060102(R) (2008).
- P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos, Phys. Rev. A **78**, 032111 (2009).
- J. E. García-Ramos, J. M. Arias, J. Dukelsky, P. Pérez-Fernández, and A. Relaño, AIP Conference Proceedings Series **1165**, 207-210 (2009).
- P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos, AIP Conference Proceedings Series. **1231**, 233-234 (2010).
- P. Pérez-Fernández, P. Cejnar, J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos, and A. Relaño, Phys. Rev. A **83**, 033802 (2011).
- F. Pérez-Bernal, O. Álvarez-Bajo, J. M. Arias, M. Carvajal, J. E. García-Ramos, D. Larese, P. Pérez-Fernández, Journal of Physics: Conference Series **284** (2011) 012049.
- P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, P. Cejnar, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos. Phys. Rev. E **83**, 046208 (2011).
- P. Pérez-Fernández, J. M. Arias, J. E. García-Ramos, F. Pérez-Bernal. *Finite-size corrections in the bosonic algebraic approach to two-dimensional systems*. Accepted to be published in Physical Review A.

## Contributions to conferences

- III Spanish Nuclear Physics meeting (EFN08), Santiago de Compostela (Spain, 2008). Poster entitled *Decoherence as a signature of an Excited State Quantum Phase Transition*.
- Workshop: Symmetries and Quantum Phase Transitions in nuclear collective models, Sevilla (Spain, 2009). Talk entitled *Quantum Phase Transitions in the Vibron model*.
- International Scientific Meeting on Nuclear Physics (Rábida 2009), La Rábida (Huelva, Spain). Poster entitled *Connection between decoherence and Excited State Quantum Phase Transition*.
- 21<sup>st</sup> Indian Summer School of Physics “Nuclear Many-Body Problem”, Rez (Prague, 2009). Talk entitled *Decoherence and Excited State Quantum Phase Transitions*.
- Workshop: Quantum Phase Transitions in Molecular and Nuclear Structure, Huelva (Spain, 2009). Talk entitled *ESQPTs and Quantum Quenches in Dicke-like models*.
- V Spanish Nuclear Physics meeting, El Escorial (Madrid, Spain, 2010). Talk entitled *Excited State Quantum Phase Transitions and Quantum Quenches in the Dicke-like models*.

# Abstract

The study of phase transitions in systems whose accurate description requires a quantum treatment (QPT's) is a topical issue in almost all branches of Physics. In general, the study of phase transitions in physical systems is a difficult task, since in this situation, the structural changes occur very quickly. The QPT's are of great interest in different systems consisting of interacting particles in Condensed Matter, Quantum Optics, ultracold quantum gases and Nuclear Physics, among others. The QPT's, unlike the thermodynamic phase transitions, occur at zero temperature as a function of an external control parameter and its origin are the quantum fluctuations in the system. Although, strictly speaking, the QPT's occur for large systems in the thermodynamic limit, recently it has been proposed that traces of QPT's can also be observed in mesoscopic systems [1]. In this context, particular hamiltonians based on algebraic models are especially useful for the study of QPT's since they present certain dynamic symmetries which in the classical limit correspond to different equilibrium configurations in the ground state of the system. Thus, the algebraic models provide a useful tool for exploring phase transitions by using control parameters that allow us to govern the structure of the hamiltonian.

QPTs are singularities in the evolution of the ground state properties of a system as a hamiltonian parameter is varied and have been extensively studied for various many-body systems [2-4]. The hamiltonians that appear in this work can be written in general as

$$\hat{H}(\alpha) = \alpha\hat{H}_1 + (\alpha - 1)\hat{H}_2, \quad (1)$$

where  $\alpha \in [0, 1]$  is the control parameter and  $\hat{H}_1$  and  $\hat{H}_2$  are hamiltonians with a specific dynamic symmetry. If  $\alpha = 1$  or  $\alpha = 0$ , then  $\hat{H}(\alpha)$  has the dynamic symmetry  $\hat{H}_1$  or  $\hat{H}_2$  respectively. For values of  $\alpha$  between 0 and 1 a competition between both symmetries occur. For a particular value of the control parameter  $\alpha_c$  the ground state changes from one symmetry limit to the other and it is said that a QPT is produced. The point at which such a structural change takes place is known as critical point.

At the critical point  $\alpha = \alpha_c$  it is observed that:

1. The ground state energy  $E_0$  is nonanalytic as a function of the control parameter  $\alpha$ .
2. The ground state wave function properties, expressed via order parameters, such as the ground state expectation values  $\langle \hat{H}_1 \rangle_0$  or  $\langle \hat{H}_2 \rangle_0$ , are nonanalytic. Moreover, these two properties are not independent, since the evolution of the ground state energy and that of the order parameters are directly related by the Feynman-Hellmann theorem [5], which gives

$$\frac{dE_0}{d\alpha} = \langle \hat{H}_1 \rangle_0 + \langle \hat{H}_2 \rangle_0. \quad (2)$$

3. For a continuous phase transition, the gap,  $\Delta$ , between the ground state and the first excited state vanishes.

The singularities occur only for an infinite number of particles in many-body systems. For a finite number of particles,  $N$ , the defining characteristics of a QPT is therefore not shown up as a true singularity but rather as a well-defined scaling behavior in the relevant quantities when they tend to the large  $N$ -limit.

Recently, a singular behavior similar to the one observed in a QPT has been observed for excited states of certain types of many-body models [6–13]. This singular behavior has been named as excited state quantum phase transitions (ESQPTs) [11]. Therefore, an ESQPT is defined as a nonanalytical evolution of an excited state of the system when the control parameter of the hamiltonian is varied. It is similar to a quantum phase transition in the ground state but affecting the excited states.

On the other hand, real quantum systems always interact with the environment. This interaction leads to decoherence, the process by which quantum information is degraded and purely quantum properties of a system are lost. Decoherence provides a theoretical basis for the quantum-classical transition [14], emerging as a possible explanation of the quantum origin of the classical world. It is also a major obstacle for building a quantum computer since it can produce loss of the quantum character of the computer. Therefore a complete characterization of the decoherence process and its relation with the physical properties of the system and the environment is needed for both fundamental and practical purposes.

Another concept related to the temporal evolution of the system is the quantum quench. A quantum quench is an abrupt change in time of one of the system control parameters. This sudden change is followed by a relaxation process which is characteristic of the system. We have studied such a process in several models of interest in Quantum Optics.

In this work, both QPTs and ESQPTs in several two-level quantum systems are studied. The characteristics of the corresponding critical points and the relationship of ESQPT's with decoherence or quantum quenches are discussed.

The structure of the thesis is the following. First, the prefatory initial chapters in which several tools needed for the development of this thesis are revised, as mean field and beyond mean field methods, the concepts of quantum decoherence and density matrix, etc. Then, the three main chapters are developed, one in relation with the Vibron Model, another related to the Lipkin model, and the last one concerned to the Dicke, Jaynes-Cummings and related models. The final chapter is devoted to the summary and conclusions. Below, the main aspects of the central chapters are presented.

Chapter 3 can be split into two blocks. The first block is devoted to the Vibron Model, also known as the  $U(4)$  model, and the second one is devoted to its  $2D$  limit, the  $U(3)$  model. In both blocks, we will describe the algebraic properties of the two models and how the different dynamical symmetry chains are obtained. These models show a QPT and using the intrinsic state formalism we will study the phase transition between the

symmetric and the nonsymmetry phases. However, it is well known that this method is correct just in the thermodynamic limit, ie, in the leading order in an expansion as a function of  $N$ , being  $N$  the number of bosons. We will use the method developed in reference [15] to go beyond that order and calculate finite size corrections to several spectroscopic magnitudes. For this purpose, we will introduce the Holstein-Primakoff transformation which will provide a expansion of the hamiltonian in powers of  $N$ . In this work we will keep just the higher order terms:  $N$ ,  $N^{1/2}$  y  $N^0$ . After tuncating tha Holstein-Primakoff expansion of the hamiltonian, we will be able to diagonalize it by using a Bogoliubov transformation. With this method, we will get analytical expresions for several observables such as the ground state energy or the gap among others. Finally, finite-size scaling exponent values are also derived for several observables of interest.

The Chapter 4 is devoted to another two-level system, the Lipkin model. This model is closely related with the Vibron model as discussed in Chapter 3. This relationship is even more evident when using intrinsic states to study their phase diagrams. In fact we can say that a Vibron model with axial symmetry behaves like a Lipkin model. For this reason, all the studies carried out within the mean field limit for the Vibron model can be translated to the Lipkin model, and the expressions obtained are formally equal. Thus, in this chapter we will focus on the influence of a quantum phase transition on the phenomenon of decoherence. It is known that this model shows both a QPT and an ESQPT and, depending on the value of the control parameters of the system, it can be first or second order. Thus, the analysis will be presented for both types of transitions. For this purpose, we imaging a system consisting of a qubit interacting with a bosonic bath described by the Lipkin model. A mean-field method based on the Tamm-Dankoff approximation is worked out in order to understand the observed behaviour of the decoherence. All results will be compared with the exact solution of the problem and the relationship between the phase transition that the system undergoes and the decoherence phenomenon will be analyzed. It is also included a study of the finite size scaling behaviour of the decoherence factor.

In the Chapter 5 we will study three models that describe a single



---

bosonic field interacting with an algebraic subsystem based either in the algebra  $SU(1,1)$  or  $SU(2)$ . The model based on algebra  $SU(1,1)$  is a useful toy model to describe the formation and dissociation of diatomic molecules and single atoms [16]. The  $SU(2)$  hamiltonian represents either the Dicke or the Jaynes-Cummings (JC) models [17]. These models are of interest in Quantum Optics and they describe a system of  $N$  noninteracting two-level atoms under the action of a single mode radiation field. While the  $SU(1,1)$  model and the Jaynes-Cummings model are integrable, the Dicke model is not. A common feature in these models is that they are two-level systems having a QPT. In this work, we will show that they also present ESQPTs. We first discuss the phase transitions in relation with a semiclassical approximation, in particular those related to the excited states phase transitions. Then, we introduce the concept of quantum quench, analyzing the influence of an ESQPT on it. Finally, we will relate the presence of quantum chaos in the nonintegrable Dicke model with the presence of ESQPT precursors.

In the last chapter the summary of the work and the main conclusions achieved in this study are presented.



# Introducción

El estudio de transiciones de fase en sistemas cuya descripción correcta requiere un tratamiento cuántico (QPT's) es un tema de actualidad en casi todas las ramas de la física. Por lo general, el estudio de las transiciones de fase en sistemas físicos es una tarea difícil, ya que en esa situación los cambios estructurales ocurren muy rápidamente. Las QPT's son de gran interés en diferentes sistemas formados por partículas en interacción en Materia Condensada, Óptica Cuántica, gases cuánticos ultrafríos y Física Nuclear, entre otros. Las QPT's, a diferencia de las transiciones de fase termodinámicas, ocurren a temperatura cero como función de un parámetro de control externo y su origen se encuentra en las fluctuaciones cuánticas del sistema. Aunque, estrictamente hablando, las QPT's ocurren para sistemas grandes en el límite termodinámico, recientemente se ha propuesto que también se pueden observar trazas de QPT's en sistemas mesoscópicos [1]. En este contexto, la formulación de hamiltonianos particulares basados en modelos algebraicos es especialmente útil ya que presentan ciertas simetrías dinámicas que, en el límite clásico, se corresponden con diferentes configuraciones de equilibrio en el estado fundamental del sistema. Así pues, los modelos algebraicos proporcionan una herramienta muy útil para explorar transiciones de fase mediante el empleo de algunos parámetros de control que permiten gobernar la estructura del hamiltoniano.

Las transiciones de fase cuánticas, que se manifiestan en una evolución no analítica del estado fundamental del sistema conforme se varía el parámetro de control del sistema, han sido ampliamente estudiadas para diversos sistemas de muchos cuerpos [2-4]. Los hamiltonianos que aparecen en este

trabajo se pueden escribir del modo general

$$\hat{H}(\alpha) = \alpha\hat{H}_1 + (\alpha - 1)\hat{H}_2, \quad (3)$$

donde  $\alpha \in [0, 1]$  es el parámetro de control y  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  son hamiltonianos con una simetría dinámica dada. Si  $\alpha = 1$  ó  $\alpha = 0$ , entonces  $\hat{H}(\alpha)$  se encuentra en la simetría dinámica  $\hat{H}_1$  ó  $\hat{H}_2$  respectivamente. Para valores de  $\alpha$  intermedios se produce una transición entre ambas simetrías dinámicas.

En el punto crítico  $\alpha = \alpha_c$  se observa que:

1. La energía del estado fundamental,  $E_0$ , no es analítica como función del parámetro de control  $\alpha$ .
2. Las propiedades de la función de onda del estado fundamental, expresadas por medio de los parámetros de orden tales como los valores esperados  $\langle \hat{H}_1 \rangle_0$  ó  $\langle \hat{H}_2 \rangle_0$ , son no analíticas. Además, estas dos propiedades no son independientes ya que la evolución de la energía del estado fundamental y de los parámetros de orden están relacionados por el teorema de Feynman-Hellman [5], el cual da

$$\frac{dE_0}{d\alpha} = \langle \hat{H}_1 \rangle_0 + \langle \hat{H}_2 \rangle_0. \quad (4)$$

3. El gap  $\Delta$  entre el estado fundamental y el primer estado excitado se hace cero cuando la transición de fase es continua.

Las singularidades únicamente se dan para un número infinito de partículas en sistemas de muchos cuerpos. Para un número  $N$  finito de partículas la característica que define la QPT no es, por tanto, la presencia de una auténtica singularidad sino más bien un comportamiento de escala bien definido de las magnitudes relevantes cuando éstas tienden al límite de  $N$  grande [18].

Recientemente, un comportamiento singular análogo al de la QPT se ha observado para estados excitados del espectro de ciertos tipos de modelos de muchos cuerpos [6–13]. Este comportamiento singular ha sido denominado transición de fase cuántica en estados excitados (ESQPTs) [11]. Así, se define

una ESQPT como una evolución no analítica de los estados excitados del sistema conforme varía un parámetro de control del hamiltoniano, es similar a una transición de fase cuántica pero afectando a los estados excitados. Además, se puede distinguir entre dos tipos de ESQPTs. Tal y como se dice en la referencia [19], en el límite termodinámico, un cruce de dos niveles a la energía crítica  $E_c$  en la cual se produce la ESQPT determina una ESQPT de primer orden, mientras que si el número de niveles que interactúan es localmente grande a la energía  $E_c$  pero sin que se produzca un cruce real, entonces la ESQPT es continua. Esta acumulación de niveles para la ESQPT continua da lugar a una densidad local de niveles infinita que se propaga conforme se va variando el parámetro de control  $\alpha$ . Puesto que la entropía de un sistema cuántico está relacionada con su densidad de estados, se puede establecer una relación en el límite termodinámico entre una ESQPT y una transición de fase estándar a una cierta temperatura crítica [13]. Estos tipos de transiciones de fase se han identificado en el modelo de Lipkin [7, 8, 12], en el modelo de bosones interactuantes [9–11], y en hamiltonianos de dos niveles de pairing bosónicos y fermiónicos [13]. También, se han encontrado en sistemas cuánticos unidimensionales y bidimensionales, para los que un análisis semiclásico establece que tanto las ESQPTs de primer como de segundo orden están presentes [20].

Por otra parte, los sistemas cuánticos siempre interactúan con el ambiente que los rodea. Dicha interacción es la que produce la decoherencia, es decir, el proceso por el cual la información cuántica se degrada y se pierden las propiedades puramente cuánticas de un sistema. La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial lineal, por consiguiente cualquier combinación lineal de sus soluciones es también solución del problema. Así, en general, es posible tener un estado cuántico que sea una superposición de estados cuánticos. Sin embargo, tal estado no se observa en el mundo clásico. Aquí es donde entra en juego la interpretación de la decoherencia de la Mecánica Cuántica, según la cual este fenómeno se debe a la interacción con el entorno, que destruye las correlaciones cuánticas entre los estados del sistema, estableciéndose un tránsito desde una superposición de estados cuánticos a una mezcla de estados clásicos. Además, sólo un pequeño conjunto

de todos los estados cuánticos forman parte de la mezcla clásica, son los conocidos como estados punteros [14]

Desde un punto de vista fundamental, el estudio de la decoherencia es importante por varios motivos:

- a) Proporciona una base teórica para el proceso de transición entre el mundo cuántico y el clásico [14], siendo por tanto una posible explicación del origen cuántico del mundo clásico.
- b) Desde un punto de vista práctico, la decoherencia es el mayor obstáculo para la construcción de un ordenador cuántico [21] ya que implica la pérdida de entrelazamiento cuántico.

Así pues, por motivos tanto teóricos como prácticos es necesaria una caracterización completa del proceso de la decoherencia y entender su relación con las propiedades físicas del sistema y del ambiente con el que interacciona.

En el presente trabajo se caracterizarán las transiciones de fase cuánticas para sistemas de dos niveles, tanto integrables como no integrables. En particular se analizarán el modelo vibrónico y su límite  $2D$  [22, 23], de interés en física molecular, el modelo de Lipkin [24–26], cuyo origen está en la Física Nuclear y modelos del tipo Dicke [17, 27], de interés en Óptica Cuántica. Además se investigará la relación existente entre transiciones de fase y decoherencia en el modelo de Lipkin, y su influencia en la evolución temporal tras un *quantum quench*<sup>1</sup> en los modelos tipo Dicke. En realidad, tal y como definimos los modelos, decoherencia y *quantum quench* están íntimamente relacionados, matemáticamente hablando, pero conceptualmente son totalmente diferentes. En efecto, tal y como se verá en los capítulos 4 y 5 respectivamente, la conexión de una partícula extra a un sistema de  $N$  partículas, como hacemos con el modelo de Lipkin, conlleva un cambio brusco en este último muy parecido al que experimentan los modelos del tipo Dicke

---

<sup>1</sup>Una *quantum quench* es un cambio abrupto, *diabático*, en el tiempo de uno de los parámetros de control del sistema, pasando éste de un valor inicial  $\alpha_1$  a otro final  $\alpha_2$  de un modo casi instantáneo. Este cambio súbito en el parámetro de control  $\alpha$  del sistema viene acompañado de un proceso cuántico de relajación dependiente del sistema específico analizado. En el capítulo 5 se realizará un estudio detallado de este fenómeno.

cuando se introduce un cambio repentino en el parámetro de control que gobierna los hamiltonianos para estudiar su evolución temporal. Aún así los resultados que se obtienen para ambos sistemas se pueden relacionar con la presencia de una transición de fase cuántica.

El trabajo se estructura en 6 capítulos. El capítulo 1 posee fundamentalmente un carácter de introducción teórica a las herramientas de campo medio que se usan en los diferentes modelos que se presentan, además de introducirse otros conceptos que aparecerán a lo largo del trabajo.

El capítulo 2 también constituye una introducción teórica en la que se realiza un breve análisis del concepto de la decoherencia y sus implicaciones en la Mecánica Cuántica, poniendo especial énfasis en el problema de la medida y cómo la introducción del ambiente permite una posible solución a dicho problema. En este capítulo se presentará la matriz densidad como herramienta básica de trabajo para estudiar el factor de decoherencia.

El capítulo 3 se puede dividir en dos bloques. Un primer bloque dedicado al modelo vibrónico  $U(4)$  y un segundo bloque dedicado a su límite  $2D$ , el modelo  $U(3)$ . En ambos bloques se expondrán las propiedades algebraicas de los dos modelos así como las diferentes cadenas de simetría que se obtienen. Estos modelos presentan una QPT y usando el formalismo de estados intrínsecos se estudiará la transición de fase entre la fase simétrica y la fase no simétrica. Sin embargo, se sabe que este método es correcto únicamente en el orden más alto en el desarrollo en potencias de  $N$ , donde  $N$  es el número de bosones. Nosotros nos basaremos en el método desarrollado en [15] para ir más allá de este orden y calcular correcciones de tamaño finito a varios observables espectroscópicos. Para ello, se introducirá la transformación de Holstein-Primakoff que proporcionará un hamiltoniano en serie de potencias de  $N$  donde únicamente se considerarán los términos en orden más alto:  $N$ ,  $N^{1/2}$  y  $N^0$ . Después, mediante el uso de una transformación de Bogoliubov se conseguirá la diagonalización del hamiltoniano, con lo que se obtendrán expresiones analíticas para el estudio del sistema tanto en la fase simétrica como en la no simétrica. Dichas expresiones analíticas se compararán posteriormente con los cálculos numéricos obtenidos de resolver el problema exactamente en una base adecuada. Además, se llevará a cabo un

estudio de escalado del sistema por tamaño finito que nos permitirá extraer los exponentes críticos de los observables espectroscópicos analizados.

El capítulo 4 está dedicado a otro sistema de dos niveles, el modelo de Lipkin. Este modelo guarda una estrecha relación con el modelo vibrónico tal y como se verá en el capítulo 3. Dicha relación quedará más patente con la elección que se realizará del estado intrínseco para estudiar el diagrama de fases del modelo vibrónico. De hecho podemos afirmar que un modelo vibrónico con simetría axial se comporta como un modelo de Lipkin. Por este motivo, todo el estudio que se realice en campo medio para el modelo vibrónico será aplicable al modelo de Lipkin, ya que las expresiones que se obtendrán son formalmente análogas. Así pues, en este capítulo nos centraremos en la influencia que tiene una transición de fase cuántica sobre el fenómeno de la decoherencia. Ahora bien, se sabe que el citado modelo presenta tanto una QPT como una ESQPT, y dependiendo del valor de los parámetros concretos del sistema, la ESQPT puede ser de primer o segundo orden. De modo que el análisis se realizará para ambos tipos de transición. Para tal propósito, se presenta un sistema constituido por un qubit interactuando con un baño bosónico que vendrá descrito por el modelo de Lipkin. El estudio de la decoherencia se realizará tanto empleando las técnicas más allá de campo medio desarrolladas en el modelo vibrónico, como usando la aproximación de Tamm-Dancoff (TDA) [28] y TDA a segundo orden. Todos los resultados se compararán una vez más con la solución exacta del problema y se analizará la relación entre la transición de fase que experimenta dicho sistema con la decoherencia. Además se incluirá un estudio de escalado por tamaño finito del factor de decoherencia.

En el capítulo 5 se estudiarán tres modelos que describen un campo bosónico de un único modo interactuando con un subsistema algebraico basado o bien en el álgebra  $SU(1, 1)$  o en el  $SU(2)$ . El modelo  $SU(1, 1)$  es un modelo de juguete útil para la descripción de la formación y disociación de moléculas diatómicas y átomos independientes [16]. El hamiltoniano  $SU(2)$  representa al modelo de Dicke [27] o al modelo de Jaynes-Cummings (JC) [17] (también conocido como modelo de Tavis-Cummings [29]). Estos dos últimos modelos poseen interés en Óptica Cuántica y describen a un sistema



---

de átomos susceptibles a ocupar dos niveles interactuando con un campo de radiación. Mientras que el modelo  $SU(1, 1)$  y el modelo de Jaynes-Cummings son integrables, el modelo de Dicke no lo es. Todos ellos son sistemas de dos niveles que presentan tanto una QPT como una ESQPT. Así pues, en primer lugar se analizarán las transiciones de fase con una aproximación semiclásica, en particular las relacionadas con las transiciones de fase de estados excitados. Después se introducirá el concepto de *quantum quench*, analizándose la influencia que tiene una ESQPT sobre éste. Por último, relacionaremos la presencia de caos cuántico en el modelo no integrable de Dicke con los precursores de la ESQPT en el mismo.

En el último capítulo se presentará un resumen y las conclusiones de los principales resultados de este trabajo.



# Índice

<b>Agradecimientos</b>	<b>VII</b>
<b>List of publications and contributions</b>	<b>XI</b>
<b>Abstract</b>	<b>XIII</b>
<b>Introducción</b>	<b>XIX</b>
<b>1. Conceptos básicos</b>	<b>1</b>
1.1. Aproximaciones de campo medio . . . . .	3
1.1.1. Aproximación de Hartree-Fock para sistemas de fermiones . . . . .	3
1.1.2. Aproximación de Hartree-Fock para sistemas de bosones	5
1.2. Aproximación de Tamm-Dancoff (TDA) . . . . .	9
1.3. Exponentes críticos . . . . .	11
1.4. Representaciones bosónicas de álgebras de Lie . . . . .	13
1.5. Integrabilidad y caos cuántico . . . . .	14
<b>2. Mecánica cuántica y decoherencia</b>	<b>19</b>
2.1. El problema de la medida . . . . .	21
2.2. Matriz densidad . . . . .	23
2.2.1. Matriz densidad reducida . . . . .	26
2.3. Decoherencia . . . . .	26
2.3.1. El problema de la medida con el entorno . . . . .	29

<b>3. QPT en el modelo vibrónico <math>U(4)</math> y en el modelo <math>U(3)</math></b>	<b>33</b>
3.1. Modelo algebraico $U(4)$ : modelo vibrónico . . . . .	36
3.1.1. Propiedades algebraicas del modelo vibrónico . . . . .	36
3.1.2. Estudio del modelo vibrónico en la aproximación de campo medio . . . . .	44
3.1.3. Estudio del modelo vibrónico en la aproximación de más allá de campo medio . . . . .	48
3.1.4. Solución exacta del modelo vibrónico . . . . .	57
3.1.5. Comparación con los resultados numéricos . . . . .	60
3.1.6. Corrección por número finito de partículas en el punto crítico . . . . .	65
3.2. Modelo algebraico $U(3)$ : El límite $2D$ del modelo vibrónico . .	69
3.2.1. El hamiltoniano del modelo algebraico $U(3)$ y su límite clásico . . . . .	70
3.2.2. Estudio del modelo $U(3)$ en la aproximación de campo medio . . . . .	76
3.2.3. Estudio del modelo $U(3)$ en la aproximación de más allá de campo medio . . . . .	83
3.2.4. Comparación con los resultados numéricos . . . . .	92
3.2.5. Propiedades de escalado por tamaño finito para el modelo vibrónico $U(3)$ . . . . .	101
3.3. Resumen y conclusiones . . . . .	104
 <b>4. ESQPTs y decoherencia: modelo de Lipkin</b>	 <b>107</b>
4.1. El modelo para el estudio de la decoherencia . . . . .	110
4.1.1. Teoría de campo medio para $\hat{H}_E$ , hamiltoniano del modelo de Lipkin . . . . .	110
4.1.2. Acoplamiento del entorno con el qubit . . . . .	122
4.2. Cálculo de la decoherencia . . . . .	125
4.2.1. Cálculo exacto de la decoherencia . . . . .	127
4.2.2. Cálculo de la decoherencia en la aproximación más allá de campo medio . . . . .	129

---

4.2.3. Cálculo de la decoherencia en el marco del campo medio usando la TDA . . . . .	133
4.3. Resultados . . . . .	140
4.3.1. Factor de decoherencia para la ESQPT continua . . . . .	142
4.3.2. Factor de decoherencia para la ESQPT de primer orden	151
4.4. Resumen y conclusiones . . . . .	151
<b>5. ESQPTs en el modelo de Dicke y modelos relacionados</b>	<b>155</b>
5.1. Estructura algebraica para el modelo de Dicke y JC . . . . .	158
5.1.1. Modelo $SU(1,1)$ . . . . .	160
5.1.2. Modelo $SU(2)$ . . . . .	162
5.2. Solución numérica de los modelos $SU(1,1)$ y $SU(2)$ . . . . .	165
5.3. Caracterización de las QPTs en los modelos $SU(1,1)$ y $SU(2)$	167
5.3.1. Transición de fase en el estado fundamental de los modelos $SU(2)$ y $SU(1,1)$ . . . . .	171
5.3.2. Transición de fase de estados excitados en los modelos $SU(2)$ y $SU(1,1)$ . . . . .	176
5.3.3. Estudio de los exponentes críticos de $\langle \hat{J}_z \rangle$ para el modelo $SU(2)$ . . . . .	180
5.4. Dinámica del <i>quench</i> . . . . .	182
5.4.1. Probabilidad de supervivencia y distribución de energía	183
5.4.2. Análisis del <i>quench</i> crítico . . . . .	186
5.5. Resultados de la dinámica del <i>quench</i> . . . . .	188
5.5.1. Resultados para los modelos integrables $SU(1,1)$ y Jaynes-Cummings . . . . .	188
5.5.2. Resultados para el modelo de Dicke . . . . .	192
5.6. ESQPT y origen del caos cuántico en el modelo de Dicke y JC	195
5.7. Resumen y conclusiones . . . . .	199
<b>6. Síntesis y conclusiones</b>	<b>201</b>
<b>7. Summary and conclusions</b>	<b>209</b>

**Bibliografía**

**217**

# Capítulo 1

## Conceptos básicos

Uno de los principales objetivos del estudio de la física de sistemas cuánticos de muchos cuerpos en interacción es la comprensión de la estructura del sistema y de su dinámica. Con esta expresión se hace referencia a todos los aspectos de movimiento de las partículas, tales como las correlaciones entre ellas y las energías de enlace de unas respecto a otras. La descripción completa del sistema en términos matemáticos está contenida en la función de onda total. Sin embargo, está claro que hay grandes dificultades en la determinación tanto experimental como teórica del comportamiento de todos los grados de libertad de un sistema dinámico de gran complejidad como puede ser, por ejemplo, un núcleo moderadamente pesado o una molécula poliatómica. A rasgos generales, un buen modelo teórico debe predecir las distintas propiedades observables del sistema de muchas partículas. De hecho, la prueba de la utilidad o realismo de cualquier modelo está sujeta a que sus predicciones sean confirmadas experimentalmente [30]. Básicamente en física de sistemas de muchos cuerpos en interacción se tienen dos tipos de modelos generales, a saber, modelos colectivos y modelos microscópicos.

- Los modelos colectivos tratan de explicar propiedades globales de los sistemas. Son modelos de tipo macroscópico que tratan de describir el sistema como un fluido, es decir, sólo interesa el movimiento colectivo de las partículas. Por ejemplo, en física nuclear existen dos modelos muy populares que explican algunas propiedades nucleares, el modelo

de la gota líquida y el modelo del gas de Fermi.

- En los modelos microscópicos, la estructura del sistema se describe en función de los grados de libertad de las partículas constituyentes. La función de onda del sistema será de la forma  $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_A)$  en donde  $q_i$  representa la posición  $\vec{r}_i$  y el espín  $s_i$  de la partícula  $i$ . Con esto, el hamiltoniano se construye sumando las energías cinéticas de las  $A$  partículas e incluyendo términos basados en interacciones de dos partículas a través de un potencial de dos cuerpos:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \hat{V}(i,j). \quad (1.1)$$

La forma del potencial partícula-partícula,  $V(i, j)$ , depende en general del problema que se quiera resolver. El verdadero reto es que la ecuación de Schrödinger, en los casos  $A \geq 4$  es complicada de resolver. Así, el enfoque que suele darse es el de las interacciones efectivas, en las que una partícula interacciona con un potencial promedio. Éste es el concepto que da lugar a la idea de modelos de partículas independientes, más fácil de abordar y que ha proporcionado muchos éxitos. [31]

Los sistemas cuánticos pueden estar constituidos por dos tipos de partículas, a saber, bosones y fermiones. Los bosones son partículas con espín entero, por consiguiente no cumplen el principio de exclusión de Pauli, y obedecen a la estadística de Bose-Einstein. Además, la función de onda total que describe un sistema de bosones es simétrica frente al intercambio de partículas idénticas. Por contraposición, los fermiones son partículas de espín semientero, por lo que obedecen el principio de exclusión de Pauli, y siguen la estadística de Fermi-Dirac. La función de onda total de un sistema de fermiones es antisimétrica frente al intercambio de partículas idénticas.

En general, las aproximaciones de campo medio juegan un papel muy importante en el estudio de sistemas de muchos cuerpos, y cuando hablamos de muchos cuerpos nos referimos a un sistema con un número de entre  $10$  ó  $10^{30}$  partículas. Usando por tanto las herramientas de campo medio reduci-



mos la dinámica de muchas partículas interactuantes entre sí a un sistema de partículas independientes moviéndose en un campo autoconsistente.

A continuación se presentará una breve revisión de las aproximaciones de campo medio tanto para sistemas fermiónicos como para sistemas bosónicos. En particular se tratará con especial detalle la aproximación de Hartree-Fock para un sistema de bosones, ya que en la mayoría de los modelos con los que se trabajará se puede establecer una aplicación con un sistema bosónico [32]. Por último, una vez que se construye el estado fundamental del sistema dentro del marco del campo medio es necesario estudiar sus posibles estados excitados. Con tal objetivo se introduce la aproximación de Tamm-Dancoff (TDA), la cual será de gran importancia para analizar la relación entre transición de fase y decoherencia, o simplemente para calcular el gap de energía de estados excitados.

## 1.1. Aproximaciones de campo medio

En esta sección nos centraremos principalmente en dos herramientas que darán soporte al trabajo que se expondrá más adelante: la aproximación de Hartree-Fock para un sistema de fermiones y de bosones.

### 1.1.1. Aproximación de Hartree-Fock para sistemas de fermiones

Si se acepta que existe un potencial promedio, que en adelante llamaremos potencial Hartree-Fock, en el que las partículas se comportan como independientes, entonces el hamiltoniano del sistema se podría expresar como:

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{i=1}^A \hat{h}(i) = \sum_{i=1}^A (\hat{t}_i + \hat{v}_{\text{HF}}^i), \quad (1.2)$$

donde  $A$  es el número total de partículas,  $\hat{h}(i)$  es el hamiltoniano de cada partícula sometida a dicho campo promedio,  $\hat{t}_i$  es la energía cinética de cada partícula y  $\hat{v}_{\text{HF}}^i$  es el potencial Hartree-Fock, que por el momento es

desconocido. La ecuación de autovalores que habrá que resolver es,

$$\hat{H}_{\text{HF}}\Phi = E\Phi. \quad (1.3)$$

En el citado problema de autovalores (1.3) existe una autofunción  $\Phi_0$  a la que se le asocia el autovalor más bajo  $E_0$ . Tal autofunción se toma como una aproximación a la función exacta del estado fundamental. Además, se admite que  $\Phi_0$  es un determinante de Slater,

$$|\text{HF}\rangle = |\Phi_0\rangle = \left\| \prod_{i=1}^A a_i^\dagger \right\| |0\rangle, \quad (1.4)$$

donde los operadores de creación y aniquilación fermiónicos  $a_k^\dagger$ ,  $a_k$  están asociados a las funciones de onda monoparticulares,  $\phi_k$ , las cuales a su vez son autofunciones del hamiltoniano monoparticular  $\hat{h}(i)$  es decir <sup>1</sup>,

$$\hat{h}(i)\phi_k(i) = \epsilon_k\phi_k(i). \quad (1.5)$$

En resumen,  $|\text{HF}\rangle$  se escribe como un producto de funciones de onda monoparticulares, cada una de ellas correspondientes a un estado distinto con una energía distinta. Así, la energía de  $|\text{HF}\rangle$  es la suma de las energías de las partículas independientes, y el estado fundamental es el correspondiente a las  $A$  energías más bajas. Por consiguiente, ocupando los  $A$  niveles más bajos del estado  $|\text{HF}\rangle$  se consigue tener el nivel energético más bajo del sistema dado, esto es, su estado fundamental. En lo que sigue se usará la notación de [28] y [33] de modo que se caracterizarán los estados ocupados de  $|\text{HF}\rangle$  por los índices  $i$ ,  $j$  (estados de huecos) que tomarán los valores de 1 hasta  $A$ , donde  $A$  es, como sabemos, el número de estados ocupados. Por otra parte, se designará con los índices  $m$  y  $n$  a los estados desocupados (estados de partículas) que se encuentran por encima del nivel de Fermi de nuestro sistema. Estos últimos índices podrán tomar los valores comprendidos entre  $A$  y  $\infty$ . Si no se especifica nada, las letras  $k$  y  $l$  se usarán sin ninguna restricción

---

<sup>1</sup>Recordemos que con la etiqueta  $i$  nos estamos refiriendo implícitamente a todos los grados de libertad de la partícula (posición, espín, etc).

pudiendo tomar cualquier valor comprendido entre 1 y  $\infty$ .

Sin embargo, puesto que no se conoce el potencial Hartree-Fock no se pueden calcular los niveles energéticos de monopartículas de la ecuación (1.5). El método Hartree-Fock [34, 35] se define del siguiente modo. Haciendo uso del teorema variacional de Ritz [36], existe un método para optimizar la solución de la ecuación propuesta minimizando la energía total del sistema. Éste consiste en minimizar la energía total del sistema respecto a los orbitales de monopartículas, lo que nos proporcionará la ecuación de Hartree-Fock<sup>2</sup>.

Las ecuaciones de Hartree-Fock constituyen un problema autoconsistente en el sentido de que las funciones de onda determinan el campo medio y viceversa. En la práctica el modo de resolverlas es partir de un conjunto completo de funciones de onda de prueba tipo oscilador armónico y determinar el campo medio que se genera. Resolviendo las ecuaciones de nuevo con el potencial obtenido determinamos un nuevo conjunto completo de funciones de onda que, a su vez, determinarán un nuevo campo medio. Este proceso se repite reiteradamente hasta que se logra una cierta convergencia en las funciones de onda. Como ejemplo de métodos numéricos para resolver las ecuaciones de Hartree-Fock puede consultarse [37].

### 1.1.2. Aproximación de Hartree-Fock para sistemas de bosones

En la sección anterior se ha resumido la aproximación de Hartree-Fock para campo medio puesto que es algo más o menos conocido. En esta sección se pretende justificar que, de manera análoga a cómo se hace para un sistema de fermiones, también se puede introducir un campo medio para un sistema de bosones y que se conoce como aproximación de Hartree-Bose. Al tratarse de una aproximación menos conocida que la de Hartree-Fock, detallaremos un poco más su cálculo.

Cuando se tiene un sistema de bosones, la determinación de las ecuaciones de Hartree-Fock es similar al caso del sistema con fermiones en el sentido de

---

<sup>2</sup>Para una deducción detallada de la ecuación pueden consultarse por ejemplo los libros [28, 33, 36].

que se vuelve a partir del principio variacional de Ritz, sólo que esta vez se propone como función de prueba un condensado bosónico en el que las  $N$  partículas están en el mismo orbital  $\lambda$ ,

$$|\text{HB}\rangle = |\phi_N\rangle = \frac{(\Gamma_\lambda^\dagger)^N}{\sqrt{N!}}|0\rangle, \quad (1.6)$$

donde los operadores bosónicos  $\Gamma_\lambda^\dagger, \Gamma_\lambda$  corresponden a las funciones de onda monoparticulares  $\phi_\lambda$ . Nos referiremos a este caso como Hartree-Bose (HB) [38] para distinguirlo de la situación en la que se tiene un sistema fermiónico. Cuando todos los bosones están en su estado energético más bajo  $\lambda = 0$ , en el estado  $|\text{HB}\rangle$ , se consigue tener el nivel energético más bajo del sistema dado, esto es, su estado fundamental. Si  $|\phi_N\rangle$  se corresponde con una solución del problema HB, cualquier variación sobre el mismo únicamente incrementará el valor esperado de la energía del estado fundamental. La variación más general del tipo (1.6) de un sistema de muchos cuerpos, no ortogonal, se puede determinar como

$$|\phi'_N\rangle = \mathcal{N}^{-N} e^\theta |\phi_N\rangle, \quad (1.7)$$

siendo  $\theta = \sum_p C_p \Gamma_p^\dagger \Gamma_0$  y  $\mathcal{N} = (1 + \sum_p |C_p|^2)^{1/2}$  con  $p \neq 0$ .  $C_p$  son coeficientes reales arbitrarios y  $p$  ( $\neq 0$ ) etiqueta estados de bosones individuales que junto con  $\Gamma_0^\dagger$  constituyen un conjunto completo de estados HB. Se demuestra que  $|\phi'_N\rangle$  puede expresarse como un estado coherente de bosones al igual que (1.6) [38].

Los argumentos variacionales para definir el hamiltoniano de Hartree-Bose son análogos a los del caso Hartree-Fock. Primero se calcula el valor esperado del hamiltoniano con la función de onda  $|\phi'_N\rangle$  hasta incluir términos de segundo orden en  $\theta$ , así se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \phi'_N | \hat{H} | \phi'_N \rangle &= \mathcal{N}^{-2N} (\langle \phi_N | \hat{H} | \phi_N \rangle + \langle \phi_N | \theta^\dagger \hat{H} + \hat{H} \theta | \phi_N \rangle \\ &+ \langle \phi_N | \theta^\dagger \hat{H} \theta + \frac{1}{2} \theta^{\dagger 2} \hat{H} + \frac{1}{2} \hat{H} \theta^2 | \phi_N \rangle + \dots). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Para fijar ideas, en el hamiltoniano que aparece en la ecuación (1.8) se acepta que tiene como mucho términos de interacción residual hasta dos cuerpos. El hamiltoniano se puede expresar entonces como

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \gamma_i^\dagger \gamma_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{Sim} \gamma_i^\dagger \gamma_j^\dagger \gamma_l \gamma_k. \quad (1.9)$$

Se usa una notación diferente para los bosones de creación y destrucción  $\gamma_i^\dagger$ ,  $\gamma_j$  para resaltar el hecho de que están escritos en alguna base de referencia estándar etiquetada  $i, j, \dots$ .

La condición de que el valor esperado  $\langle \phi_N | \hat{H} | \phi_N \rangle$  sea un valor estacionario para la energía del estado fundamental es equivalente a imponer que los términos lineales en  $\theta$  que aparecen en la ecuación (1.8) sean cero,

$$\langle \phi_N | \theta^\dagger \hat{H} + \hat{H} \theta | \phi_N \rangle = 0. \quad (1.10)$$

Los términos cuadráticos ayudan a su vez a imponer la condición de estabilidad del mínimo de HB.

Para imponer la condición (1.10) empleamos como parámetros variacionales los coeficientes de transformación  $\eta$  que relacionan la base autoconsistente de HB con la base de referencia en la que el hamiltoniano (1.9) viene expresado:

$$\Gamma_0^\dagger = \sum_i \eta_{0,i}^* \gamma_i^\dagger, \quad (1.11)$$

$$\Gamma_p^\dagger = \sum_i \eta_{p,i}^* \gamma_p^\dagger \quad (p \neq 0), \quad (1.12)$$

$$\sum_i \eta_{u,i}^* \eta_{v,i} = \delta_{u,v}, \quad \sum_v \eta_{v,i}^* \eta_{v,j} = \delta_{i,j} \quad (u, v = 0, p). \quad (1.13)$$

La condición de ortogonalidad (1.13) surge de la condición de que la transformación (1.12) debe preservar las relaciones de conmutación. Con ayuda de las ecuaciones (1.11) y (1.12), el hamiltoniano (1.9) se puede

expresar como

$$\hat{H} = \hat{H}_{00} + \hat{H}_{10} + \hat{H}_{01} + \hat{H}_{11} + \hat{H}_{02} + \hat{H}_{20} + \hat{H}_{21} + \hat{H}_{12} + \hat{H}_{22}, \quad (1.14)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{00} &= \sum_{ik} t_{ik} \eta_{0,i} \eta_{0,k}^* \Gamma_0^\dagger \Gamma_0 \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{(Sim)} \eta_{0,i} \eta_{0,j} \eta_{0,k}^* \eta_{0,l}^* \Gamma_0^\dagger \Gamma_0^\dagger \Gamma_0 \Gamma_0, \end{aligned} \quad (1.15a)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{01} &= \hat{H}_{10}^\dagger = \sum_p \left( \sum_{ik} t_{ik} \eta_{p,i} \eta_{0,k}^* \Gamma_p^\dagger \Gamma_0 \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{(Sim)} \eta_{p,i} \eta_{0,j} \eta_{0,k}^* \eta_{0,l}^* \Gamma_p^\dagger \Gamma_0^\dagger \Gamma_0 \Gamma_0 \right), \end{aligned} \quad (1.15b)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{11} &= \sum_{pq} \left( \sum_{ik} t_{ik} \eta_{p,i} \eta_{q,k}^* \Gamma_p^\dagger \Gamma_p \right. \\ &+ \left. \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{(Sim)} \eta_{0,i} \eta_{p,j} \eta_{q,k}^* \eta_{0,l}^* \Gamma_0^\dagger \Gamma_0^\dagger \Gamma_q \Gamma_0 \right), \end{aligned} \quad (1.15c)$$

$$\hat{H}_{02} = \hat{H}_{20}^\dagger = \frac{1}{4} \sum_{pq} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{(Sim)} \eta_{p,i} \eta_{q,j} \eta_{0,k}^* \eta_{0,l}^* \Gamma_p^\dagger \Gamma_q^\dagger \Gamma_0 \Gamma_0, \quad (1.15d)$$

$$\hat{H}_{12} = \hat{H}_{21}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{pqr} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{(Sim)} \eta_{p,i} \eta_{q,j} \eta_{r,k}^* \eta_{0,l}^* \Gamma_p^\dagger \Gamma_q^\dagger \Gamma_r \Gamma_0, \quad (1.15e)$$

$$\hat{H}_{22} = \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \sum_{ijkl} V_{ij,kl}^{(Sim)} \eta_{p,i} \eta_{q,j} \eta_{r,k}^* \eta_{s,l}^* \Gamma_p^\dagger \Gamma_q^\dagger \Gamma_r \Gamma_s. \quad (1.15f)$$

En las ecuaciones (1.15) todos los sumatorios se extienden a los estados  $p, q, \dots \neq 0$ . La condición estacionaria (1.10) únicamente involucra los términos  $\hat{H}_{10}$  y  $\hat{H}_{01}$ . Introduciendo estas ecuaciones en la ecuación (1.10) se advierte que los coeficientes  $C_p$  son arbitrarios, y son nulos si

$$\sum_j \eta_{0,j}^* h_{i,j} = E_0 \eta_{0,i}^*, \quad (1.16)$$

En la ecuación (1.16) se ha introducido

$$h_{i,j} = t_{i,j} + \frac{1}{2}(N-1) \sum_{kl} V_{ik,lj}^{Sim} \eta_{0,k} \eta_{0,l}^*, \quad (1.17)$$

$$E_0 = \sum_{i,j} \left( t_{i,j} \eta_{0,i} \eta_{0,j}^* + \frac{1}{2}(N-1) \sum_{kl} V_{ik,lj}^{Sim} \eta_{0,i} \eta_{0,k} \eta_{0,l}^* \eta_{0,j}^* \right). \quad (1.18)$$

La matriz  $h_{ij}$  se corresponde con el hamiltoniano de monopartícula que incluye el campo promedio generado por las  $N$  partículas del sistema. El valor  $E_0$  se puede interpretar como la energía necesaria para añadir un bosón más al condensado de  $N$  partículas [38]. No es necesario conocer los coeficientes  $\eta_{p,i}$  para resolver las ecuaciones (1.16) a (1.18) ya que partiendo de un valor inicial  $\eta_{0,i}$  se calcula  $h_{i,j}$  y  $E_0$  obteniéndose nuevos valores de  $\eta_{0,i}$ . Así, el conjunto de coeficientes  $\eta_{p,i}$  permanecen indeterminados excepto por el hecho de que deben de verificar las condiciones de ortogonalidad dadas en (1.13).

A modo de conclusión, se tiene pues que tanto para un sistema de fermiones como para un sistema de bosones, en los que se considera un potencial de interacción a dos cuerpos, tiene sentido realizar la aproximación de campo medio y suponer que las partículas se mueven libremente sometidas a un potencial promedio autoconsistente creado por todas las partículas del sistema.

## 1.2. Aproximación de Tamm-Dancoff (TDA)

Una vez que se tiene construido el estado fundamental del sistema, ya sea mediante Hartree-Fock o por medio de Hartree-Bose, los estados excitados del mismo se pueden tratar como excitaciones partículas-hueco. Además, todos los posibles estados excitados que se construyan a partir del estado fundamental de partida constituirán un conjunto completo de estados ortogonales, de modo que la auténtica función de onda del sistema, ya sea del estado fundamental  $|0\rangle$  como de los estados excitados  $|\nu\rangle$ , se pueden

considerar como un desarrollo en la base de estados excitados, es decir,

$$|0\rangle = C_0^0 |\text{HF}\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^0 a_m^\dagger a_i |\text{HF}\rangle + \frac{1}{4} \sum_{mnij} C_{mn,ij}^0 a_m^\dagger a_n^\dagger a_i a_j |\text{HF}\rangle + \dots \quad (1.19)$$

$$|\nu\rangle = C_0^\nu |\text{HF}\rangle + \sum_{mi} C_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i |\text{HF}\rangle + \frac{1}{4} \sum_{mnij} C_{mn,ij}^\nu a_m^\dagger a_n^\dagger a_i a_j |\text{HF}\rangle + \dots \quad (1.20)$$

La solución exacta de la ecuación de Schrödinger se obtiene diagonalizando el hamiltoniano en el espacio completo expuesto anteriormente, lo cual es prácticamente imposible. Sin embargo, se puede hacer una aproximación en el desarrollo de los estados excitados  $|\nu\rangle$  (1.20) consistente en que sólo se mantienen excitaciones tipo partícula-hueco. Esto es lo que se conoce como aproximación Tamm-Dancoff,

$$|\nu\rangle = \sum_{mi} C_{mi}^\nu a_m^\dagger a_i |\text{HF}\rangle. \quad (1.21)$$

El operador  $a_m^\dagger a_i$  aniquila una partícula por debajo del nivel de Fermi (crea un hueco) y crea una partícula por encima de dicho nivel. Dicho operador es conocido, por tanto, como operador de creación partícula-hueco. Por otra parte la aproximación Tamm-Dancoff es razonable debido a que la probabilidad de transición por campos electromagnéticos es proporcional a  $|\langle 0|F|\nu\rangle|^2$  siendo  $F = \sum_{pp'} f_{pp'} a_p^\dagger a_{p'}$  en términos de operadores de creación y destrucción.

Todo esto ha sido desarrollado para sistemas de fermiones. Si consideramos un sistema de bosones, la aproximación Tamm-Dancoff es exactamente igual con la diferencia de que trabajamos sobre un estado de condensado de bosones y operadores de creación y destrucción bosónicos.



### 1.3. Exponentes críticos

El estudio de los fenómenos críticos cada vez ha prestado más atención a lo que se denominan exponentes críticos, los cuales describen el comportamiento de varias magnitudes de interés en las proximidades del punto crítico.

En los modelos que nos ocupan, más que interesarnos por saber cómo escalan diferentes magnitudes espectroscópicas cerca del punto crítico, nos interesa saber cómo escalan con el tamaño finito del sistema cuando nos situamos en el punto crítico. Es decir, cómo se comporta un determinado observable del sistema en el punto crítico cuando el tamaño del sistema se va haciendo más grande. Así, estudiando los exponentes críticos se pretende inferir lo que sucede en el límite termodinámico con cálculos en sistemas finitos.

Vamos a dar una definición precisa de lo que es el exponente crítico que describe el comportamiento en el punto crítico de una función general  $f(N, \alpha_c)$  (esto es una función que depende del tamaño del sistema  $N$  y del parámetro de control  $\alpha$  que gobierna el hamiltoniano, pero que toma el valor en  $\alpha = \alpha_c$ ), donde  $N \rightarrow \infty$ . Aceptando que esta función  $f(N, \alpha_c)$  es positiva y continua aún para valores suficientemente grandes de  $N$ , entonces se puede definir y existe

$$\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln f(N, \alpha_c)}{\ln N}. \quad (1.22)$$

Este límite,  $\gamma$ , es lo que denominamos el exponente crítico asociado con la función  $f(N, \alpha_c)$  y se puede denotar como  $f(N, \alpha_c) \sim N^\gamma$ .

Hay que destacar que la relación  $f(N, \alpha_c) \sim N^\gamma$  no implica que

$$f(N, \alpha_c) = AN^\gamma, \quad (1.23)$$

siendo  $A$  una constante, aunque evidentemente la relación inversa es cierta. De hecho, es relativamente raro que el comportamiento de cualquier función asociada con algún observable del sistema tenga una expresión tan simple como (1.23). En general existen correcciones de tamaño finito, de modo que

la ecuación (1.23) se reemplaza por una expresión del tipo

$$f(N, \alpha_c) = AN^\gamma(1 + BN^\delta + \dots), \quad (1.24)$$

con  $B$  una constante y  $\delta < 0$ . Está claro que la definición proporcionada para el exponente crítico en (1.22) no hace distinción entre las formas funcionales (1.23) y (1.24). No obstante con la expresión (1.23) es suficiente, a pesar de contener menos información que la otra, y la razón se debe a que en el límite termodinámico el término  $N^\gamma$  es el que domina. Por consiguiente, en una gráfica log – log de datos experimentales, se obtiene un comportamiento en línea recta para puntos en los que el sistema es cada vez más grande, y el exponente crítico se puede derivar fácilmente de la pendiente de la línea recta en la región adecuada. En conclusión, los exponentes críticos se pueden medir mientras que la función completa en el punto crítico no. Ejemplos de determinaciones de exponentes críticos correspondientes al tamaño finito del sistema se encontrarán en el capítulo 3.

En el capítulo 5 también se realizará un estudio de escalado en el punto crítico. Es decir, el tamaño del sistema permanece fijo y se pretende analizar cómo se comporta una magnitud determinada cerca del punto crítico. Para tal fin, todo el formalismo desarrollado anteriormente es aplicable, salvo que ahora el exponente crítico se define como

$$\gamma = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\epsilon)}{\ln \epsilon}, \quad (1.25)$$

siendo

$$\epsilon = \frac{E - E_c}{E_c}, \quad (1.26)$$

con  $E$  una energía dada del sistema y  $E_c$  la energía crítica a la cual se produce la transición de fase (véase el capítulo 5).

## 1.4. Representaciones bosónicas de álgebras de Lie

El concepto de representaciones (o aplicaciones) bosónicas de los álgebras de Lie apareció por primera vez en física nuclear en 1962 como idea para desarrollar formas bilineales de operadores fermiónicos de creación y destrucción en series de Taylor de operadores bosónicos, con el objetivo de transformar el estudio de las vibraciones del movimiento nuclear en un problema de osciladores acoplados.

En general, los métodos de desarrollo en operadores bosónicos encuentran aplicación en sistemas fermiónicos de muchos cuerpos. Es bien conocido en teoría de muchos cuerpos que, bajo determinadas circunstancias, pares de fermiones se pueden comportar como bosones, especialmente cuando la densidad de tales pares es lo suficientemente baja como para que se minimicen los efectos del Principio de Exclusión de Pauli. Bajo tales circunstancias, las excitaciones de más baja energía de estos sistemas se pueden identificar con una colección de un número relativamente pequeño de osciladores casi armónicos y débilmente interactuantes.

Los métodos bosónicos tienen como objetivo reemplazar directamente los grados de libertad de los pares de fermiones con grados de libertad exactos bosónicos. Matemáticamente esto se consigue estableciendo una aplicación entre el espacio de Hilbert del sistema fermiónico y otro espacio de Hilbert conocido como el espacio ideal. En el caso de que el sistema contenga un número par de fermiones, el espacio ideal se genera por medio de operadores de creación y destrucción de un único tipo de bosón, es decir, con un único grado de libertad bosónico correspondiente a cada par de fermiones. Para un sistema con un número impar de fermiones, el espacio ideal se toma como aquel en el que se tiene el producto tensorial del espacio bosónico con el espacio de un objeto de carácter fermiónico y conocido como “la partícula impar ideal”, que representa al fermión que queda sin emparejar [32]. En otro tipo de enfoque, en el que se relacionan tanto sistemas con un número par o impar de partículas, se establece una aplicación entre un

único subconjunto de todos los grados de libertad de pares de fermiones y un sistema de bosones, los restantes grados de libertad se representan como cinemáticamente independientes “cuasifermiones”. Con este nuevo enfoque, se gana por una parte el potencial para nuevos tipos de aproximaciones de muchos cuerpos para la descripción del movimiento colectivo que sería difícil de implementar en la usual formulación fermiónica, como por ejemplo, aquellas aproximaciones que permiten pequeñas violaciones del Principio de Exclusión de Pauli. Por otra parte, puesto que los grados de libertad bosónicos poseen una expresión en términos de variables canónicas clásicas, son más intuitivos que los grados de libertad fermiónicos y además es más simple relacionarlos con aproximaciones semiclásicas.

Las presentaciones bosónicas que más se usarán a lo largo de este trabajo serán la transformación de Holstein-Primakoff y la transformación de Schwinger. Estas transformaciones se presentarán en su debido momento.

## 1.5. Integrabilidad y caos cuántico

El concepto de integrabilidad en mecánica clásica se puede definir del siguiente modo. Considérese un sistema hamiltoniano con  $N$  grados de libertad y cuyo hamiltoniano  $H(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$  no depende explícitamente del tiempo. Se dice que el sistema es integrable si existen  $N$  funciones independientes  $F_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , constantes del movimiento,  $dF_i/dt = 0 \forall i$ , y que están en involución, es decir, que sus corchetes de Poisson  $\{F_i, F_j\} = 0$ , con  $\forall i, j$ .

Al igual que en mecánica clásica, un sistema cuántico queda descrito por un hamiltoniano que en general depende de posiciones y momentos  $\hat{H}(q_1, \dots, q_n; \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)$ . Ahora la interpretación cuántica de este hamiltoniano es diferente a la interpretación clásica: cada una de sus coordenadas es un operador que actúa sobre una función de onda; el estado del sistema no se encuentra resolviendo unas ecuaciones de movimiento, sino una ecuación de onda (ecuación de Schrödinger); la información del sistema no está en sus trayectorias  $x(t)$  sino en su función de onda  $\Psi(\hat{p}, \hat{q})$ . Sin embargo sus

similitudes hacen posible trasladar los conceptos de una a otra. En particular, se puede definir una constante del movimiento como un operador  $\hat{F}$  que no varía con el tiempo  $d\hat{F}/dt = 0$ , y el corchete de Poisson tiene su equivalente en el conmutador  $\{, \} \rightarrow i/\hbar [, ]$ . Podemos entonces trasladar la definición clásica de integrabilidad a la mecánica cuántica del siguiente modo: diremos que un sistema cuántico con  $N$  grados de libertad es integrable si existen  $N$  operadores independientes  $\hat{F}_i, i = 1, \dots, N$ , constantes del movimiento,  $d\hat{F}_i/dt = 0 \forall i$ , y que están en involución, es decir, que sus conmutadores  $[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = 0 \forall i, j$ .

A pesar de que esta definición es consistente y no presenta ambigüedades, la definición de integrabilidad en mecánica clásica lleva implícita una tercera condición. A saber, la independencia funcional de las  $N$  constantes del movimiento, que carece de sentido en mecánica cuántica. Esto hace que no se puedan clasificar en mecánica cuántica los sistemas como integrables ó no integrables. De hecho, Von Neumann probó que todos los operadores que conmutan con el hamiltoniano pueden escribirse como función de un operador más general. Así pues, la consecuencia es que la tercera condición necesaria para definir la integrabilidad en mecánica clásica, que las constantes del movimiento sean funcionalmente independientes, no se puede aplicar en mecánica cuántica.

No obstante, hay autores que se muestran críticos con respecto a la imposibilidad de definir la integrabilidad en mecánica cuántica y proponen criterios alternativos para definirla:

- Partiendo del concepto de conjunto completo de observables que conmutan (CCOC) y de las propiedades matemáticas del espacio de Hilbert, es posible definir los conceptos de grado de libertad dinámico y espacio de fases desde un punto de vista puramente cuántico. Esta definición da lugar a un espacio de fases cuántico finito y permite encontrar un criterio cuántico para la integrabilidad: un sistema cuántico es integrable si posee alguna simetría dinámica; la ruptura de estas simetrías conlleva la pérdida de la integrabilidad.
- La construcción de un análogo cuántico a las transformaciones canó-

nicas que permiten escribir el hamiltoniano en función de variables ángulo-acción permite definir otra noción de integrabilidad cuántica: un hamiltoniano  $\hat{H}(q_1, \dots, q_n; \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)$  es integrable si existe una transformación canónica que permita escribirlo en función de  $N$  acciones  $J_i$ :  $\hat{H} = \hat{H}(J_1, \dots, J_n)$ . Esta definición se ha aplicado con éxito a sistemas de espines.

- No siempre es posible obtener tantas constantes de movimiento como grados de libertad en un número finito de pasos (es decir, sin diagonalizar explícitamente el hamiltoniano). Esto permite establecer un criterio práctico de integrabilidad cuántica: un sistema cuántico se considera integrable cuando es posible construir explícitamente un CCOC a base de constantes del movimiento. Este criterio ha sido usado con éxito en sistemas finitos con interacciones de pairing.

A raíz de los argumentos expuestos, se puede decir que no existe una definición cuántica de integrabilidad análoga a la que hay en mecánica clásica. Sin embargo, se puede tratar de definir el caos en función de su fenomenología: un sistema es caótico si presenta propiedades como la sensibilidad a condiciones iniciales. Pero este criterio tampoco es útil para definir el caos en mecánica cuántica como veremos a continuación.

Una característica esencial del comportamiento caótico en un sistema es su sensibilidad frente al cambio en las condiciones iniciales. Pero esto no es fácil de trasladar a la mecánica cuántica. En efecto, sea un sistema cuántico cualquiera, por ejemplo uno cuyo análogo clásico sea no integrable. La evolución temporal de dicho sistema viene determinada por su función de onda  $\Psi(t)$ , que viene gobernada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. En el caso particular de que el hamiltoniano no dependa explícitamente del tiempo, entonces

$$\Psi(t) = e^{-i\frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}\Psi(t_0), \quad (1.27)$$

donde  $t_0$  representa el instante inicial y  $\Psi(t_0)$  el estado del sistema en

dicho instante; toda la información disponible acerca de su trayectoria queda codificada en la función de onda  $\Psi(t)$ .

Una vez que se han determinado las ecuaciones de evolución del sistema, para poder aplicar la definición de caos dada anteriormente es necesario comparar dos trayectorias infinitamente próximas en el instante inicial  $x_0$ ,  $y_0 = x_0 + \epsilon$ . Pero en mecánica cuántica no tiene sentido el hablar de trayectorias en el sentido que da la mecánica clásica ni tampoco es posible considerar dos condiciones iniciales infinitamente próximas, necesarias para definir los exponentes de Lyapunov (los exponentes de Lyapunov caracterizan la separación exponencial de las trayectorias).

Como alternativa se puede estudiar la sensibilidad a las condiciones iniciales a partir de la función de onda. Pero al ser unitario el operador evolución, se obtiene que si  $\Psi(t_0)$  y  $\Phi(t_0)$  son dos condiciones iniciales cualquiera, su solapamiento permanece constante a lo largo del tiempo con independencia del sistema hamiltoniano. Por consiguiente, no se puede definir el caos en mecánica cuántica a partir de la sensibilidad a las condiciones iniciales. Así pues, no se puede caracterizar el caos en mecánica cuántica en base a una fenomenología análoga a la que se encuentra en mecánica clásica. Pero puesto que la mecánica clásica emerge de la cuántica cuando el sistema es suficientemente grande, el caos debe de aparecer en algún momento en el mundo cuántico. Habrá que definir el concepto de caos de otro modo.

Puesto que lo más característico de un sistema cuántico es su espectro de energías y además es también lo más fácil de medir, se podría pensar en relacionar el concepto de caos cuántico con el de espectro de energías. Aunque a primera vista no parece posible encontrar una correspondencia entre el espectro de energías de un sistema cuántico y la dinámica de su análogo clásico, ya que esta magnitud constituye un simple parámetro para éste último. Sin embargo, la característica más conocida y universal de lo que se conoce como caos cuántico es precisamente el comportamiento estadístico del espectro de energías en función de si el análogo clásico del sistema cuántico es integrable o caótico. De hecho, las propiedades estadísticas del espectro de energía son universales y diferentes según la dinámica del análogo clásico

sea regular o caótica.

Así pues, el caos cuántico se define a partir del análisis del comportamiento estadístico del espectro de energías en función de si el análogo clásico del sistema cuántico es integrable o caótico.

El estadístico más usado para identificar si un sistema es integrable o caótico es la distribución de probabilidad  $P(s)$  de los espaciamientos de primeros vecinos  $s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$ , donde  $\epsilon_i$  es la energía del estado  $i$ -ésimo. Se sabe que una de las características más representativas del espectro de energía de los sistemas caóticos es la repulsión de niveles, es decir que la probabilidad de que dos niveles consecutivos se hallen infinitamente próximos es nula. Entonces, en los sistemas caóticos  $P(s) \rightarrow 0$  cuando  $s \rightarrow 0$ . En los sistemas integrables no existe esta restricción.

Se obtienen expresiones explícitas para  $P(s)$  según sea el sistema caótico o integrable. Si el sistema es integrable entonces la secuencia de espaciamientos sigue una estadística de Poisson  $P(s) = e^{-s}$ . Para sistemas caóticos se conjetura que  $P(s)$  sigue una distribución de Wigner  $P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}$ . Para profundizar en estos temas se recomienda consultar las referencias [39, 40].



## Capítulo 2

# Mecánica cuántica y decoherencia

La interpretación de la mecánica cuántica ha constituido un tema de debate desde sus comienzos. Quizás las críticas más duras contra ella provienen de Einstein, que con sus experimentos mentales buscaba inconsistencias en la teoría. El problema de interpretación surge fundamentalmente de la introducción de la función de onda, que como artificio matemático conseguía dotar de explicación a los fenómenos cuánticos observados pero que carecía de interpretación física. Por otra parte, tampoco nadie había observado la función de onda de un sistema, de modo que dotarla de una interpretación adecuada era fundamental. Tal objetivo se cumplió, en cierto modo, con la interpretación de Copenhague, en la que se propuso que lo que realmente tenía sentido físico era el módulo al cuadrado de la función de onda. En el marco de dicha interpretación, éste está relacionado con la probabilidad de encontrar al sistema en un cierto intervalo espacial. Además, como problema adicional, se tiene que el espacio sobre el que se definen dichas funciones de onda, el espacio de Hilbert, es demasiado amplio en el sentido de que, por el principio de superposición, se admite cualquier combinación lineal arbitraria de estados como posible estado cuántico del sistema. Ésta es una ley que se ha verificado reiteradamente en el dominio cuántico pero que, sin embargo, choca con la intuición clásica. Además, en última instancia toda la materia está constituida por partículas que obedecen las leyes de la mecánica cuántica, por lo que poseen un comportamiento cuántico. Esto

suscita la siguiente pregunta ¿cómo es posible establecer una conexión entre la realidad cuántica y la clásica? o lo que es lo mismo ¿por qué el mundo se nos presenta como clásico a pesar de poseer una supuesta naturaleza cuántica subyacente, que debería, en principio, permitir superposiciones arbitrarias de diferentes estados?

Además de la interpretación de Copenhague, debida fundamentalmente a Born, existen otras interpretaciones alternativas como son las de Bohm o la Interpretación de los Muchos Mundos propuesta por Everett a mediados del siglo XX [14, 41]. No entraremos a discutir ninguna de ellas, simplemente se mencionan aquí para dejar claro que la mecánica cuántica es una teoría cuya interpretación aún hoy en día suscita polémica en el ámbito científico.

La decoherencia está íntimamente ligada a los fundamentos de la mecánica cuántica y ha sido objeto de debate desde principios de los años 80. La idea clave radica en que los sistemas cuánticos realmente nunca son sistemas aislados, sino que están inmersos en un sistema mayor, al que llamaremos indistintamente ambiente o entorno, con el que está continuamente interactuando. Tenemos pues ahora que, en general, los sistemas cuánticos se deben considerar como sistemas abiertos, aunque la elección que se pueda hacer sobre lo que se considera sistema y entorno es un poco arbitraria, ya que dado un sistema, éste se puede dividir en tantos subsistemas como se considere oportuno. Todo dependerá de en qué parte del sistema se centra el estudio. De tal manera que, y según la interpretación que se da hoy en día al proceso de decoherencia, las propiedades clásicas de los sistemas macroscópicos surgirían de un modo irreversible a través de la interacción del sistema con todos los grados de libertad del ambiente [14, 42]. Este proceso es el que se conoce como decoherencia. Antes de profundizar en este tema, se comenzará hablando del problema de la medida en mecánica cuántica y cómo la introducción del ambiente como parte del sistema, junto con una interpretación adecuada del proceso de la decoherencia, permite resolver dicho problema. Además, se introducirá la matriz densidad como herramienta básica de trabajo.

## 2.1. El problema de la medida

Como decíamos anteriormente, la clave de todo está en el principio de superposición cuya fundamentación matemática radica en la linealidad del espacio de los estados de Hilbert, de modo que si, por ejemplo, el sistema se puede encontrar en cualquiera de los estados  $|\psi_1\rangle$  ó  $|\psi_2\rangle$ , el estado cuántico  $a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle$  también es válido con  $a$  y  $b$  números complejos arbitrarios tales que  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , siempre y cuando los estados  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  estén normalizados. Para poder entender completamente el problema de la decoherencia es necesario hablar un poco de la teoría cuántica de la medida. Dicha teoría para medidas ideales, ya fue formulada por Von Neumann en el 1932 [43] y en ella se da una descripción cuántica del proceso de medida. Lo habitual es suponer que la medida es un proceso clásico que conlleva al colapso de la función de onda, sin embargo en la teoría de Von Neumann el aparato de medida también es cuántico. A continuación revisaremos brevemente sus puntos fundamentales.

Sea un sistema cuántico  $\mathcal{S}$  inicialmente en el estado  $|\psi\rangle$  que interacciona con un aparato de medida  $\mathcal{A}$  en el estado  $|A_0\rangle$ , entonces se acepta que el sistema total viene descrito como el producto directo en el espacio de Hilbert  $H_{\mathcal{S}} \otimes H_{\mathcal{A}}$ , donde  $H_{\mathcal{S}}$  es el hamiltoniano para el sistema  $\mathcal{S}$  y  $H_{\mathcal{A}}$  el hamiltoniano para el aparato  $\mathcal{A}$ . El sistema total evolucionará de acuerdo a la ecuación de Schrödinger de forma que se tendrá

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle|A_0\rangle = \left( \sum_n c_n |s_n\rangle \right) |A_0\rangle \xrightarrow{t} \sum_n c'_n |s_n\rangle |A_n\rangle, \quad (2.1)$$

donde  $\{|A_n\rangle\}$  y  $\{|s_n\rangle\}$  son estados en el espacio de Hilbert del aparato y del sistema respectivamente y  $c_n$  son coeficientes, que en general serán complejos. El proceso de evolución que se muestra en (2.1) es el siguiente: cada estado  $|s_n\rangle$  del sistema se correlacionará con un estado del aparato  $|A_n\rangle$ , de forma que conocido el estado  $|A_n\rangle$  en el que se encuentra el dispositivo de medida se conoce el estado  $|s_n\rangle$  en el que se encuentra el sistema.

Esta evolución dinámica es conocida como *premedida* para enfatizar que

el proceso descrito en (2.1) no es suficiente para concluir que una medida ha sido completada [14]. Esto se debe fundamentalmente a dos razones que se conocen en la literatura como *problema del resultado definitivo* (problem of definite outcomes) y *problema de la base elegida* (problem of the preferred basis). El primero de estos problemas nos pone de manifiesto que una vez se hace evolucionar el sistema en el tiempo se tiene una superposición de estados aparato-sistema. De modo que sin proporcionar un mecanismo adicional (llámese por ejemplo mecanismo de colapso de la función de onda) o sin dar una interpretación adecuada de tal superposición, no está claro cómo dar cuenta del estado final en que se encuentra el sistema como resultado de una medida concreta, es decir, cómo es posible que el sistema se encuentre en un estado bien definido tras realizarse la medida y no en una superposición de varios estados. Por otra parte, el segundo problema nos viene a decir que el estado final del sistema compuesto no es único en general, y por lo tanto el observable medido no está tampoco unívocamente definido. De hecho, si se tiene un estado puro del sistema  $\mathcal{SA}$  (Sistema+Aparato),

$$\sum_n c_n |s_n\rangle |A_n\rangle, \quad (2.2)$$

el estado (2.3) también es válido

$$\sum_n b_n |s'_n\rangle |A'_n\rangle. \quad (2.3)$$

De forma que no se podría saber si lo que está midiendo el aparato es el estado  $|s_n\rangle$  o bien  $|s'_n\rangle$ . Esto puede ser enunciado en un teorema general [43, 44]: “*Cuando la mecánica cuántica se aplica a un sistema aislado compuesto, consistente en un sistema  $\mathcal{S}$  y un aparato de medida  $\mathcal{A}$ , no se puede determinar qué observable del sistema ha sido medido.*”

Para resolver el llamado *problema del resultado definitivo* se tienen diferentes interpretaciones sobre el estado final del sistema compuesto de modo que explique la existencia, o al menos la percepción subjetiva, de los resultados obtenidos incluso si éstos vienen dados como una superposición de estados [14]. Otras interpretaciones intentan resolver el problema de la

medida modificando la dinámica unitaria de Schrödinger, o bien simplemente postulando una nueva interpretación del mecanismo de colapso de la función de onda (ver por ejemplo las referencias [45–48]). Sin embargo, introduciendo el ambiente como parte de nuestro sistema y realizando una interpretación adecuada del concepto de decoherencia se puede resolver el citado problema, además del conocido *problema de la base elegida*. Ahora al introducir el ambiente como parte de nuestro sistema, éste que en principio era considerado como aislado dejará de serlo. Esto último será tratado en detalle posteriormente.

## 2.2. Matriz densidad

Puesto que la matriz densidad es una de las herramientas fundamentales para trabajar con la decoherencia, en lo que sigue se realizará una breve revisión e interpretación de la misma.

Dado un sistema en el estado  $|\psi(t)\rangle$ , se define el operador densidad  $\hat{\rho}(t)$  como

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \quad (2.4)$$

El operador  $\hat{\rho}(t)$  es hermítico, es el operador proyección sobre el estado  $|\psi(t)\rangle$  y tiene además las siguientes propiedades:

1. Si se realiza una medida de una cantidad física  $A$  correspondiente al observable  $\hat{A}$ , la probabilidad de encontrar al autovalor  $a_\alpha$  será

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \text{Tr} \left( \hat{P}_\alpha \hat{\rho} \right). \quad (2.5)$$

Siendo  $\hat{P}_\alpha$  el proyector sobre el subespacio de  $\hat{A}$  correspondiente al autovalor  $a_\alpha$ . Además, el valor esperado  $\langle a \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  vendrá dado por

$$\langle a \rangle = \text{Tr} \left( \hat{A} \hat{\rho} \right). \quad (2.6)$$

Esto proporciona la usual regla de Born para el cálculo de probabilidades.

- Después de realizar una medida y obtener el valor  $a_\alpha$ , el estado del sistema será  $|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_\alpha|\psi\rangle}{\|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle\|}$  y el correspondiente operador densidad es:

$$\hat{\rho}' = \frac{\hat{P}_\alpha \hat{\rho} \hat{P}_\alpha}{\mathcal{P}(a_\alpha)}. \quad (2.7)$$

- Si  $\hat{H}(t)$  es el hamiltoniano del sistema, la evolución de dicho sistema vendrá dada por la ecuación de Schrödinger, de tal manera que el operador densidad evolucionará del siguiente modo:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}]. \quad (2.8)$$

Haciendo uso del operador densidad se pueden reformular los postulados de la mecánica cuántica en función de éste en lugar de usar vectores estado [49].

Si los sistemas o partículas que se estudian se encuentran en el mismo estado  $|\psi\rangle$ , entonces se habla de una colectividad pura, o se dice que el sistema total es un estado puro. Para verificar experimentalmente las predicciones probabilísticas contenidas en la función de onda  $|\psi\rangle$ , se debe analizar un conjunto de objetos preparados de la misma forma. Así por ejemplo, si se tiene un observable  $\hat{A}$  y el sistema se encuentra en el estado

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (2.9)$$

el autovalor  $a_n$  se obtendrá  $N_n$  veces en un conjunto de  $N$  objetos. Cuanto más grande sea  $N$ , con más precisión se aproximará  $N_n/N$  a la probabilidad  $|c_n|^2$ , con lo que el valor esperado del operador  $\hat{A}$  sería

$$\langle a \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_n N_n a_n. \quad (2.10)$$

Además de éste carácter estadístico inherente a los mismos estados, una

colectividad también puede contener una distribución estadística de estados. A este tipo de colectividad se le denomina colectividad mezcla, o simplemente se habla de estados mezcla. Supongamos que, de un conjunto de  $N$  elementos,  $\mathcal{N}_1$  se encuentran en el estado  $|\psi_1\rangle, \dots, \mathcal{N}_i$  en el estado  $|\psi_i\rangle$ ; entonces la probabilidad de que algún elemento del conjunto elegido al azar se encuentre en el estado  $|\psi_i\rangle$  viene dado por  $p_i = \mathcal{N}_i/N$ , con  $\sum_i p_i = 1$ .

Entonces el valor esperado de  $\hat{A}$  será

$$\langle a \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle. \quad (2.11)$$

Por consiguiente se pueden calcular diferentes valores esperados  $\langle a \rangle_i$  suponiendo que el sistema se encuentra en un estado puro  $|\psi_i\rangle$  y promediando luego los diferentes  $\langle a \rangle_i$  con los pesos estadísticos  $p_i$ .

Este valor esperado también se puede representar por la matriz densidad, que se define ahora como

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.12)$$

Con esta nueva definición para la matriz densidad, donde se tienen en cuenta estados mezcla, las propiedades dadas inicialmente se siguen manteniendo [50].

En virtud de lo visto hasta ahora, las posibles interpretaciones físicas que se pueden realizar de la matriz densidad son fundamentalmente dos: se puede considerar como la descripción de un único estado de una colectividad preparada de la misma forma o bien como la descripción de una colectividad en su conjunto. Cuando  $\hat{\rho}$  adopta una forma diagonal, entonces se tendrá una colectividad cuántica de  $n$  estados con una probabilidad dada y esos estados podrían ser tomados como precursores de estados clásicos ya que tienen las mismas propiedades que una colectividad canónica.

### 2.2.1. Matriz densidad reducida

El entrelazamiento es un fenómeno básico de la mecánica cuántica y el formalismo de la matriz densidad permite realizar una descripción cuantitativa de los estados entrelazados, en concreto cuando se realiza una determinada medida individual sobre una parte del sistema.

Así pues, si se tiene un sistema compuesto por varios subsistemas, se tiene un estado entrelazado, entonces se puede definir el operador matriz densidad reducida sobre uno de los subsistemas trazando sobre todos los grados de libertad de los demás subsistemas. Es decir, la matriz densidad reducida correspondiente al subsistema  $i$  de  $N$  subsistemas totales que constituyen el sistema completo viene dado por

$$\hat{\rho}_i = \text{Tr}_{1,\dots,i-1,i+1,\dots,N} |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (2.13)$$

siendo  $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\phi_i\rangle_1 |\phi_i\rangle_2 \dots |\phi_i\rangle_N$  el estado completo del sistema, donde se acepta que los estados  $|\phi_i\rangle_j$  constituyen una base ortonormal en sus respectivos espacios de Hilbert  $H_j$ ,  $j = 1 \dots N$ . Éste en general es un estado entrelazado de los diferentes subsistemas que lo constituyen. De este modo se consigue tener un operador que describa únicamente el subsistema que se pretende estudiar ignorando el entorno, el resto de subsistemas.

Por ejemplo, sea  $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\phi_i\rangle_1 |\phi_i\rangle_2 \dots |\phi_i\rangle_N$  el estado puro anterior. Entonces, para cualquier observable  $\hat{A}$  que únicamente pertenece al subsistema  $j$ ,  $\hat{A} = \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \dots \otimes \hat{I}_{j-1} \otimes \hat{A}_j \otimes \hat{I}_{j+1} \otimes \dots \otimes \hat{I}_N$  (la medida se realizaría entonces sobre el subsistema  $j$  en concreto), el cálculo del valor esperado será el mismo tanto si se usa el operador densidad para el estado puro  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  como si se emplea el operador matriz densidad reducida  $\hat{\rho}_j$  ya que  $\langle a \rangle = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \text{Tr}_j(\hat{A}_j\hat{\rho}_j)$ .

## 2.3. Decoherencia

Ya se mencionó anteriormente que la decoherencia, a rasgos generales, se basa en cómo evoluciona un sistema como consecuencia de su interacción con



el entorno que lo rodea. El fenómeno de la decoherencia parte por tanto de la idea de que todo sistema físico debe interactuar de algún modo con su entorno. En cierto modo la mecánica cuántica heredó cierta metodología de la mecánica clásica en lo que respecta al estudio de los sistemas físicos. Así por ejemplo, en mecánica clásica, cuando se pretendía estudiar un determinado sistema físico, éste se modelaba como aislado y si se deseaba estudiar la interacción con el exterior, éste último se introducía como una perturbación al sistema. La mecánica clásica estableció la idealización de los sistemas aislados y los experimentos en física debían de estar enfocados a eliminar tanto como fuera posible las perturbaciones externas con el fin de descubrir la naturaleza “real” subyacente en el sistema físico bajo consideración.

En el fenómeno del entrelazamiento cuántico se ha demostrado que las correlaciones entre dos sistemas son de gran importancia y puede dar lugar a propiedades que no se muestran en los sistemas aislados. Debemos reconocer, por tanto, que el entrelazamiento cuántico es una propiedad fundamental de la naturaleza.

En el fenómeno de la decoherencia tales correlaciones son ubicuas en el sentido de que cada sistema físico interactúa de algún modo con su entorno, el cual posee un gran número de grados de libertad que difícilmente se pueden controlar completamente. La decoherencia se produce en unas escalas de tiempo extremadamente cortas y el tamaño del entorno puede ser incluso mínimo. Debido al gran número de grados de libertad que posee el entorno, es muy complicado deshacer el entrelazamiento que se produce entre el entorno y el sistema, y éste ha sido propuesto como origen de la irreversibilidad en la naturaleza [14]

Principalmente se pueden observar dos consecuencias debidas a la interacción con el entorno:

- **Decoherencia inducida por el entorno** (*Environment-induced decoherence*): La rápida eliminación local de interferencias entre diferentes estados del sistema. Esto quiere decir que la interacción con el entorno conduce a una rápida desaparición de los términos no diagonales en la matriz densidad reducida que describe la distribución de probabilidad

para los resultados de las medidas sobre el sistema. Así se tiene una  $\hat{\rho}$  diagonal de tal modo que, según la interpretación anterior de la matriz densidad reducida, el sistema se comporta como una colectividad clásica. Este efecto ha sido reivindicado para insinuar al menos una solución parcial al problema de la medida. Hay que señalar que si bien en principio toda matriz  $\hat{\rho}$  se puede diagonalizar, el resultado de esta decoherencia es una representación diagonal estable. Además, la base que diagonaliza  $\hat{\rho}$  permanece invariante con el tiempo.

- **Superselección inducida por el entorno** (*Environment-induced superselection*): La selección de un conjunto de estados elegidos, frecuentemente conocidos como *estados puntero* (pointer states), que son resistentes en el sentido de que mantienen las correlaciones a lo largo del tiempo a pesar de su inmersión en el ambiente. Estos estados están determinados por el tipo de interacción entre el sistema y su entorno. Se ha sugerido que dichos estados se correspondan con los estados clásicos de nuestra experiencia. Por consiguiente, según la interpretación de la decoherencia, los estados puntero serían los “estados reales” que se observan macroscópicamente porque son los únicos estables frente a la interacción con el entorno.

Citar, por otra parte, que existen otros aspectos más recientes de la decoherencia propuestos principalmente por Zurek cuyos detalles se omitirán por no ser objetivo del presente trabajo. No obstante respecto a este tema se puede consultar la siguiente bibliografía [14, 43, 51].

Para finalizar, resaltar que la decoherencia surge de forma natural de una aplicación directa del formalismo de la mecánica cuántica a la descripción de la interacción de un sistema físico con su entorno. Por ello, la decoherencia por sí misma no es ni una interpretación ni una modificación de la mecánica cuántica. De hecho, las implicaciones que conlleva la decoherencia aún hoy en día deben ser interpretadas en el contexto de las diferentes interpretaciones de la mecánica cuántica. Además, puesto que los efectos de la decoherencia se han estudiado ampliamente tanto desde un punto de vista teórico como experimental, su existencia es una realidad bien confirmada.

### 2.3.1. El problema de la medida con el entorno

Volvamos al modelo de medida ideal de Von Neumann, pero esta vez se incluirá el ambiente. Denotemos éste por  $\mathcal{E}$  y consideremos que su estado anterior al proceso de medida es  $|e_0\rangle$  en el espacio de Hilbert  $H_{\mathcal{E}}$ . Además, se acepta que el espacio total sistema-aparato-ambiente viene dado por el producto directo de los espacios de Hilbert de cada subsistema por separado,  $H_{\mathcal{S}} \otimes H_{\mathcal{A}} \otimes H_{\mathcal{E}}$ . Donde  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{S}$  denotan el aparato y el sistema que se mide respectivamente. Ahora se tendrá que el sistema total  $\mathcal{SAE}$  evolucionará de acuerdo a

$$\left( \sum_n c_n |s_n\rangle \right) |A_0\rangle |e_0\rangle \xrightarrow{t} \left( \sum_n c'_n |s_n\rangle |a_n\rangle \right) |e_0\rangle \xrightarrow{t} \sum_n c''_n |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle, \quad (2.14)$$

$|e_n\rangle$  son los estados del ambiente asociados con los diferentes estados puntero  $|a_n\rangle$  del aparato de medida. Si se quisiera medir un observable del sistema  $\mathcal{SA}$ , cualquier observación se limitaría al estudio del sistema compuesto sistema-aparato mientras que los diversos grados de libertad del entorno  $\mathcal{E}$  permanecerían inobservados. Supongamos por tanto que el operador  $\hat{O}_{\mathcal{SA}}$  representa un observable del citado sistema, su valor esperado vendrá dado, por tanto, de acuerdo a (2.5) por

$$\langle \hat{O}_{\mathcal{SA}} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_{\mathcal{SAE}}[\hat{O}_{\mathcal{SA}} \otimes \hat{I}_{\mathcal{E}}]) = \text{Tr}_{\mathcal{SA}}(\hat{\rho}_{\mathcal{SA}} \hat{O}_{\mathcal{SA}}), \quad (2.15)$$

donde la matriz densidad

$$\hat{\rho}_{\mathcal{SAE}} = \sum_{m,n} c_m c_n^* |s_m\rangle |a_m\rangle |e_m\rangle \langle e_n| \langle a_n| \langle s_n|$$

ha sido reemplazada por la matriz densidad reducida que se obtiene trazando sobre todos los estados del entorno

$$\hat{\rho}_{\mathcal{SA}} = \text{Tr}_{\mathcal{E}}(\hat{\rho}_{\mathcal{SAE}}) = \sum_{m,n} c_m c_n^* |s_m\rangle |a_m\rangle \langle a_n| \langle s_n| \langle e_n| e_m\rangle. \quad (2.16)$$

$\hat{\rho}_{SA}$  posee términos de interferencia  $|s_m\rangle|a_m\rangle\langle s_n|\langle a_n|$  para  $m \neq n$  ya que el conjunto de estados  $|e_m\rangle$  del entorno no son necesariamente ortogonales. Sin embargo, debido a la gran cantidad de grados de libertad que posee el ambiente se postula que los estados punteros  $|e_n\rangle$  en su evolución temporal alcanzarán rápidamente la ortogonalidad,  $\langle e_n(t)|e_m(t)\rangle \rightarrow \delta_{n,m}$ , de modo que el operador densidad reducida  $\hat{\rho}_{SA}$  llega a ser aproximadamente diagonal en la base de estados punteros  $\{|a_n\rangle\}$ , es decir

$$\hat{\rho}_{SA} \xrightarrow{t} \hat{\rho}_{SA} \approx \sum_n |c_n|^2 |s_n\rangle|a_n\rangle\langle s_n|\langle a_n|, \quad (2.17)$$

con lo que se observa que localmente han desaparecido los términos de interferencia. Este es precisamente el efecto al que nos referíamos como decoherencia inducida por el entorno. El acoplo entre el aparato-sistema y el entorno queda determinado por la naturaleza de ambos, naturaleza que selecciona el conjunto de estados punteros que resisten la influencia del entorno. La consecuencia es, pues, que el entorno induce una mezcla clásica de estados  $|s_n\rangle|a_n\rangle$ , que es lo que determina el estado “real” del sistema y del aparato.

Recordemos que el problema de la medida derivaba de dos problemas fundamentales, el de la base elegida y el de los resultados definitivos. Al introducir como nuevo estado el entorno del sistema bajo estudio dichos problemas desaparecen. En particular se resuelve el problema de la base elegida gracias al teorema de la existencia de una tridescomposición única [52]. Dicho teorema establece que si se tiene un estado  $|\psi\rangle$  en un espacio de Hilbert  $H_1 \otimes H_2 \otimes H_3$ , éste se puede expresar como una descomposición de Schmidt  $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\phi_i\rangle_1 |\phi_i\rangle_2 |\phi_i\rangle_3$ , y además dicho desarrollo es único donde  $|\phi_i\rangle_1$  y  $|\phi_i\rangle_2$  son bases de vectores linealmente independientes normalizados en  $H_1$  y  $H_2$  respectivamente, y  $|\phi_i\rangle_3$  es una base de vectores normalizados mutuamente no colineales en  $H_3$ . Este resultado se puede generalizar para una descomposición genérica  $N$  con  $N \geq 3$ . El teorema de la tridescomposición única asegura que el desarrollo (2.14) es único por tanto, con lo que se demuestra que la inclusión de al menos un tercer sistema, en este caso el ambiente, es necesario para eliminar una posible ambigüedad en la elección

---

de la base. Señalar que este teorema no proporciona cómo obtener tal descomposición (de hecho no siempre es posible), sólo afirma que si existe, entonces tal descomposición es única, y puesto que son desconocidos los estados precisos del entorno se necesitaría en nuestro caso un criterio adicional para determinar los estados de la base elegida. Dicho criterio viene dado por el criterio de estabilidad sugerido por Zurek [43].



## Capítulo 3

# Transición de fase cuántica en modelos de dos niveles en Física Molecular: modelo vibrónico $U(4)$ y modelo $U(3)$

Los sistemas cuánticos de dos niveles permiten modelar de un modo relativamente simple diferentes sistemas con muchas partículas en interacción. Dependiendo de la naturaleza de las partículas y de la interacción entre ellas, se generan modelos de utilidad en diversas ramas de la Física: Materia Condensada, Física Molecular, Física Nuclear, Óptica Cuántica, etc. En el presente capítulo nos centraremos en sistemas bosónicos de dos niveles. Los sistemas que se estudiarán pertenecen a una clase más general de sistemas de dos niveles en los que las partículas que ocupan el nivel más bajo vienen caracterizadas por un momento angular cero (los llamaremos bosones  $s$ ), mientras que en el nivel superior las partículas pueden poseer un momento angular  $L$  arbitrario (los llamaremos bosones  $L_\mu$ , donde el subíndice  $\mu$  indica la proyección de momento angular). Se tiene, por tanto, un sistema de dos niveles con el nivel superior degenerado  $2L + 1$  veces. Así por ejemplo, para  $L = 2$  el modelo que se obtiene es muy apropiado para estudiar el núcleo atómico [53]. Se trata del modelo de bosones interactuantes (IBM). Si  $L = 1$

se obtiene el modelo vibrónico [22] y para  $L = 0$  el modelo de Lipkin [24–26], al cual se le dedicará el siguiente capítulo.

Estos modelos exhiben una dinámica interna no trivial que permiten estudiar fenómenos como las transiciones de fase cuánticas (QPTs). Los conceptos de transición de fase y punto crítico se definen, estrictamente hablando, en el límite termodinámico. No obstante, recientemente se ha sugerido que se pueden observar precursores de transiciones de fase en sistemas mesoscópicos de tamaño finito [1]. El primer inconveniente que se presenta experimentalmente cuando se pretenden explorar las transiciones de fase y puntos críticos cuánticamente es que, en general, se carece de un parámetro de control dotado de carácter físico que se pueda variar de un modo continuo<sup>1</sup>. Esto contrasta claramente con las transiciones de fase en sistemas macroscópicos donde generalmente se usa como parámetro de control la temperatura, o en general cualquier campo externo que se pueda controlar adecuadamente como puede ser el campo eléctrico  $\vec{E}$ , el campo magnético  $\vec{B}$ , etc. Sin embargo, en estudios teóricos de transiciones de fase cuánticas, este inconveniente se supera escribiendo un hamiltoniano en términos de uno o más parámetros de control que sí se pueden variar de forma continua.

Por otra parte, en los últimos años, los modelos basados en representaciones bosónicas de un álgebra de Lie  $U(n)$  han proporcionado una herramienta muy efectiva en la descripción de problemas de muchos cuerpos con  $d = n - 1$  grados de libertad [55, 56]. Una gran variedad de aplicaciones de estos modelos han sido elaborados en Física Nuclear y Molecular, en donde los modelos algebraicos han tenido gran éxito en las descripciones de las propiedades rotacionales y vibracionales de los espectros de energía [22, 53, 57]. En dichas aplicaciones el número de bosones,  $N$ , es del orden  $N \sim 2 - 90$  en Física Nuclear, donde los bosones representan pares de Cooper [53], y  $N \sim 2 - 300$  en Física Molecular, donde los bosones representan cuantos de vibración

---

<sup>1</sup>Esto no quiere decir que experimentalmente no se puedan estudiar QPTs, sólo que hay algunos sistemas, como por ejemplo los sistemas nucleares o moleculares, donde tal parámetro de control no existe. Aunque igualmente se pueden detectar las QPTs en dichos sistemas mediante el estudio de determinados parámetros de orden, tal y como se verá en este capítulo. No obstante, en la referencia [54] se presenta un sistema que experimenta una QPT y viene gobernada por el campo magnético.



---

(vibrones) [22]. Un hecho que se observa en estos modelos es la aparición de fases relacionadas con configuraciones específicas del estado fundamental del sistema, las cuales surgen a su vez como consecuencia de la existencia de simetrías dinámicas en dichos modelos algebraicos [55, 56]. Al mismo tiempo se han desarrollado algoritmos para estudiar transiciones de fase del estado fundamental en el marco de los modelos algebraicos [3, 58]. Estas fases surgen como consecuencia de la variación de un parámetro de control  $\alpha$  que gobierna el hamiltoniano y son transiciones de fase a temperatura cero. Las fases también se asocian a configuraciones geométricas del estado fundamental del sistema de tal modo que las transiciones de fase se conocen también como transiciones de forma.

En este capítulo nos centraremos primero en un modelo de dos niveles de interés en Física Molecular: el modelo vibrónico ( $L = 1$ ). En primer lugar, se hará una breve revisión de sus propiedades algebraicas y, posteriormente, se introducirá el formalismo Q-consistente para dicho modelo. El hamiltoniano que proporciona el citado formalismo constituirá el punto de partida para realizar un estudio del modelo vibrónico dentro y más allá de campo medio en forma aproximada. Además, se mostrará el uso de la transformación de Bogoliubov para diagonalizar el hamiltoniano y obtener expresiones analíticas para distintas magnitudes de interés relacionadas con el estado fundamental y los estados excitados. Estas expresiones analíticas se compararán con los resultados que se obtienen de diagonalizar exactamente el hamiltoniano en una base adecuada. En la segunda parte de este capítulo se presentará el caso bidimensional del modelo vibrónico para el que se realizará un estudio similar.

Con el objetivo de estudiar estos sistemas, se introduce un enfoque algebraico, basado en el concepto de álgebras generadoras de espectros, que resultará ser muy útil para estudiar diferentes magnitudes físicas en tales sistemas, como pueden ser los niveles de energía, gap de energía entre diferentes estados, número medio de partículas en los estados excitados, probabilidades de transición, etc.

### 3.1. Modelo algebraico $U(4)$ : modelo vibrónico

#### 3.1.1. Propiedades algebraicas del modelo vibrónico

En esta sección nos centraremos en la aplicación de los citados modelos algebraicos en Física Molecular. En concreto se tratará el modelo vibrónico para moléculas diatómicas  $X - Y$ , es decir, moléculas constituidas por dos átomos diferentes.

Un tratamiento algebraico de este problema requiere el uso del álgebra correspondiente al grupo unitario  $U(4)$  [22]. Una representación de este álgebra en términos de bosones se obtiene introduciendo cuatro operadores bosónicos de creación  $b_i^\dagger$  y cuatro de destrucción  $b_i$  con  $i = 1, 2, 3, 4$ . Las restricciones que se le imponen a dichos operadores se obtienen de consideraciones físicas. Así, por ejemplo, en primer lugar se desea describir moléculas que no estén sometidas a campos eléctricos o magnéticos externos que, por consiguiente, poseen estados con momento angular  $L$  bien definido. Además, los autoestados deben tener también paridad  $\pi$  bien definida. Estas restricciones exigen que el hamiltoniano sea invariante bajo rotaciones y reflexiones, con lo que se introducen operadores tensoriales esféricos de paridad bien definida [57]. Por otra parte, en la descripción de una molécula diatómica es importante la distancia entre los átomos, caracterizada en términos del vector distancia  $\vec{r}$ , que se comporta como un tensor de rango 1 bajo rotaciones y tiene paridad negativa. Bajo estas restricciones se propone una representación del álgebra  $U(4)$  en términos de un operador vectorial de componentes  $p_\mu^\dagger$  ( $\mu = \pm 1, 0$ ) y un operador escalar  $s^\dagger$ . Se puede visualizar por tanto el modelo vibrónico como un sistema de dos niveles con dos tipos de partículas, los bosones tipo  $s$  en el nivel inferior con momento angular  $L = 0$  y paridad positiva, y los bosones tipo  $p$  en el nivel superior con momento angular  $L = 1$  y paridad negativa. Mientras que los bosones tipo  $p$  se usan para describir los grados de libertad del dipolo, el papel físico de los bosones  $s$  no queda tan claro; su introducción se justifica fundamentalmente sobre bases fenomenológicas como modo de generar interacciones entre estados bosónicos con diferente número de bosones  $p$ .

Los operadores  $s, p$  satisfacen las usuales relaciones de conmutación

$$[s, s^\dagger] = 1, \quad [p_\mu, p_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}, \quad (3.1)$$

y el resto de conmutadores iguales a cero. Los cuatro operadores  $s^\dagger, p_\mu^\dagger$  se pueden denotar de una forma más compacta por  $\gamma_{lm}^\dagger$ , con  $l = 0, 1$  y siendo  $m$  la proyección del momento angular sobre un eje. Es bien conocido que mientras los operadores de creación  $\gamma_{lm}^\dagger$  se transforman como tensores esféricos bajo rotaciones, los operadores de aniquilación no lo hacen. Sin embargo, se pueden construir tensores esféricos introduciendo los operadores  $\tilde{\gamma}_{l,m} = (-1)^{l+m}\gamma_{l,-m}$ , de forma que se tiene que  $\tilde{p}_\mu = -(-1)^\mu p_{-\mu}$  y  $\tilde{s} = s$  para los bosones tipo  $p$  y los bosones tipo  $s$  respectivamente. Las etiquetas  $lm$  se pueden tratar como un único índice  $i$  que toma valores entre 1 y 4.

En general, dados dos tensores esféricos,  $\hat{T}^{L_1}$  y  $\hat{T}^{L_2}$ , se define el producto tensorial para construir un nuevo tensor esférico como

$$\hat{T}_M^L = [\hat{T}^{L_1} \times \hat{T}^{L_2}]_M^L = \sum_{M_1, M_2} \langle L_1 M_1 L_2 M_2 | LM \rangle \hat{T}_{M_1}^{L_1} \hat{T}_{M_2}^{L_2}, \quad (3.2)$$

donde  $\langle \dots | \dots \rangle$  son coeficientes Clebsch-Gordan,  $L$  es el momento angular total y  $M$  la proyección del momento angular. El producto escalar de dos operadores  $\hat{T}^L$  y  $\hat{U}^L$  se define como como

$$\hat{T}^L \cdot \hat{U}^L = (-1)^L \sqrt{2L+1} [\hat{T}^L \times \hat{U}^L]_0^0 = \sum_M (-1)^M \hat{T}_M^L \hat{U}_{-M}^L. \quad (3.3)$$

Usando la notación de (3.2) y (3.3) y teniendo en cuenta que el número de bosones totales  $N$  se conserva; es decir,  $N = \hat{n}_p + \hat{n}_s$ , donde  $\hat{n}_p$  y  $\hat{n}_s$  son el número de bosones  $p$  y el número de bosones  $s$  respectivamente [57], se puede escribir el hamiltoniano más general para este sistema, manteniendo

únicamente términos a uno y dos cuerpos, como

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_0 + \epsilon_p \hat{n}_p \\ & + e_1 [[p^\dagger \times p^\dagger]^{(0)} \times [\tilde{p} \times \tilde{p}]^{(0)}]_0^{(0)} + e_2 [[p^\dagger \times p^\dagger]^{(2)} \times [\tilde{p} \times \tilde{p}]^{(2)}]_0^{(0)} \\ & + e_3 [[p^\dagger \times p^\dagger]^{(0)} \times [\tilde{s} \times \tilde{s}]^{(0)} + [s^\dagger \times s^\dagger]^{(0)} \times [\tilde{p} \times \tilde{p}]^{(0)}]_0^{(0)}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

El primer término de la ecuación (3.4) contribuye únicamente a la energía de ligadura. Para realizar un análisis de las energías de excitación dentro del marco del modelo vibrónico se necesitan al menos 4 parámetros,  $\epsilon_p$ ,  $e_1$ ,  $e_2$ ,  $e_3$ . Sin embargo, frecuentemente es más útil reescribir el hamiltoniano  $\hat{H}$  en términos de los siguientes operadores,

$$\hat{n}_p = \sqrt{3}(p^\dagger \cdot \tilde{p}), \quad (3.5)$$

$$\hat{D} = [p^\dagger \times \tilde{s} + s^\dagger \times \tilde{p}]^{(1)}, \quad (3.6)$$

$$\hat{L} = \sqrt{2} [p^\dagger \times \tilde{p}]^{(1)}. \quad (3.7)$$

El operador  $\hat{n}_p$  es el operador número de bosones  $p$ ,  $\hat{L}$  es el operador momento angular,  $\hat{D}$  es el operador dipolar. En términos de estos nuevos operadores, es posible expresar el hamiltoniano (3.4) en función de operadores invariantes de  $U(4)$  y sus subálgebras de la siguiente manera [57],

$$\hat{H}' = E'_0 + \epsilon' \hat{n}_p + \alpha \hat{n}_p^2 + \beta(\hat{L}^2 + \hat{D}^2) + \gamma \hat{L}^2. \quad (3.8)$$

Éste es el desarrollo multipolar del hamiltoniano del modelo vibrónico en términos de los invariantes de Casimir  $\mathcal{C}_1(U(3)) = \hat{n}_p$ ,  $\mathcal{C}_2(U(3)) = \hat{n}_p^2$ ,  $\mathcal{C}_2(SO(4)) = \hat{L}^2 + \hat{D}^2$  y  $\mathcal{C}_2(SO(3)) = \hat{L}^2$ . Los nuevos coeficientes de (3.8) están relacionados con los de (3.4) mediante combinaciones lineales. Los subíndices 1 y 2 en los invariantes de Casimir hacen referencia a que son operadores lineales y cuadráticos respectivamente.

### 3.1.1.1. Cadenas de grupos

Puesto que se tienen cuatro operadores bosónicos  $\gamma_i$ , se pueden obtener 16 productos bilineales diferentes  $\gamma_i^\dagger \gamma_j = G_{ij}$  que generan el álgebra de Lie  $U(4)$ . No obstante, esta forma de obtener los generadores del grupo no es conveniente ya que resultan ser reducibles con respecto algunos de los subgrupos de  $U(4)$  [22]. Los generadores del álgebra de Lie de  $U(4)$  se pueden escribir de forma más conveniente en términos de tensores esféricos usando la llamada forma de Racah,

$$\hat{G}_{LM}(l, l') = [\gamma_l^\dagger \times \tilde{\gamma}_{l'}]_M^L ; \quad (l, l' = 0, 1). \quad (3.9)$$

Para construir los subálgebras que se obtienen a partir de  $U(4)$ , se buscan conjuntos de operadores del tipo (3.9) que cierren bajo las relaciones de conmutación. Si se exige que el momento angular sea un buen número cuántico, entonces el álgebra de las rotaciones en el espacio tridimensional  $SO(3)$  debe de ser un subálgebra contenida en cualquier cadena de álgebras de  $U(4)$ . Con esta restricción, las únicas descomposiciones posibles son [22, 57]:

- **Cadena I:**  $U(4) \supset U(3) \supset SO(3) \supset SO(2)$ .
- **Cadena II:**  $U(4) \supset SO(4) \supset SO(3) \supset SO(2)$ .

Una vez que se tienen identificadas las posibles cadenas, el siguiente paso consiste en construir bases en las que el hamiltoniano  $H$  sea diagonal. Para ello, se necesitan conocer las etiquetas que caracterizan las representaciones irreducibles de los distintos grupos que aparecen en las cadenas, de este modo se obtienen una serie de números cuánticos que son necesarios para clasificar de forma unívoca los posibles estados de la molécula.

**3.1.1.2. Cadena I**

Las etiquetas que clasifican los estados de esta cadena son [22]

$$\left| \begin{array}{cccc} U(4) & \supset & U(3) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ [N] & & n_p & & L & & M \end{array} \right\rangle. \quad (3.10)$$

Con las siguientes reglas de reducción: para un valor dado de  $N$ ,  $n_p = 0, 1, \dots, N$ ,  $L = n_p, n_p - 2, \dots, 1$  ó  $0$ ,  $M = 0, \pm 1, \dots, \pm L$ . Donde  $N$  es el número total de bosones y  $n_p$  es el número de bosones  $p$ . Las etiquetas  $L$  y  $M$  correspondientes a  $SO(3)$  y  $SO(2)$  respectivamente son el usual momento angular y su proyección.

Por consiguiente, los estados pertenecientes a la cadena I quedan completamente determinados por

$$| [N] n_p L M \rangle. \quad (3.11)$$

**3.1.1.3. Cadena II**

Las etiquetas que clasifican los estados de esta cadena son [22]

$$\left| \begin{array}{cccc} U(4) & \supset & SO(4) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ [N] & & \omega & & L & & M \end{array} \right\rangle. \quad (3.12)$$

Con las siguientes reglas de reducción: para un valor dado de  $N$ ,  $\omega = N, N - 2, \dots, 1$  ó  $0$ ,  $L = 0, 1, \dots, \omega$ . En realidad, para el grupo  $SO(4)$  se necesitan dos etiquetas  $\omega$  y  $\omega'$  que identifican representaciones simétricas y antisimétricas respectivamente. Sin embargo, únicamente se consideran las representaciones simétricas al tratar con bosones [57], por lo que es suficiente con mantener la etiqueta  $\omega$  considerando que siempre  $\omega' = 0$ .

Por consiguiente, los estados pertenecientes a la cadena II quedan completamente determinados por

$$| [N] \omega L M \rangle. \quad (3.13)$$

### 3.1.1.4. Las simetrías dinámicas

Ya se vió que el hamiltoniano general del modelo vibrónico se podía reescribir en términos de los invariantes de Casimir de todos los subgrupos de  $U(4)$  determinados anteriormente. Sin embargo, esta forma no es diagonal en ninguna de las cadenas I, II. Para encontrar sus autovalores hay que diagonalizarlo numéricamente. Esta diagonalización se puede realizar en cualquiera de las dos bases anteriores, ya que ambas proporcionan una base completa.

No obstante, en algunas ocasiones se puede resolver el problema analíticamente. Estos casos se tienen cuando el hamiltoniano está escrito únicamente en términos de los operadores de Casimir de una cadena dada. En ese caso se dice que el hamiltoniano  $H$  tiene una simetría dinámica. Está claro que esas simetrías dinámicas se obtendrán anulando diferentes coeficientes de (3.8) y puesto que sólo hay dos grupos de cadenas, sólo se obtendrán dos simetrías dinámicas.

- **Simetría dinámica  $U(3)$ .** *Límite moléculas no rígidas.*

Se corresponde con la cadena de grupos I. Se obtiene haciendo nulo  $\beta$  en (3.8). De modo que el hamiltoniano queda de la siguiente manera

$$\hat{H}^{(I)} = E'_0 + \epsilon' \hat{n}_p + \alpha \hat{n}_p^2 + \gamma \hat{L}^2. \quad (3.14)$$

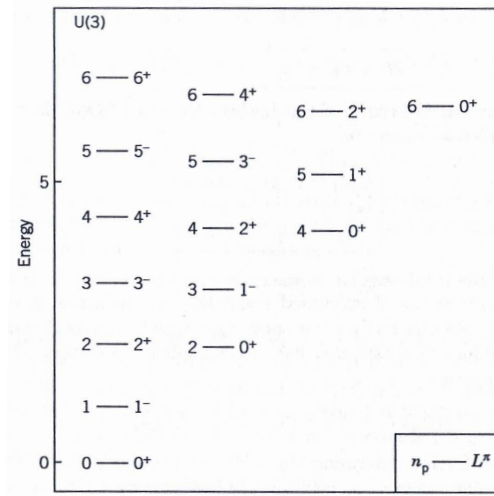
El valor esperado de  $\hat{H}^{(I)}$  en la representación base  $| [N] n_p L M \rangle$  es

$$E^{(I)} = E'_0 + \epsilon' n_p + \alpha n_p^2 + \gamma L(L + 1). \quad (3.15)$$

En la figura 3.1 se muestra un ejemplo típico de un espectro de energía correspondiente a la simetría dinámica  $U(3)$ . Claramente se observa que es un espectro de tipo vibracional.

- **Simetría dinámica  $SO(4)$ .** *Límite moléculas rígidas.*

Se corresponde con la cadena de grupos II. Se obtiene haciendo nulo  $\epsilon'$  y  $\alpha$  en (3.8). De modo que el hamiltoniano queda de la siguiente



**Figura 3.1:** Espectro de energía del hamiltoniano (3.14) correspondiente a la simetría dinámica  $U(3)$  con  $E'_0 = 0$ ,  $e' = 1$ , y  $\alpha = \gamma = 0,01$  para  $N = 6$  bosones. Los niveles se han etiquetado por  $n_p$ , momento angular  $L$ , y paridad  $\pi = (-)^{n_p} = (-)^L$ . La energía aparece en unidades arbitrarias.

manera

$$\hat{H}^{(II)} = E'_0 + \beta(\hat{L}^2 + \hat{D}^2) + \gamma\hat{L}^2. \quad (3.16)$$

El valor esperado de  $\hat{H}^{(II)}$  en la base  $| [N] \omega L M \rangle$  es

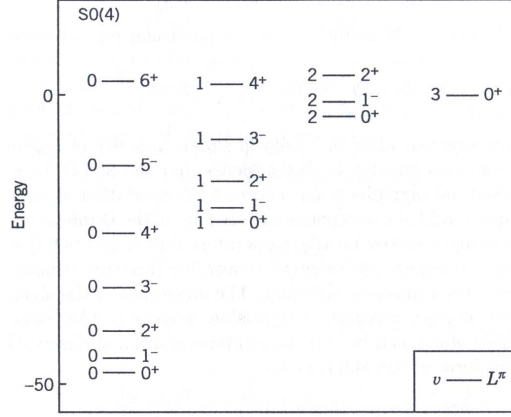
$$E^{(II)} = E'_0 + \beta\omega(\omega + 2) + \gamma L(L + 1). \quad (3.17)$$

En la figura 3.2 se muestra un ejemplo típico de un espectro de energía correspondiente a la simetría dinámica  $SO(4)$ . Claramente se observa que es un espectro de tipo rotacional.

En la figura 3.2 se ha introducido la etiqueta  $\nu$ , que está relacionada con  $\omega$ :  $\nu = (N - \omega)/2$ , pudiendo tomar  $\nu$  los valores  $\nu = 0, 1, \dots, \frac{(N-1)}{2}$  ó  $\frac{N}{2}$ .

Hay que señalar que la mayoría de los espectros moleculares para moléculas X-Y no se ajustan exactamente a ninguno de estos dos límites de simetría. En general, se observa que los espectros se presentan como casos intermedios entre estos dos casos límites. Sin embargo, dichos casos límites son útiles porque proporcionan un conjunto de relaciones analíticas con las





**Figura 3.2:** Espectro de energía del hamiltoniano (3.16) correspondiente a la simetría dinámica  $SO(4)$  con  $E'_0 = 0$ ,  $\beta = -1$ , y  $\gamma = 1,2$  para  $N = 6$  bosones. Los niveles se han etiquetado por  $\nu = (N - \omega)/2$ , momento angular  $L$ , y paridad  $\pi = (-)^L$ . La energía aparece en unidades arbitrarias.

que se pueden contrastar fácilmente datos experimentales y/o cálculos más complicados. Para estudiar esos casos es necesario volver al hamiltoniano (3.8) y diagonalizarlo numéricamente en alguna de las bases (3.11) ó (3.13).

### 3.1.1.5. Formalismo Q-consistente

El hamiltoniano que se propone para nuestro estudio es una generalización del formalismo Q-consistente (CQF) propuesto dentro del IBM para los núcleos y que depende de dos parámetros de control  $\alpha$  y  $\chi$  [59]

$$\hat{\mathcal{H}} = \alpha \hat{n}_L - \frac{1 - \alpha}{N} \hat{Q}^x \cdot \hat{Q}^x, \quad (3.18)$$

donde el operador  $\hat{n}_L = \sum_{\mu} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}$  es el operador número de bosones en el nivel superior,  $N$  es el número total de bosones, el símbolo  $\cdot$  indica el producto escalar definido en (3.3) y  $\hat{Q}^x$  es el operador cuadrupolar generalizado,

$$\hat{Q}_{\mu}^x = (s^{\dagger} \tilde{L} + L^{\dagger} s)_{\mu}^{(L)} + \chi [L^{\dagger} \times \tilde{L}]_{\mu}^{(L)}. \quad (3.19)$$

El hamiltoniano (3.18) comprende diferentes modelos dependiendo del valor de  $L$ . A modo de ejemplo, si se fija  $L = 2$  entonces el hamiltoniano (3.18) es el conocido hamiltoniano CQF para el modelo de bosones interactuantes

(IBM). A pesar de no ser el hamiltoniano IBM más general, sí describe las propiedades más importantes de los estados más bajos en energía en una amplia variedad de núcleos y permite una descripción de diferentes fases nucleares y transiciones de fase.

El caso que nos interesa es cuando  $L = 1$  porque dicho hamiltoniano es muy apropiado para el estudio del diagrama de fases del modelo vibrónico, de interés en Física Molecular [22]. En este caso particular el hamiltoniano adopta la forma,

$$\hat{\mathcal{H}} = \alpha \hat{n}_p - \frac{1 - \alpha}{N} (s^\dagger \tilde{p} + p^\dagger s)^{(1)} \cdot (s^\dagger \tilde{p} + p^\dagger s)^{(1)}. \quad (3.20)$$

El parámetro de control  $\alpha \in [0, 1]$  es adimensional y nos permite ir desde el límite moléculas no rígidas al límite moléculas rígidas. En términos de la teoría de grupos, cuando  $\alpha = 1$  el sistema se encuentra en la cadena de simetría de  $U(3)$  (cadena I), es decir, sus operadores son los invariantes de Casimir asociados a la simetría dinámica de  $U(3)$  y cuando  $\alpha = 0$  el sistema se encuentra en la cadena de simetría de  $SO(4)$  (cadena II), es decir, sus operadores son los invariantes de Casimir asociados a la simetría dinámica de  $SO(4)$ . Para los valores  $0 \leq \alpha \leq 1$  el sistema será una mezcla de las dos cadenas o fases.

En la siguiente sección, se presenta primero un estudio de campo medio para este hamiltoniano. Posteriormente, iremos más allá de la aproximación de campo medio usando una transformación de Holstein-Primakoff sobre el hamiltoniano general (3.18), para después particularizarlo al caso del modelo vibrónico.

### 3.1.2. Estudio del modelo vibrónico en la aproximación de campo medio

A finales de los años 70, R. Gilmore y D. Feng introdujeron un formalismo [3, 58, 60] que proporciona el límite  $N \rightarrow \infty$  (conocido como clásico, termodinámico o límite de campo medio) del modelo en términos de parámetros variacionales que confieren al sistema una interpretación geométrica, de tal

manera que estos parámetros variacionales se interpretan como variables de forma o geométricas. A su vez, dichas variables se usan para definir el diagrama de fases del sistema. Señalar que el límite se llama clásico porque este formalismo proporciona un hamiltoniano clásico en términos de coordenadas (y momentos clásicos), en el que se puede estudiar las transiciones de fase acorde con la teoría de Landau para fenómenos críticos. Por otra parte, el nombre de campo medio se debe a un hecho demostrado a finales de los años 70 por Gilmore y Feng [60], según el cual, si se minimiza el valor esperado para el estado fundamental del hamiltoniano, que es regular en el límite de  $N$  grande, se obtiene una aproximación a la energía del estado fundamental por partícula,  $E/N$ , que converge a la energía exacta cuando  $N \rightarrow \infty$ .

El modo usual de introducir estas variables de forma para obtener el diagrama de fases del modelo dado es mediante el uso del formalismo de los estados intrínsecos, también conocido como aproximación de Hartree-Bose [38, 61–63]. En esta aproximación, el estado fundamental de (3.20), con simetría axial, es un condensado bosónico, cuyos bosones se mueven independientemente en un campo promedio. Estos bosones se definen como

$$\Gamma_c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}}(s^\dagger + \beta p_0^\dagger), \quad (3.21)$$

por lo que el condensado de  $N$  bosones es

$$|c\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}(\Gamma_c^\dagger)^N|0\rangle \quad (3.22)$$

y  $|0\rangle$  denota el estado de vacío bosónico.

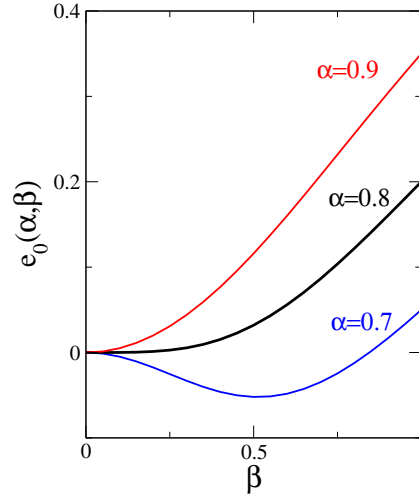
El estado coherente (3.22) es el correspondiente estado intrínseco para el estado fundamental de  $U(4)$  [22]. En general, estos estados coherentes de  $U(n)$  los introdujeron Gilmore [58] y otros [61, 62, 64] en el contexto de la Física Nuclear (véase por ejemplo el modelo de Quasi-espines para  $U(2)$  de Lipkin-Meshkov-Glick [24] y el modelo de Bosones Interactuantes para  $U(6)$  de Arima-Iachello [53]) y más tarde en el contexto de la Física Molecular [65].

En este marco, las excitaciones sobre el estado fundamental se construyen directamente reemplazando en el estado fundamental un bosón en dicho estado por un bosón excitado, ésta no es más que la aproximación Tamm-Dancoff (TDA) explicada en el capítulo 1.

La correspondiente superficie de energía se obtiene calculando el valor esperado del hamiltoniano en el estado  $|c\rangle \equiv |N, \beta\rangle$ . Dicha superficie de energía, expresada en función del parámetro variacional  $\beta$ , en el límite de  $N$  grande, viene dada para el hamiltoniano (3.20) por

$$E(N, \beta, \alpha) = \langle N, \beta | H | N, \beta \rangle = N \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} [5\alpha - 4 + \alpha\beta^2]. \quad (3.23)$$

En la figura 3.3 se muestran algunas superficies de energía por bosón como función del parámetro de deformación  $\beta$  para distintos valores de  $\alpha$ .



**Figura 3.3:** Superficies de energía por bosón para el hamiltoniano vibrónico (3.20) en función de  $\beta$  para valores seleccionados del parámetro de control  $\alpha$ .

Minimizando la energía (3.23) con respecto a  $\beta$ , para determinados valores del parámetro de control  $\alpha$ , se obtiene el valor de equilibrio  $\beta_e$  que define la fase del sistema. Si  $\beta_e = 0$  se tiene la fase simétrica, y si  $\beta_e \neq 0$  se tiene la fase no simétrica. La correspondiente transición de forma ha sido ampliamente estudiada [3, 15, 66]. Los resultados conocidos se pueden resumir del siguiente

modo.  $\beta = 0$  siempre es un punto estacionario. Para el caso  $\alpha > 4/5$ ,  $\beta = 0$  es el mínimo absoluto, para  $\alpha \leq 4/5$  la superficie de energía presenta un mínimo para  $\beta \neq 0$  y hay una relación simple entre el valor  $\beta$  del mínimo y el parámetro de control  $\alpha$ ,

$$\beta_e = \sqrt{\frac{5\alpha - 4}{3\alpha - 4}}, \quad (3.24)$$

siendo  $\beta = 0$  un máximo. Se distinguen así pues dos zonas, una zona deformada en la que  $\beta_e \neq 0$  para todo  $0 < \alpha < 4/5$ , y una zona esférica donde  $\beta_e = 0$  para todo  $4/5 < \alpha < 1$ . En el caso  $\alpha = 4/5$ ,  $\beta = 0$  es un punto de inflexión. El punto crítico se puede calcular que es [15]

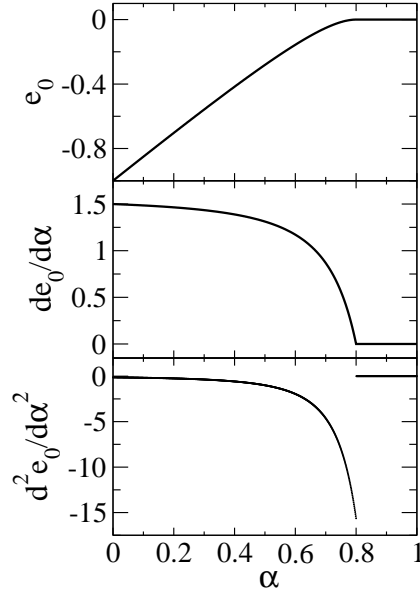
$$\alpha_c = \frac{4}{5}. \quad (3.25)$$

En la figura 3.3 se observa cómo, para  $\alpha = 4/5$ , la superficie de energía es muy plana cerca del origen. Para  $\alpha > 4/5$  la superficie tiene un mínimo en  $\beta = 0$ , mientras que para  $\alpha < 4/5$  el mínimo se presenta para  $\beta > 0$ . En ningún momento coexisten dos mínimos de distinta forma por lo que concluimos que ésta es una transición de segundo orden. Esto también se puede ver calculando la energía del estado fundamental y sus primera y segunda derivadas como función del parámetro de control  $\alpha$ . Esto es lo que presentamos en la figura 3.4, donde se observa cómo tanto la energía como su primera derivada son continuas en  $\alpha = 4/5$ , mientras que la segunda derivada es discontinua en ese punto. Atendiendo a la clasificación de Erhenfest, puesto que la discontinuidad se presenta en la segunda derivada, se trataría por tanto de una transición de segundo orden.

Además de la superficie de energía, se puede calcular el valor medio del número de bosones tipo  $p$  en el estado fundamental  $|c\rangle \equiv |N, \beta\rangle$ ,

$$\langle \hat{n}_p \rangle_{gs} = N \frac{\beta_e^2}{1 + \beta_e^2}. \quad (3.26)$$

La descripción de campo medio presentada brevemente en esta sección



**Figura 3.4:** Energía del estado fundamental y sus primera y segunda derivadas como función del parámetro de control  $\alpha$ .

es únicamente válida en el límite de  $N$  grande, es decir, sólo contempla la dependencia en  $N$  debida al término de orden superior en  $N$ . Si se desean estudiar correcciones debidas al tamaño finito del sistema, necesariamente hay que ir más allá del campo medio. Eso es lo que se mostrará en la siguiente sección.

### 3.1.3. Estudio del modelo vibrónico en la aproximación de más allá de campo medio

La descripción que proporciona el campo medio para la energía del estado fundamental y otras magnitudes de interés es únicamente válida en el orden más alto en  $N$  [15]. Si se quieren tener en cuenta efectos de  $N$  finito hay que expresar el hamiltoniano en potencias de  $1/N$  que permitan ir incluyendo ordenadamente sucesivas correcciones en  $N$ . Esto se puede hacer de un modo eficiente con una transformación de Holstein-Primakoff [67]. Las ventajas de la citada transformación son que es hermítica, preserva las relaciones de conmutación para los bosones y permite un desarrollo adecuado

en potencias de  $N$ . Además, el primer término del desarrollo coincide con la contribución de campo medio (3.23). En lo que sigue se realizará el estudio de la transformación de forma genérica para un sistema de  $L$  arbitrario, posteriormente se particularizará para  $L = 1$  que es el caso del modelo vibrónico.

El desarrollo de Holstein-Primakoff elimina los bosones tipo  $s$ . En nuestro caso de dos niveles tenemos de un modo genérico bosones tipo  $s$  y tipo  $L_\mu$ .  $L_\mu^\dagger$  crea un bosón en el nivel superior  $L$  con proyección  $\mu$ , mientras que  $L_\mu$  lo destruye. La transformación de Holstein-Primakoff pasa de bosones  $s$  y  $L_\mu$  a unos nuevos bosones  $b_\mu$  del siguiente modo,

$$L_\mu^\dagger L_\nu = b_\mu^\dagger b_\nu, \quad (3.27)$$

$$L_\mu^\dagger s = N^{1/2} b_\mu^\dagger (1 - \hat{n}_b/N)^{1/2} = (s^\dagger L_\mu)^\dagger, \quad (3.28)$$

$$s^\dagger s = N - \hat{n}_b. \quad (3.29)$$

Siendo  $\hat{n}_b$  el operador número de bosones  $b$ . Estos satisfacen las relaciones de conmutación  $[b_\mu, b_\nu^\dagger] = \delta_{\mu,\nu}$  en cada orden de  $N$  en el desarrollo de Taylor de la raíz cuadrada en torno a  $n_b/N = 0$ . Si se quieren estudiar sistemas deformados, se introduce una nueva transformación denominada de desplazamiento (Shift) en la que se introduce un nuevo tipo de bosones  $c$  cuya relación con los bosones  $b$  es la siguiente:

$$b_\mu^\dagger = \sqrt{N} \lambda_\mu^* + c_\mu^\dagger, \quad (3.30)$$

donde los  $\lambda_\mu$  en general son números complejos que constituyen un vector de dimensión  $(2L + 1)$ . Dicha transformación contempla al mismo tiempo la fase esférica (fase simétrica) imponiendo que  $\lambda_\mu = 0$  para todo  $\mu$ , y la fase deformada (fase no simétrica) si  $\lambda_\mu \neq 0$ . En este último caso, se considerará sin pérdida de generalidad que  $\lambda_0 \neq 0$ . Con estas dos transformaciones se

tiene que el hamiltoniano genérico (3.18) se transforma como,

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}} = & N^1 \lambda_0^2 \left\{ 5\alpha - 4 - 4(\alpha - 1)\lambda_0^2 + (\alpha - 1)\chi\epsilon_{0,0}^{(L)}\lambda_0 \left[ 4(1 - \lambda_0^2)^{1/2} + \chi\epsilon_{0,0}^{(L)}\lambda_0 \right] \right\} \\
& + N^{1/2}\lambda_0 \left( c_0^\dagger + c_0 \right) \left\{ 5\alpha - 4 - 8\lambda_0^2(\alpha - 1) \right. \\
& + 2(\alpha - 1)\chi\epsilon_{0,0}^{(L)}\lambda_0 \left[ \frac{-4\lambda_0^2 + 3}{(1 - \lambda_0^2)^{1/2}} + \chi\epsilon_{0,0}^{(L)}\lambda_0 \right] \left. \right\} \\
& + N^0 \left\{ [3\alpha - 2 - 6\lambda_0^2(\alpha - 1)] \hat{n}_c + (\alpha - 1) \left[ (2L + 1) - (2L + 3)\lambda_0^2 \right. \right. \\
& + (1 - \lambda_0^2) (P_c^\dagger + P_c) - 4\lambda_0^2 \left( c_0^{\dagger 2} + 2c_0^\dagger c_0 + c_0^2 \right) \left. \right] \\
& + 2\chi(\alpha - 1) \left\{ \lambda_0(1 - \lambda_0^2)^{1/2} \left[ \sum_{\mu=-L}^{+L} \epsilon_{0,\mu}^{(L)} + 2c_\mu^\dagger c_\mu \left[ (-1)^\mu \epsilon_{\mu,-\mu}^{(L)} + \epsilon_{0,\mu}^{(L)} \right] \right. \right. \\
& + (-1)^\mu \epsilon_{\mu,0}^{(L)} \left( c_\mu^\dagger c_{-\mu}^\dagger + c_\mu c_{-\mu} \right) \left. \right] \\
& - \frac{\lambda_0^3 \epsilon_{0,0}^{(L)}}{2(1 - \lambda_0^2)^{1/2}} \left[ 2 + 3 \left( c_0^{\dagger 2} + 2c_0^\dagger c_0 + c_0^2 \right) + 2\hat{n}_c \right] \\
& - \frac{\lambda_0^5 \epsilon_{0,0}^{(L)}}{4(1 - \lambda_0^2)^{3/2}} \left( 1 + c_0^{\dagger 2} + 2c_0^\dagger c_0 + c_0^2 \right) \left. \right\} + \\
& + \chi^2(\alpha - 1)\lambda_0^2 \left\{ 1 + \sum_{\mu=-L}^{+L} 2c_\mu^\dagger c_\mu \left[ (-1)^\mu \epsilon_{0,0}^{(L)} \epsilon_{\mu,-\mu}^{(L)} + \epsilon_{0,\mu}^{(L)2} \right] + \right. \\
& \left. (-1)^\mu \epsilon_{0,\mu}^{(L)2} \left( c_\mu^\dagger c_{-\mu}^\dagger + c_\mu c_{-\mu} \right) \right\} \left. \right\} + O(1/\sqrt{N}) \\
& = \hat{H}_1 + \hat{H}_{1/2} + \hat{H}_0 + O(1/\sqrt{N}),
\end{aligned}$$

donde  $\epsilon_{\mu,\nu}^{(L)} = \langle L, \mu; L, \nu | L, \mu + \nu \rangle$  y  $P_c^\dagger = c^\dagger \cdot c^\dagger = (P_c)^\dagger$ .

La notación para los sumandos del hamiltoniano indica su dependencia con el número de partículas  $N$ , esto es,  $\hat{H}_1$  depende como  $N$ ,  $\hat{H}_{1/2}$  depende como  $N^{1/2}$  y así sucesivamente. El término de orden  $N$  ( $\hat{H}_1$ ) es exactamente



la energía de campo medio. En efecto, imponiendo  $\lambda = \beta/\sqrt{1 + \beta^2}$  se obtiene,

$$E(N, \beta, \alpha, \omega) = N \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} \left[ 5\alpha - 4 + \alpha\beta^2 + \beta\omega(\alpha - 1)(4 + \beta\omega) \right], \quad (3.31)$$

definiendo  $\omega = \chi\epsilon_{0,0}^{(L)}$ . Para  $L = 1$  se tiene que  $\omega = 0$  por lo que el hamiltoniano (3.31) se simplifica bastante y (3.31) se reduce a la expresión (3.23),

$$E(N, \beta, \alpha) = N \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} \left[ 5\alpha - 4 + \alpha\beta^2 \right], \quad (3.32)$$

recuperándose los resultados discutidos en la sección anterior. Aquí queremos ir más allá del campo medio, así que debemos considerar en la ecuación (3.31) los términos siguientes a  $\hat{H}_1$ . El primer término no considerado en campo medio es  $\hat{H}_{1/2}$ . Sin embargo, en el valor de equilibrio  $\beta_e(\lambda_e)$  se tiene que  $\hat{H}_{1/2}(\beta_e) = 0$  ya que  $\hat{H}_{1/2} = \frac{1}{2} \frac{\partial \hat{H}_1}{\partial \lambda}$ , el cual evidentemente es nulo en  $\lambda_e$ . De modo que la primera corrección al campo medio la proporciona  $\hat{H}_0$ , que es una forma cuadrática en los operadores de bosones  $c$  pero no diagonal.

Para diagonalizar  $\hat{H}_0$  se realiza una transformación de Bogoliubov. Ésta dependerá de la fase, esférica o deformada, en la que se encuentre el sistema. Así se distinguen dos casos, según la zona que se estudie: fase simétrica (esférica) y fase no simétrica (deformada).

### 3.1.3.1. Transformación de Bogoliubov en la fase esférica para el modelo vibrónico

Recordemos que la fase esférica se tiene para valores de  $\alpha$  comprendidos entre  $4/5 \leq \alpha \leq 1$ , tomando el parámetro variacional el valor de equilibrio  $\beta_e = 0$ . En dicha fase es fácil comprobar que la energía de campo medio es igual a cero, con lo que el hamiltoniano (3.31) adopta la forma

$$\hat{H} = (3\alpha - 2)\hat{n}_c + (\alpha - 1) \left[ 3 + (P_c^\dagger + P_c) \right] + O(1/N), \quad (3.33)$$

que es diagonalizable vía una transformación de Bogoliubov

$$\begin{aligned} c_\mu^\dagger &= u_\mu \xi_\mu^\dagger + v_\mu \tilde{\xi}_\mu, \\ \tilde{c}_\mu &= u_\mu \tilde{\xi}_\mu + v_\mu \xi_\mu^\dagger. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Los coeficientes verifican que  $u_\mu^2 - v_\mu^2 = 1$  para que la transformación sea canónica, es decir, para que los nuevos operadores bosónicos,  $\xi_\mu^\dagger$  y  $\tilde{\xi}_\mu$ , verifiquen las mismas relaciones de conmutación que los  $c_\mu$ . Además, las fases se eligen tal que  $u_\mu = u_{-\mu}$  y  $v_\mu = v_{-\mu}$ , de este modo la energía de campo medio es mínima. Con esto, el hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H} = \frac{3}{2} [-\alpha + (\alpha(5\alpha - 4))^{1/2}] + \hat{n}_\xi (\alpha(5\alpha - 4))^{1/2} + O(1/N), \quad (3.35)$$

siendo  $\hat{n}_\xi$  el operador número de bosones  $\xi$ .

En esta fase hay un fonón tres veces degenerado,  $\xi$ . El hamiltoniano es completamente armónico y por tanto, la energía de excitación de dos fonones es exactamente el doble que la energía de excitación de un fonón.

Cuando se tiene en cuenta tanto el resultado de campo medio como la corrección a orden  $N^0$  (3.35), se pueden obtener directamente la energía por partícula del estado fundamental y el gap:

$$\mathcal{E}^{esf} = \frac{3}{2} [-\alpha + (\alpha(5\alpha - 4))^{1/2}] N^{-1}, \quad (3.36a)$$

$$\Delta^{esf} = (\alpha(5\alpha - 4))^{1/2}. \quad (3.36b)$$

Otro observable de interés que se puede calcular es el número de bosones tipo  $p$  en cada estado. El teorema de Hellman-Feynman es muy útil para calcular dicho observable. En efecto, en virtud del teorema de Hellman-Feynman, según el cual si se considera un operador dependiente de un parámetro  $\lambda$ , por ejemplo el hamiltoniano  $\hat{H}(\lambda)$ , y un autovector normalizado de  $\hat{H}(\lambda)$ ,  $|\psi(\lambda)\rangle$ , con autovalor  $E(\lambda)$ , entonces se tiene que

$$\frac{dE}{d\lambda} = \langle \psi(\lambda) | \frac{d\hat{H}}{d\lambda} | \psi(\lambda) \rangle. \quad (3.37)$$

Es decir, la derivada de un autovalor de un operador dado es igual al valor esperado de la derivada de este operador con la correspondiente autofunción. Así pues, haciendo uso de este teorema se puede calcular el número medio de bosones  $p$  en cada estado obteniéndose que,

$$\langle \hat{n}_p \rangle = \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ (1 + \theta) \langle \hat{H} \rangle \right], \quad (3.38)$$

con  $\theta = \frac{\alpha}{1-\alpha}$ . La contribución de campo medio es cero como sabemos, con lo que la primera aproximación no nula procede del término proporcional a  $N^0$  en la energía. En el estado fundamental  $|0\rangle_{gs}$  no hay ningún bosón  $\xi$  con lo que  $\hat{n}_\xi |0\rangle_{gs} = 0$  y en el estado excitado  $|q\rangle_{q\xi}$  hay  $q$  bosones  $\xi$  de modo que  $\hat{n}_\xi |q\rangle_{q\xi} = q |q\rangle_{q\xi}$ , por tanto, usando el resultado (3.38) se deduce que

$$\langle \hat{n}_p \rangle_{gs} = \frac{3}{2} \left[ \frac{3\alpha - 2}{(\alpha(5\alpha - 4))^{1/2}} - 1 \right] + O(1/N), \quad (3.39)$$

$$\langle \hat{n}_p \rangle_{q\xi} = \langle \hat{n}_p \rangle_{gs} + q \left[ \frac{3\alpha - 2}{(\alpha(5\alpha - 4))^{1/2}} \right] + O(1/N). \quad (3.40)$$

### 3.1.3.2. Transformación de Bogoliubov en la fase deformada para el modelo vibrónico

En la fase deformada se tenía que  $\beta_e \neq 0$  para  $0 \leq \alpha < 4/5$  y el hamiltoniano (3.31) se puede expresar como

$$\hat{H} = E(\alpha, \beta_e) + C + \sum_{\mu=-1}^{+1} \hat{H}_\mu, \quad (3.41)$$

donde  $E(\alpha, \beta_e)$  es la energía que proporciona el campo medio,  $C$  es una constante y  $\hat{H}_\mu = \hat{H}_{-\mu}$ .

Este caso es más complicado que el anterior ya que el hamiltoniano (3.41) debe ser diagonalizado separadamente para cada valor de  $\mu$  ( $\mu = 0, \pm 1$ ). Así pues, se tiene una transformación de Bogoliubov (3.34) para cada componente  $\mu$  en la que los diferentes coeficientes  $u_\mu$  y  $v_\mu$  quedan determinados imponiendo la cancelación de los términos no diagonales en  $\xi_\mu^\dagger$  y  $\tilde{\xi}_\mu$ .

Para  $\mu = 0$  se tiene que:

$$\hat{H}_0 = \Delta_0(c_0^\dagger c_0^\dagger + c_0 c_0) + \Theta_0 c_0^\dagger c_0, \quad (3.42)$$

donde  $\Delta_0 = \Delta_0(\alpha, \beta_e)$  y  $\Theta_0 = \Theta_0(\alpha, \beta_e)$  son coeficientes conocidos dados el parámetro  $\beta_e$  y el punto  $\alpha$ . Con la transformación de Bogoliubov detallada anteriormente se obtiene que para que se anulen los coeficientes no diagonales se deben satisfacer las ecuaciones,

$$\begin{aligned} \Delta_0(u_0^2 + v_0^2) + \Theta_0 u_0 v_0 &= 0, \\ u_0^2 - v_0^2 &= 1. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Recordemos que la última expresión del sistema (3.43) no es más que la condición que se debe verificar para que la transformación de Bogoliubov sea canónica.

La solución que se obtiene es

$$\begin{aligned} u_0 &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Theta_0}{\sqrt{\Theta_0^2 - 4\Delta_0^2}} \right)}, \\ v_0 &= -\sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\Theta_0}{\sqrt{\Theta_0^2 - 4\Delta_0^2}} - 1 \right)}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Con lo que, finalmente, se consigue diagonalizar (3.42) en función de los nuevos operadores bosónicos  $\xi_0$ ,

$$\hat{H}_0 = E_0 + \Phi_0^{1/2} \xi_0^\dagger \xi_0, \quad (3.45)$$

en el que,  $\Phi_0^{1/2} = \Theta(u_0^2 + v_0^2) + 4u_0 v_0 \Delta = \sqrt{\Theta^2 - 4\Delta^2}$  es el gap del sistema y  $E_0 = 2u_0 v_0 \Delta + v_0 \Theta = \frac{-\Theta}{2} + \frac{\Phi_0^{1/2}}{2}$  es la energía del estado fundamental.

Para  $\mu = 1$  el hamiltoniano es mezcla de las componentes  $\mu = 1$  y  $\mu = -1$ ,

$$\hat{H}_{1,-1} = \Delta_1(c_1^\dagger c_{-1}^\dagger + c_1 c_{-1}) + \Theta_1 c_1^\dagger c_1 + \Theta_{-1} c_{-1}^\dagger c_{-1}, \quad (3.46)$$

donde  $\Delta_1 = \Delta_1(\alpha, \beta_e)$  y  $\Theta_1 = \Theta_1(\alpha, \beta_e)$ ,  $\Theta_{-1} = \Theta_{-1}(\alpha, \beta_e)$  son coeficientes conocidos. Se observa que  $\Theta_1 = \Theta_{-1}$  con lo que (3.46) se puede expresar como

$$\hat{H}_{1,-1} = \Delta_1(c_1^\dagger c_{-1}^\dagger + c_1 c_{-1}) + \Theta_1(c_1^\dagger c_1 + c_{-1}^\dagger c_{-1}). \quad (3.47)$$

Una vez más, con la transformación de Bogoliubov se obtiene que para que se anulen los coeficientes no diagonales en el hamiltoniano se deben satisfacer las ecuaciones,

$$\begin{aligned} \Delta_1(u_1^2 + v_1^2) - 2\Theta_1 u_1 v_1 &= 0, \\ u_1^2 - v_1^2 &= 1. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Las ecuaciones para los coeficientes  $v_{-1}$  y  $u_{-1}$  son exactamente las mismas que las de  $v_1$  y  $u_1$ , de ahí que se vaya a obtener que una vez diagonalizado el hamiltoniano se tenga  $\hat{H}_1 = \hat{H}_{-1}$ . Nuevamente, la última expresión del sistema (3.48) no es más que la condición que se debe satisfacer para que la transformación de Bogoliubov sea canónica, al igual que en el caso  $\mu = 0$ .

La solución que se obtiene es

$$\begin{aligned} u_1 &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Theta_1}{\sqrt{\Theta_1^2 - \Delta_1^2}} \right)}, \\ v_1 &= -\sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\Theta_1}{\sqrt{\Theta_1^2 - \Delta_1^2}} - 1 \right)}, \end{aligned} \quad (3.49)$$

resultando que el hamiltoniano (3.46) queda diagonalizado de la siguiente forma:

$$\hat{H}_{1,-1} = E_{1,-1} + \Phi_1^{1/2} \xi_1^\dagger \xi_1 + \Phi_{-1}^{1/2} \xi_{-1}^\dagger \xi_{-1}, \quad (3.50)$$

donde  $\Phi_1^{1/2} = \Phi_{-1}^{1/2} = \Theta_1(u_1^2 - v_1^2) - 2u_1 v_1 \Delta_1 = \sqrt{\Theta_1^2 - \Delta_1^2}$  es el gap del sistema

de los nuevos bosones  $\xi_1$  y  $\xi_{-1}$  respectivamente y  $E_1 = E_{-1} = 2v_1^2\Theta_1 - 2u_1v_1\Delta_1 = \frac{\Phi_1^{1/2}}{2} + \frac{\Phi_{-1}^{1/2}}{2} - \Theta_1$  es la energía del estado fundamental.

Se concluye que el hamiltoniano diagonalizado completamente componente a componente en  $\mu$  en la fase deformada resulta ser:

$$\hat{H} = E(\alpha, \beta_e) + \frac{1}{2(1 + \beta_e^2)} \left[ -3\alpha + (13\alpha - 16)\beta_e^2 \right] + \sum_{\mu=-1}^{+1} \left( \frac{\Phi_\mu(\alpha, \beta_e)^{1/2}}{2} + \hat{n}_{\xi_\mu} \Phi_\mu^{1/2}(\alpha, \beta_e) \right) + O(1/N), \quad (3.51)$$

con los coeficientes:

$$\Phi_0(\alpha, \beta_e) = \frac{[\alpha - (3\alpha - 4)\beta_e^2][5\alpha - 4 - (19\alpha - 20)\beta_e^2]}{(1 + \beta_e^2)^2}, \quad (3.52)$$

$$\Phi_{\pm 1}(\alpha, \beta_e) = \frac{[\alpha - (3\alpha - 4)\beta_e^2][5\alpha - 4 - (3\alpha - 4)\beta_e^2]}{(1 + \beta_e^2)^2}. \quad (3.53)$$

Las energías de excitación para los modos  $\mu = \pm 1$  se anulan, ya que para  $\beta_e \neq 0$  se tiene que  $\phi_{\pm 1}(\alpha, \beta_e) \propto \frac{\partial E(\alpha, \beta)}{\partial \beta} |_{\beta_e} = 0$ . Esto está de acuerdo con el hecho de que las excitaciones para  $\mu = \pm 1$  se corresponden con rotaciones del estado fundamental [15].

Finalmente, al igual que en la zona esférica, usando el teorema de Hellmann-Feynman se puede calcular el número de bosones  $p$  en cada estado, obteniéndose que,

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_p \rangle_{gs} &= N \frac{\beta_e^2}{1 + \beta_e^2} + (1 - \alpha)^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{1}{2(1 + \beta_e^2)(1 - \alpha)} \left[ -3\alpha + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. (13\alpha - 16)\beta_e^2 \right] + \sum_{\mu=-1}^{\mu=+1} \frac{\Phi_\mu(\alpha, \beta_e)^{1/2}}{2(1 - \alpha)} \right), \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\langle \hat{n}_p \rangle_{q\xi\mu} = \langle \hat{n}_p \rangle_{gs} + q(1 - \alpha)^2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{\Phi_\mu(\alpha, \beta_e)^{1/2}}{1 - \alpha} \right). \quad (3.55)$$

### 3.1.4. Solución exacta del modelo vibrónico

En esta sección se presenta una base apropiada en la cual se puede diagonalizar el hamiltoniano del modelo vibrónico. Posteriormente, los resultados numéricos se podrán comparar con los resultados obtenidos de forma analítica con las aproximaciones realizadas en las secciones precedentes. Recordemos que el hamiltoniano del modelo vibrónico en el formalismo Q-Consistente venía dado por

$$\hat{H} = \alpha \hat{n}_p - \frac{1 - \alpha}{N} (s^\dagger \tilde{p} + p^\dagger s)^{(1)} \cdot (s^\dagger \tilde{p} + p^\dagger s)^{(1)}. \quad (3.56)$$

Para estudiar los autoestados de dicho hamiltoniano, introducimos el álgebra no compacta  $SU(1,1)$  de operadores de pares de bosones [68, 69]. Los generadores de dicha álgebra son los operadores  $\hat{K}_\rho^+$ ,  $\hat{K}_\rho^-$  con  $\rho = s$  ó  $p$  y el operador de Cartan  $\hat{K}_\rho^0$  definidos como

$$\hat{K}_s^+ = \frac{1}{2} s^\dagger s^\dagger = (\hat{K}_s^-)^\dagger, \quad (3.57)$$

$$\hat{K}_s^0 = \frac{1}{2} \hat{n}_s + \frac{1}{4}, \quad (3.58)$$

$$\hat{K}_p^+ = \frac{1}{2} p^\dagger \cdot p^\dagger = (\hat{K}_p^-)^\dagger, \quad (3.59)$$

$$\hat{K}_p^0 = \frac{1}{2} \hat{n}_p + \frac{3}{4}. \quad (3.60)$$

Estos tres tipos de operadores, para cada valor de  $\rho$ ,  $\{\hat{K}_\rho^+, \hat{K}_\rho^-, \hat{K}_\rho^0\}$ , satisfacen el álgebra de conmutación de  $SU(1,1)$ ,

$$[\hat{K}_\rho^0, \hat{K}_{\rho'}^\pm] = \pm \delta_{\rho\rho'} \hat{K}_\rho^\pm, \quad (3.61)$$

$$[\hat{K}_\rho^+, \hat{K}_{\rho'}^-] = -2\delta_{\rho\rho'} \hat{K}_\rho^0, \quad (3.62)$$

y el operador cuadrático de Casimir de  $SU(1, 1)$  es,

$$\hat{C}_{2,\rho} = \frac{1}{2}(\hat{K}_\rho^+ \hat{K}_\rho^- + \hat{K}_\rho^- \hat{K}_\rho^+) - (\hat{K}_\rho^0)^2 = -\frac{D_\rho}{4} \left( \frac{D_\rho}{4} - 1 \right), \quad (3.63)$$

siendo  $D_\rho = 2\rho + 1$  ( $\rho = 1$  para bosones  $p$  y  $\rho = 0$  para bosones  $s$ ).

Dado el modelo vibrónico en el que se describe una transición de la fase deformada  $O(4)$  a la fase esférica  $U(3)$ , se pueden obtener un conjunto completo de autoestados del hamiltoniano en términos del operador de creación  $\hat{K}_\rho^\dagger$  actuando sobre un subespacio de bosones  $\rho$  acoplados a cero que viene caracterizado por el número cuántico seniority  $\nu_\rho$ ,

$$|\tilde{n}_\rho, \nu_\rho\rangle = \frac{1}{\sqrt{C_{\rho, \nu_\rho}^{\tilde{n}_\rho}}} (\hat{K}_\rho^+)^{\tilde{n}_\rho} |\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle, \quad (3.64)$$

donde  $\nu_s = 0, 1$  y  $\nu_p = 0, 1, 2, \dots$ . La etiqueta  $\tilde{n}_\rho$  se refiere al número de pares de bosones de tipo  $\rho$  acoplados a momento angular cero. Por tanto, el número total de bosones ahora será  $N = 2\tilde{n}_s + 2\tilde{n}_p + \nu_s + \nu_p$ . La constante de normalización que aparece en (3.64) se puede obtener conociendo el modo en que actúan los operadores  $\hat{K}_\rho^-$  y  $\hat{K}_\rho^0$  sobre el estado  $|\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle$

$$\hat{K}_\rho^- |\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle = 0, \quad (3.65)$$

$$\hat{K}_\rho^0 |\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle = \left( \frac{1}{2}\nu_\rho + \frac{1}{4}D_\rho \right) |\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle, \quad (3.66)$$

y verificándose la relación de conmutación

$$\left[ [\hat{K}_\rho^-, \hat{K}_\rho^+], \hat{K}_\rho^+ \right] = 2\hat{K}_\rho^+, \quad (3.67)$$



entonces se demuestra que

$$\hat{K}_\rho^- (\hat{K}_\rho^+)^{\tilde{n}_\rho} |\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle = \tilde{n}_\rho (\tilde{n}_\rho + \frac{D_\rho}{2} + \nu_\rho - 1) (\hat{K}_\rho^+)^{\tilde{n}_\rho - 1} |\tilde{n}_\rho = 0, \nu_\rho\rangle, \quad (3.68)$$

así

$$\langle \tilde{n}_\rho, \nu_\rho | \tilde{n}_\rho, \nu_\rho \rangle = \frac{\tilde{n}_\rho}{2} (2\tilde{n}_\rho + 2\rho + 2\nu_\rho - 1) \langle \tilde{n}_\rho - 1, \nu_\rho | \tilde{n}_\rho - 1, \nu_\rho \rangle, \quad (3.69)$$

con lo que se obtiene finalmente la constante de normalización

$$C_{\rho, \nu_\rho}^{\tilde{n}_\rho} = \langle \tilde{n}_\rho, \nu_\rho | \tilde{n}_\rho, \nu_\rho \rangle = \frac{\tilde{n}_\rho! (2\tilde{n}_\rho + 2\rho + 2\nu_\rho - 1)!!}{2^{\tilde{n}_\rho} (2\rho + 2\nu_\rho - 1)!!}. \quad (3.70)$$

Ahora se puede construir el conjunto completo de estados como el producto directo de los subespacios  $\rho = s$  y  $\rho = p$  como,

$$|\tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{C_{s, \nu_s}^{\tilde{n}_s} C_{p, \nu_p}^{\tilde{n}_p}}} (\hat{K}_s^+)^{\tilde{n}_s} (\hat{K}_p^+)^{\tilde{n}_p} |\nu_s; \nu_p\rangle. \quad (3.71)$$

Esta base es especialmente útil para diagonalizar el hamiltoniano (3.56), pero antes hay que expresarlo en función de los operadores del álgebra de  $SU(1, 1)$ ,

$$\hat{H} = \alpha \hat{n}_p - \frac{1 - \alpha}{N} (4\hat{K}_s^+ \hat{K}_p^- + 4\hat{K}_p^+ \hat{K}_s^- + N + 2\hat{n}_s(1 + \hat{n}_p)). \quad (3.72)$$

Los elementos de matriz de (3.72) más relevantes en la base (3.71) son,

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p | \hat{n}_s | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p \rangle = 2\tilde{n}_s + \nu_s, \quad (3.73)$$

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p | \hat{n}_p | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p \rangle = 2\tilde{n}_p + \nu_p, \quad (3.74)$$

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p | \hat{K}_s^+ \hat{K}_s^- | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p \rangle = \tilde{n}_s \left( \tilde{n}_s + \nu_s - \frac{1}{2} \right), \quad (3.75)$$

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p | \hat{K}_p^+ \hat{K}_p^- | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p \rangle = \tilde{n}_p \left( \tilde{n}_p + \nu_p + \frac{1}{2} \right), \quad (3.76)$$

$$\begin{aligned} \langle (\tilde{n}_s - 1), \nu_s; (\tilde{n}_p + 1), \nu_p | \hat{K}_p^+ \hat{K}_s^- | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_p, \nu_p \rangle = \\ \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{n}_s(\tilde{n}_p + 1)(2\tilde{n}_s + 2\nu_s - 1)(2\tilde{n}_p + 2\nu_p + 3)}. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Dentro de cada subespacio, el hamiltoniano es tridiagonal pudiéndose diagonalizar fácilmente para valores grandes de  $N$ . Éste es el algoritmo que se implementa en un programa para obtener los resultados numéricos. La diagonalización del hamiltoniano en dicha base permite conocer observables como la energía del estado fundamental, el gap de energía y también las funciones de onda de los distintos estados.

### 3.1.5. Comparación con los resultados numéricos

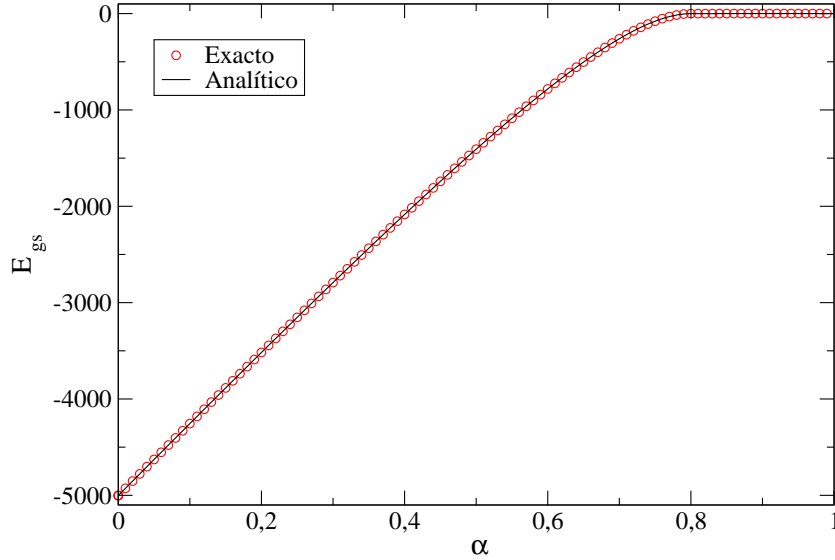
En este apartado vamos a mostrar que las correcciones analíticas que se han deducido para las fases esférica y deformada del modelo vibrónico mejoran la descripción del campo medio. Para ello, siempre se tendrá como referencia el cálculo exacto.

En primer lugar vamos a comprobar que la descripción de campo medio es correcta para  $N \rightarrow \infty$ . En las figuras 3.5, 3.6 y 3.7 se representan con símbolos los resultados exactos obtenidos diagonalizando (3.72) para valores grandes de  $N$  y se muestran: la energía del estado fundamental, el gap de energía y el valor medio del número de bosones  $p$  por bosón en el estado fundamental, respectivamente. Además, en dichas gráficas se presentan con línea los cálculos analíticos. Cualitativamente se ve en todas las gráficas que el campo medio (MF) describe apropiadamente la transición de fase en el límite de  $N$  grande.

Realizando un análisis más detallado de cada gráfica, en la figura 3.5 se observa que para  $\alpha = 0$ , el valor de  $E_{gs} = -\frac{1}{N}\omega(\omega + 2)$  con  $\omega = N$ , como era de esperar, ya que para dicho valor de  $\alpha$  el sistema posee la simetría dinámica  $SO(4)$ . Por otra parte, conforme se va aumentando el valor de  $\alpha$  se pasa de la fase no simétrica a la simétrica. En esta última fase, el valor que proporciona la aproximación de campo medio para la energía en el estado fundamental es 0, de acuerdo con los resultados tanto exactos como analíticos.

En la figura 3.6 se comparan los resultados que proporcionan el cálculo exacto y los analíticos para la energía del primer estado excitado  $1_1^-$ . En  $\alpha = 0,8$  se observa claramente la transición de fase. El cálculo exacto muestra el gap entre el estado fundamental  $0_1^+$  y el primer estado excitado  $1_1^-$  (círculos) (ambos de la banda del estado fundamental  $\omega = N$ ), y el gap entre el estado fundamental  $0_1^+$  y el estado base de la siguiente banda en el espectro energético ( $\omega = N - 2$ ),  $0_2^+$  (triángulos). Para  $\alpha = 0$  se tiene el límite  $SO(4)$ , en esa situación, como el hamiltoniano no tiene dependencia en  $J$ , toda la banda del estado fundamental ( $\omega = N$ ) está degenerada con el estado fundamental  $0_1^+$ , de modo que el gap de energía entre niveles energéticos en esa banda es cero, como se observa en la figura 3.6. Por otra parte, también para  $\alpha = 0$  la energía de excitación del  $0_2^+$  es  $E_{0_2^+} = 4$ . Esto es debido a que para  $\alpha = 0$  la energía  $E_{gs} = -(N + 2)$  y la energía del estado base de la primera banda excitada es  $E_{0_2^+} = -(N - 2)$  con lo que el gap es  $\Delta = 4$ , como se observa en la figura 3.6. En la fase simétrica, para  $\alpha = 1$  se tiene el límite  $U(3)$ , con lo que las sucesivas energías de excitación se corresponden con un espectro típicamente vibracional:  $E_{1_1^-} = 1$  (estado de un fonón) y  $E_{0_2^+} = 2$  (estado de dos fonones). Las soluciones analíticas, tanto para Hartree-Bose-Bogoliubov, como para el campo medio, en la fase no simétrica arrojan un valor para la energía de excitación del  $0_2^+$  que coincide con una excitación partícula-hueco y en la fase simétrica la energía de excitación del estado  $1_1^-$  coincide con una excitación partícula-hueco también. Ambos cálculos analíticos se ajustan bien al cálculo exacto para todo valor de  $\alpha$ , salvo en las cercanías del punto crítico, donde las aproximación de Hartree-Bose-Bogoliubov proporciona mejores resultados (aunque divergen, en la aproximación usada en el punto crítico).

En la figura 3.7 se puede observar nuevamente que el cálculo Hartree-Bose-Bogoliubov y el cálculo desarrollado con campo medio coinciden con los cálculos exactos para un  $N$  grande. Esta vez se representa el valor medio de bosones tipo  $p$  por partícula en el estado fundamental.

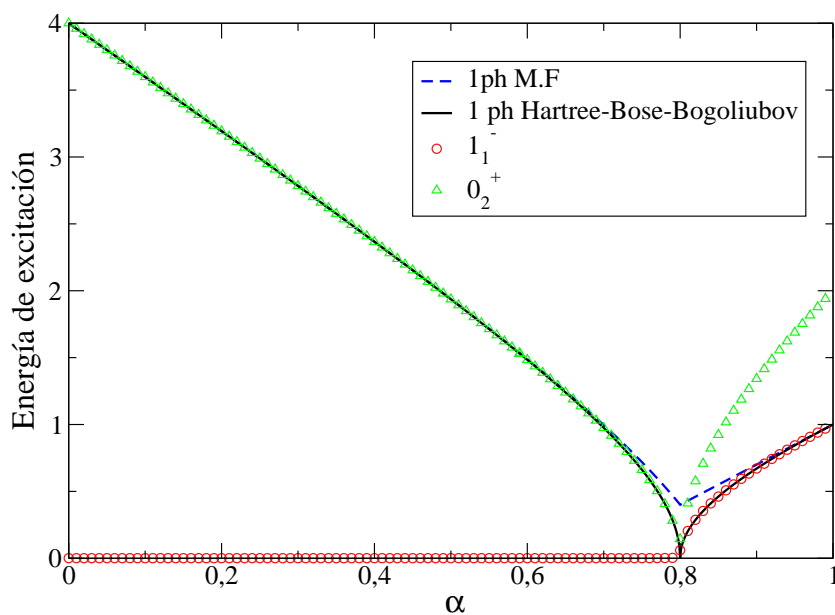


**Figura 3.5:** Comparación numérica y analítica de la energía del estado fundamental  $E_{gs}$  para un número de partículas  $N = 5000$  en unidades arbitrarias.

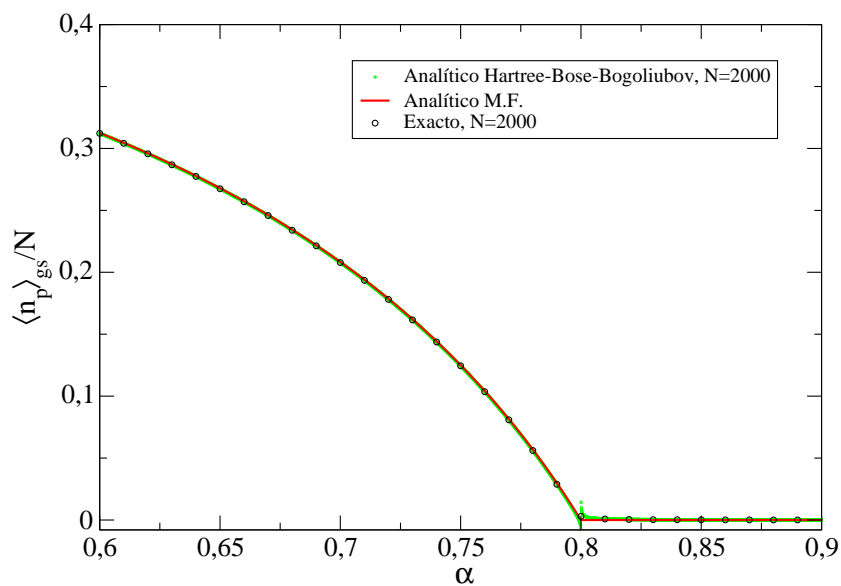
A continuación vamos a mostrar cómo el campo medio se desvía del cálculo exacto al disminuir los valores de  $N$  y cómo las correcciones analíticas que se han deducido usando técnicas más allá de campo medio proporcionan correcciones que acercan los resultados de campo medio para diversas magnitudes a los exactos.

En la figura 3.8 se compara la energía del estado fundamental por partícula para distinto número de partículas. Se observa que para  $N$  pequeño el cálculo analítico Hartree-Bose-Bogoliubov se ajusta mucho mejor a los cálculos exactos que la solución que proporciona el campo medio. De hecho, el cálculo de campo medio viene dado por la línea discontinua magenta. Como es de esperar, para valores grandes de  $N$ , se consigue el mismo resultado que se obtiene con la aproximación de campo medio.

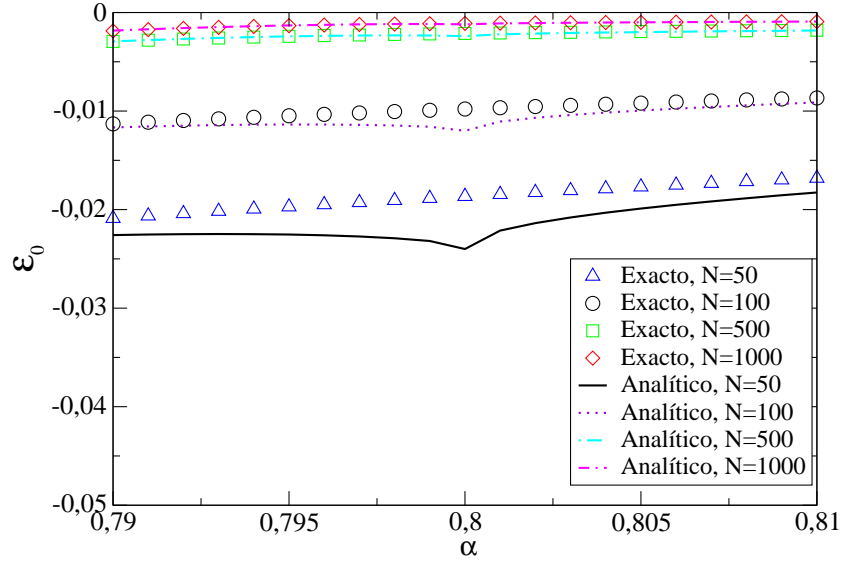
En la figura 3.9 observamos cómo para un valor de  $N = 1000$ , en un entorno del punto crítico, el cálculo con Hartree-Bose-Bogoliubov propor-



**Figura 3.6:** Comportamiento de la energía de excitación en unidades arbitrarias para  $N = 5000$ . La línea continua muestra el cálculo con las técnicas desarrolladas para ir más allá de campo medio, y la línea discontinua se corresponde con el cálculo de campo medio, los puntos son los cálculos exactos.



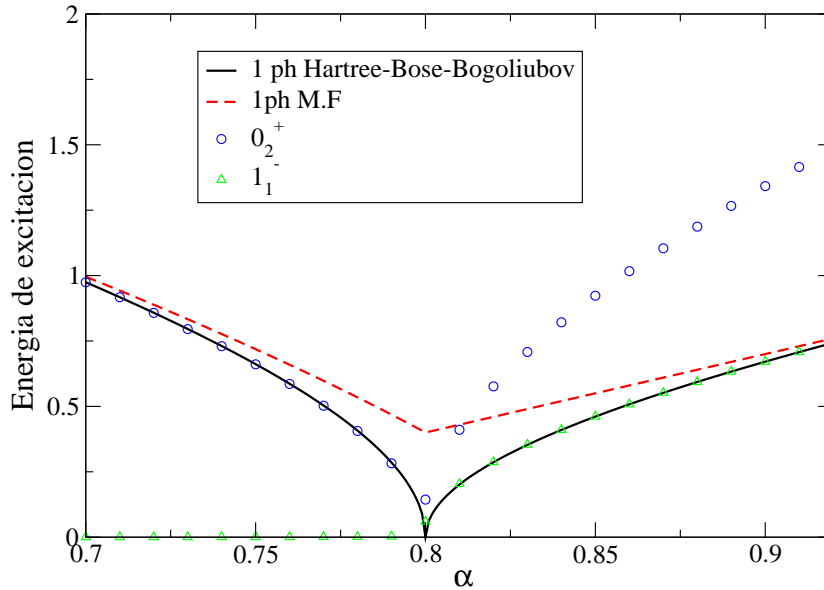
**Figura 3.7:** Comparación del número medio de bosones tipo  $p$  por partícula en el estado fundamental para el cálculo con Hartree-Bose-Bogoliubov, campo medio y cálculo exacto para  $N$  grande.



**Figura 3.8:** Comparación de la energía del estado fundamental por partícula,  $\varepsilon_0$ , en unidades arbitrarias para distintos valores de  $N$ .

ciona un resultado mejor que el que se obtiene con campo medio. Además, incluso en esta zona para  $N$  grande el cálculo obtenido con las herramientas para ir más allá de campo medio ofrece un resultado más ajustado al cálculo exacto que el que se puede obtener usando campo medio. Esto se debe a que para calcular los estados excitados de un sistema dentro del marco de campo medio nos vemos obligados a usar la TDA, lo cual constituye por sí misma una aproximación extra que hay que añadir a nuestra aproximación de campo medio.

En la figura 3.10 se presenta nuevamente el número medio de bosones tipo  $p$  en el estado fundamental normalizado al número total de bosones pero para un valor pequeño de  $N$ . Se tiene que los resultados analíticos obtenidos con Hartree-Bose-Bogoliubov para valores pequeños de  $N$  se ajustan a los exactos mucho mejor que los que se obtienen para campo medio tanto en la zona no simétrica como en la simétrica. Sin embargo, existe un pequeño entorno alrededor del punto crítico  $\alpha_c$  donde el cálculo realizado con Hartree-Bose-Bogoliubov difiere notablemente de los cálculos exactos. De hecho, en el punto crítico la corrección calculada en la aproximación  $N^0$  Holstein-Primakoff diverge. Dicha divergencia se corrige incluyendo términos de orden



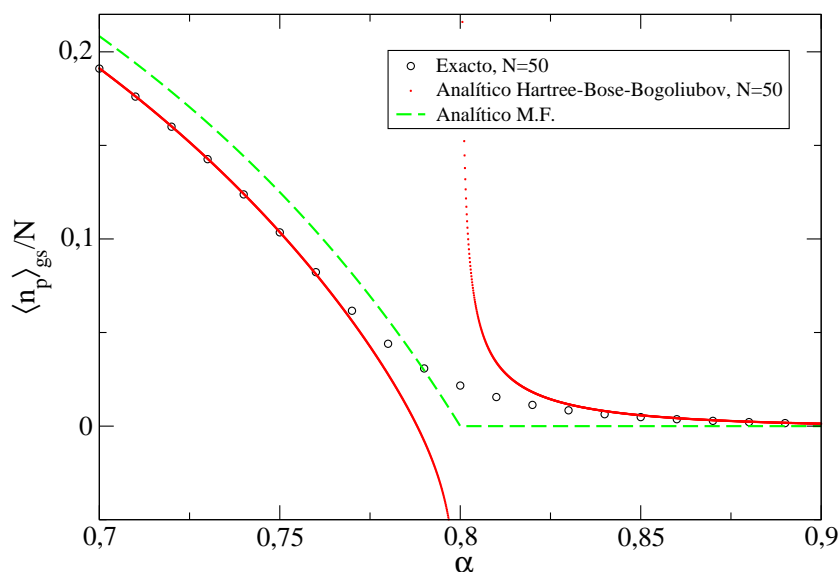
**Figura 3.9:** Similar a la figura 3.6 pero nos centramos en la zona próxima al punto crítico. Obsérvese el buen ajuste que se tiene con la aproximación Hartree-Bose-Bogoliubov incluso en esta zona. Los cálculos se han realizado para  $N = 1000$  partículas.

superior en el desarrollo de Holstein-Primakoff. En cualquier caso, tal y como se ve en la figura 3.7, conforme se aumenta el valor de  $N$ , el cálculo analítico y la aproximación de campo medio coinciden y el anterior entorno alrededor del punto crítico, donde la solución analítica no se ajustaba del todo bien al cálculo exacto, se va reduciendo.

Todo esto permite validar la aproximación de Hartree-Bose-Bogoliubov para obtener resultados que nos permiten ir más allá del campo medio. Por supuesto, para  $N$  grande se recuperan los resultados de campo medio.

### 3.1.6. Corrección por número finito de partículas en el punto crítico

El escalado por tamaño finito en sistemas de materia condensada es un tema de gran interés y posee fundamentos sólidos desde que se elaboró la formulación de una teoría general [18] (para una revisión sobre el tema consultar [70]). Recientemente, en el campo de la estructura nuclear y molecular, varios grupos de investigación han iniciado un estudio del comportamiento



**Figura 3.10:** Comparación del número medio de bosones tipo  $p$  por partícula en el estado fundamental para el cálculo con Hartree-Bose-Bogoliubov, campo medio y cálculo exacto para  $N$  pequeño.

del escalado por tamaño finito dentro del contexto de los modelos algebraicos, prestando especial atención a las transiciones de fase de segundo orden entre las fases esféricas y deformadas del hamiltoniano  $U(6)$  de IBM [15, 69, 71, 72]. Esto ha sido motivado por la observación de un comportamiento invariante de escala para las energías de excitación del núcleo en el punto crítico de las transiciones de fase [73–76].

Hasta ahora se ha visto que la aproximación de Hartree-Bose-Bogoliubov reproduce bien los cálculos exactos, incluso para sistemas donde el número de partículas  $N$  es pequeño y, además, cuando  $N$  es grande se recupera la aproximación de campo medio. Sin embargo, en las diversas gráficas anteriores se ha podido observar que en una pequeña región próxima al punto crítico los cálculos analíticos no se ajustaban bien a los cálculos exactos. Por ello, para analizar cómo se comporta la energía del estado fundamental, el gap de energía del primer estado excitado y el valor esperado de  $\hat{n}_p$  en el estado fundamental en el punto crítico, realizamos un estudio de cómo escalan dichas magnitudes frente al tamaño finito del sistema. La idea es que en el límite termodinámico,  $N \rightarrow \infty$ , el sistema se comporta en el punto crítico tal y



como predice la teoría de campo medio, sin embargo, debido al tamaño finito del sistema, en dicho punto el comportamiento no es el esperado.

Los exponentes críticos se obtienen a partir de las correcciones realizadas al límite de campo medio del modelo algebraico  $U(4)$  usando un método que aprovecha el hecho de que el observable que se estudia posee un comportamiento singular en el punto crítico de la QPT [69, 71, 77–79]. Así pues, se asume que el desarrollo  $1/N$  de cualquier magnitud física  $\Phi_N(\alpha)$  que depende del parámetro de control  $\alpha$  se puede descomponer como suma de una parte regular y otra singular:

$$\Phi_N(\alpha) = \Phi_N^{reg}(\alpha) + \Phi_N^{sing}(\alpha) , \quad (3.78)$$

donde  $\Phi_N^{sing}(\alpha)$ , o alguna de sus derivadas, diverge cuando  $\alpha$  tiende a  $\alpha_c$  mientras que  $\Phi_N^{reg}(\alpha)$  y sus derivadas permanecen regulares. Además, a cada orden del desarrollo, la divergencia en  $\Phi_N^{sing}(\alpha)$  está dominada por un único término cuando  $\alpha$  es próximo a  $\alpha_c$ . Así, la parte singular se puede expresar como

$$\Phi_N^{sing}(\alpha) \simeq \frac{\Xi(\alpha)^{x_\Phi}}{N^{n_\Phi}} \mathcal{F}_\Phi [N\Xi(\alpha)^{3/2}] , \quad (3.79)$$

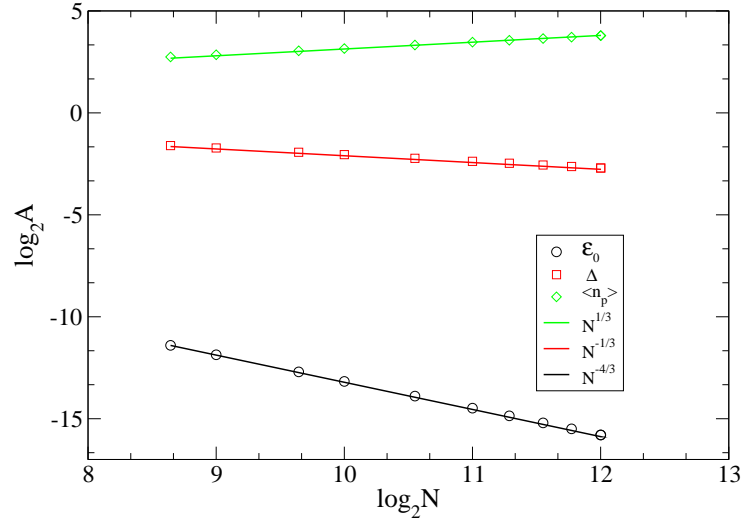
donde  $\mathcal{F}_\Phi$  es una función que depende de la variable de escalado  $N\Xi(\alpha)^{3/2}$ . Una vez que se admite que  $\Phi_N^{sing}(\alpha)$  se comporta según la ecuación (3.79), es posible calcular los exponentes críticos debido a que, para valores finitos de  $N$ , las cantidades físicas no pueden diverger, de tal manera que  $\mathcal{F}_\Phi(x) \sim x^{-2x_\Phi/3}$  y la dependencia del tamaño del sistema en el punto crítico vendrá dada por  $\Phi_N^{sing}(\alpha_c) \sim N^{-n_\Phi - 2x_\Phi/3}$ .

A modo de ejemplo, si nos centramos en la energía del estado fundamental en la fase esférica (3.36a), los términos regulares y singulares son  $\mathcal{E}_0^{reg} = -3\alpha/2N$  y  $\mathcal{E}_0^{sing} = \Xi^{esf}(\alpha)^{1/2}/2N$  respectivamente, con  $\Xi^{esf}(\alpha) = 9(\alpha(5\alpha - 4))$ . Por tanto,  $x_\Phi = 1/2$ ,  $n_\Phi = 1$  y el exponente crítico es  $N^{-4/3}$ . Un valor idéntico se obtiene si se calcula el exponente en la fase deformada usando la correspondiente expresión para la energía. El valor de los exponentes para los diferentes observables estudiados en el presente modelo se pueden encontrar en la tercera columna de la tabla 3.1. Estos resultados coinciden con los exponentes críticos calculados en [69, 80].

$\Phi$	$x_\Phi$	$n_\Phi$	Exponentes críticos	Resultados numéricos
$\mathcal{E}_0$	+1/2	+1	-4/3	-1,3102(7)
$\Delta$	+1/2	0	-1/3	-0,32792(8)
$\langle \hat{n}_p \rangle$	-1/2	0	+1/3	0,31205(5)

**Tabla 3.1:** Exponentes críticos para los observables estudiados: energía del estado fundamental por partícula ( $\mathcal{E}_0$ ), gap de energía del primer estado excitado ( $\Delta$ ) y el valor esperado de bosones  $p$  en el estado fundamental ( $\langle \hat{n}_p \rangle$ ).

En la figura 3.11 se representa cómo escalan la energía por partícula en el estado fundamental,  $\varepsilon_0$ , el gap de energía del primer estado excitado,  $\Delta$ , y el valor medio de  $\hat{n}_p$  en el estado fundamental, todas ellas calculadas en el punto crítico  $\alpha_c = 0,8$ , con el número de bosones  $N$ .



**Figura 3.11:** Parte singular de la energía del estado fundamental  $\mathcal{E}_0$ , gap de energía del primer estado excitado  $\Delta$  y valor esperado de bosones  $p$  en el estado fundamental ( $\langle \hat{n}_p \rangle$ ) evaluados el punto crítico  $\alpha_c = 0,8$  como una función del número de bosones  $N$ . En el eje de ordenadas se representa el logaritmo en base 2 de la magnitud deseada. En línea continua se muestra la dependencia de escala de cada magnitud estudiada.

Como se puede observar,  $\mathcal{E}_0$ ,  $\Delta$ ,  $\langle \hat{n}_p \rangle$  escalan de acuerdo a una ley de potencias que viene dada por  $N^\gamma$ , según se desprende del ajuste realizado.

Los resultados numéricos del citado ajuste se pueden consultar nuevamente en la tabla 3.1.

## 3.2. Modelo algebraico $U(3)$ : El límite $2D$ del modelo vibrónico

En esta nueva sección se presenta el límite  $2D$  del modelo vibrónico y se hará un análisis similar al ya realizado con el citado modelo.

En la sección precedente se vió que el modelo vibrónico, presentado inicialmente en [81], es un modelo algebraico basado en el espectro generador de álgebras  $U(4)$ . Dicho modelo es apropiado para el modelado de sistemas tridimensionales y se ha empleado principalmente para describir el espectro rotacional y vibracional de moléculas diatómicas [81, 82] y poliatómicas [83, 84], tratando los grados de libertad moleculares como excitaciones colectivas en un espacio bosónico (vibrones) [22]. Por otra parte, el límite unidimensional ( $1D$ ) del modelo [85] se ha usado para separar las vibraciones de las rotaciones.

Este último límite del modelo vibrónico es especialmente útil para estudiar las vibraciones en moléculas. Sin embargo, el estudio de la dinámica de flexionado de moléculas lineales y cuasilineales implica el tener que considerar simultáneamente los grados de libertad rotacionales y vibracionales. Este es un problema bidimensional ( $2D$ ), para el que el límite  $2D$  del modelo vibrónico constituye un formalismo adecuado, usando el álgebra de Lie  $U(3)$  como álgebra generadora de espectros. Este modelo fue presentado inicialmente en [86], aunque en la referencia más reciente [23] se puede encontrar una exposición detallada del citado modelo desde un punto de vista cuántico y clásico. A partir de ahora nos referiremos al límite  $2D$  del modelo vibrónico como el modelo  $U(3)$ .

### 3.2.1. El hamiltoniano del modelo algebraico $U(3)$ y su límite clásico

Ya se ha visto que el modelado de sistemas  $n$  dimensionales de muchos cuerpos usando un álgebra generadora de espectros  $U(n+1)$  proporciona una descripción efectiva para una gran variedad de sistemas. En esta sección revisaremos muy brevemente el enfoque algebraico  $U(3)$  para sistemas 2D [23, 86].

#### 3.2.1.1. El álgebra bosónica $U(3)$ para sistemas 2D

El álgebra de Lie bosónica  $U(3)$  para sistemas 2D se construye a partir de un sistema bosónico de dos niveles. En dicho modelo, al nivel energético más bajo se le asocia un boson escalar,  $\sigma^\dagger$ , y al nivel superior un operador bosónico cartesiano doblemente degenerado,  $\{\tau_x^\dagger, \tau_y^\dagger\}$ . Las relaciones de conmutación entre los operadores de creación y aniquilación son

$$[\sigma, \sigma^\dagger] = 1 \quad , \quad [\tau_i, \tau_j^\dagger] = \delta_{i,j} \quad , \quad [\tau_i, \sigma^\dagger] = 0 \quad ; \quad i, j = x, y . \quad (3.80)$$

El resto de conmutadores son cero. Con el objetivo de expresar de forma más compacta los generadores del álgebra  $U(3)$  introducimos los bosones circulares [23]

$$\tau_\pm^\dagger = \mp \frac{\tau_x^\dagger \pm i\tau_y^\dagger}{\sqrt{2}} \quad , \quad (3.81a)$$

$$\tau_\pm = \mp \frac{\tau_x \mp i\tau_y}{\sqrt{2}} . \quad (3.81b)$$

Los nueve generadores del álgebra  $U(3)$  se obtienen como productos bilineales de los operadores de creación y aniquilación definidos anteriormente.

Éstos se pueden escribir como [86]:

$$\begin{aligned}
\hat{n} &= \tau_+^\dagger \tau_+ + \tau_-^\dagger \tau_- & , & \quad \hat{n}_s = \sigma^\dagger \sigma \\
\hat{l} &= \tau_+^\dagger \tau_+ - \tau_-^\dagger \tau_- \\
\hat{D}_+ &= \sqrt{2}(\tau_+^\dagger \sigma - \sigma^\dagger \tau_-) & , & \quad \hat{D}_- = \sqrt{2}(-\tau_-^\dagger \sigma + \sigma^\dagger \tau_+) \\
\hat{Q}_+ &= \sqrt{2} \tau_+^\dagger \tau_- & , & \quad \hat{Q}_- = \sqrt{2} \tau_-^\dagger \tau_+ \\
\hat{R}_+ &= \sqrt{2}(\tau_+^\dagger \sigma + \sigma^\dagger \tau_-) & , & \quad \hat{R}_- = \sqrt{2}(\tau_-^\dagger \sigma + \sigma^\dagger \tau_+) .
\end{aligned} \tag{3.82}$$

El operador  $\hat{l}$  es el momento angular  $2D$ , como se puede observar fácilmente una vez que se ha expresado en función de los operadores bosónicos cartesianos. Si exigimos que se conserve el momento angular  $2D$ , entonces sóloamente hay dos posibles simetrías dinámicas. Ambas comienzan en el álgebra  $U(3)$  y terminan en el álgebra  $SO(2)$ .

$$U(3) \supset U(2) \supset SO(2) \quad \text{Cadena I ,} \tag{3.83a}$$

$$U(3) \supset SO(3) \supset SO(2) \quad \text{Cadena II .} \tag{3.83b}$$

El sistema posee una simetría que viene dada por el álgebra  $SO(2)$ , la cual se corresponde con rotaciones en el plano y lleva asociada el número cuántico  $l$ . Señalar, que debido a la naturaleza  $2D$  del sistema,  $l$  no es un momento angular sino una componente del mismo, y por consiguiente puede tomar valores positivos, negativos o incluso nulos.

Las correspondientes subálgebras de cada cadena son generadas por los siguientes elementos

$$\begin{aligned}
U(2) & \quad \{\hat{n}, \hat{l}, \hat{Q}_+, \hat{Q}_-\}, \\
SO(3) & \quad \{\hat{l}, \hat{D}_+, \hat{D}_-\}, \\
SO(2) & \quad \{\hat{l}\},
\end{aligned} \tag{3.84}$$

en donde los elementos de  $SO(3)$  satisfacen las usuales relaciones de conmutación del momento angular.

Ya se vió que otro ingrediente importante del enfoque algebraico lo

constituyen los operadores o invariantes de Casimir asociados con cada cadena de subálgebras [56]. Así pues, los invariantes de Casimir de primer orden y de segundo orden asociados a los subálgebras en (3.84) son

$$\begin{aligned}\hat{C}_1[U(2)] &= \hat{n} \quad , \quad \hat{C}_2[U(2)] = \hat{n}(\hat{n} + 1) \quad , \\ \hat{C}_2[SO(3)] &= \hat{W}^2 = (\hat{D}_+\hat{D}_- + \hat{D}_-\hat{D}_+)/2 + \hat{l}^2 \quad , \\ \hat{C}_1[SO(2)] &= \hat{l} \quad , \quad \hat{C}_2[SO(2)] = \hat{l}^2 \quad .\end{aligned}\tag{3.85}$$

Con todos estos elementos, el hamiltoniano más general hasta dos cuerpos que sea invariante rotacional e invariante ante paridad se puede expresar como una combinación lineal de los cuatro posibles invariantes de Casimir de primer y segundo orden de las cadenas (3.83a) y (3.83b)

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E_0 + \epsilon \hat{C}_1[U(2)] + \alpha \hat{C}_2[U(2)] \\ &+ \beta \hat{C}_2[SO(2)] + A \hat{C}_2[SO(3)] \quad .\end{aligned}\tag{3.86}$$

El invariante de Casimir  $SO(3)$ ,  $\hat{W}^2$  se puede reemplazar por el operador de pairing

$$\hat{P} = N(N + 1) - \hat{W}^2 \quad ,\tag{3.87}$$

en donde el operador número total,  $\hat{N} = \hat{n}_s + \hat{n}$ , ha sido sustituido por su valor  $N$ , ya que estamos considerando sistemas con un número fijo de bosones.

Las dos posibles simetrías dinámicas (3.83a) y (3.83b) dan lugar a dos situaciones en las que el hamiltoniano se puede escribir en términos de los operadores de Casimir de una única cadena.

### 3.2.1.2. Cadena I: cadena del oscilador cilíndrico

La cadena I se conoce como cadena del oscilador cilíndrico. La base de los estados en esta cadena se denota por los siguientes números cuánticos

$$\left| \begin{array}{ccc} U(3) & \supset & U(2) & \supset & SO(2) \\ [N] & & n & & l \end{array} \right\rangle \quad ,\tag{3.88}$$

y etiquetada como  $[[N]; n, l]$ . Una notación alternativa, frecuentemente usada en Física Molecular es  $[[N]; n^l]$ . El número cuántico  $N$  etiqueta la representación completamente simétrica de  $U(3)$ ,  $[N]$ , y está relacionada con el número total de estados ligados del sistema,  $n$  es el número cuántico vibracional, y  $l$  es el momento angular 2D. Los valores permitidos que pueden tomar los distintos números cuánticos en esta cadena son los siguientes

$$\begin{aligned} n &= N, N-1, N-2, \dots, 0 \\ l &= \pm n, \pm(n-2), \dots, \pm 1 \text{ o } 0, \quad (n = \text{impar o par}) . \end{aligned} \quad (3.89)$$

El hamiltoniano del sistema con esta simetría dinámica se obtiene haciendo nulo  $A$  en (3.86).

$$\hat{H}^{(I)} = E_0 + \epsilon \hat{C}_1[U(2)] + \alpha \hat{C}_2[U(2)] + \beta \hat{C}_2[SO(2)] . \quad (3.90)$$

El valor esperado de  $\hat{H}^{(I)}$  en la base  $[[N]; n, l]$  es

$$E^{(I)}(n, l) = E_0 + \epsilon n + \alpha n(n+1) + \beta l^2. \quad (3.91)$$

Los autovalores de (3.90) son los de un oscilador anarmónico en dos dimensiones truncado puesto que  $n \leq N$ . La presente cadena describe *bending vibrations* de moléculas lineales rígidas cuando se aplica al modelado de vibraciones en moléculas [23, 86].

### 3.2.1.3. Cadena II: cadena del oscilador desplazado

La segunda posible cadena, la cadena II, es conocida como la cadena del oscilador desplazado. Los estados en la cadena II se caracterizan por los números cuánticos

$$\left| \begin{array}{ccc} U(3) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ [N] & & \omega & & l \end{array} \right\rangle . \quad (3.92)$$

El caso límite que le corresponde a esta cadena es un oscilador anarmónico en dos dimensiones desplazado [23, 86]. La notación para los estados de la

base de la presente cadena es  $[[N]; \omega, l\rangle$ , y los valores permitidos que pueden tomar los distintos números cuánticos son

$$\begin{aligned}\omega &= N, N-2, N-4, \dots, 1 \text{ o } 0, \quad (N = \text{impar o par}), \\ l &= \pm\omega, \pm(\omega-1), \dots, 0.\end{aligned}\tag{3.93}$$

En este caso, es conveniente introducir un número cuántico vibracional  $v$ , que se puede identificar con el número de cuantos de excitación en el oscilador desplazado:

$$v = \frac{N - \omega}{2}.\tag{3.94}$$

Con esta nueva etiqueta

$$\begin{aligned}v &= 0, 1, \dots, \frac{N-1}{2} \text{ o } \frac{N}{2}, \quad (N = \text{impar o par}), \\ l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(N-2v).\end{aligned}\tag{3.95}$$

El hamiltoniano del sistema con esta simetría dinámica se obtiene haciendo nulos  $\epsilon$  y  $\alpha$  en (3.86).

$$\hat{H}^{(II)} = E_0 + \beta \hat{C}_2[SO(2)] + A \hat{C}_2[SO(3)].\tag{3.96}$$

El valor esperado de  $\hat{H}^{(I)}$  en la representación base  $[[N]; \omega, l\rangle$  es

$$E^{(II)}(n, \omega) = E_0 + \beta l^2 A \omega(\omega + 1).\tag{3.97}$$

#### 3.2.1.4. El hamiltoniano de $U(3)$

En la sección precedente hemos visto que si se expresa el hamiltoniano del sistema en términos de los invariantes de Casimir de todas las cadenas entonces éste presenta simetrías dinámicas. Este hecho, como ya se sabe, permite estudiar transiciones de fase [3, 58, 60]. Sin embargo, por simplicidad, los invariantes de Casimir de las subálgebras comunes a las simetrías dinámicas bajo estudio no se incluyen, de tal manera que se construye



un hamiltoniano constituido únicamente por un invariante de Casimir de cada simetría dinámica. Así por ejemplo, la transición de fase del estado fundamental del sistema para el modelo  $U(3)$  se puede estudiar considerando el siguiente hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \varepsilon \left[ (1 - \alpha)\hat{n} + \frac{\alpha}{N-1}\hat{P} \right] . \quad (3.98)$$

Los operadores  $\hat{n}$  y  $\hat{P}$  vienen dados en las ecuaciones (3.85) y (3.87),  $\varepsilon$  es la energía total, y se ha introducido un parametro de control adimensional  $\alpha \in [0, 1]$ . Se puede comprobar que para  $\alpha = 0$  el sistema se encuentra en la fase I, es decir los autovalores y autovectores de  $\hat{\mathcal{H}}$  son los de la simetría dinámica I. Mientras que si  $\alpha = 1$  se puede ver que el sistema se encuentra en al fase II, es decir los autovalores y autovectores son los de la simetría dinámica II. El factor  $1/(N-1)$  no es más que un factor de normalización que se introduce con el objeto de que el hamiltoniano se comporte adecuadamente en el límite de  $N$  grande, el límite termodinámico, teniendo en cuenta que el operador de pairing,  $\hat{P}$ , es un operador a dos cuerpos, mientras que  $\hat{n}$  es un operador a un cuerpo. El operador a un cuerpo escala como  $N$  y el operador a dos cuerpos escala como  $N(N-1)$  [60]. Este modelo es de gran utilidad para el modelado de la dinámica de *bending* en varios tipos de moléculas [87, 88], mientras que sus propiedades cuánticas y clásicas de su diagrama de fase asociado se pueden consultar en [23]. El hamiltoniano (3.98) es análogo a la generalización del hamiltoniano  $Q$ -consistente del Modelo de Bosones Interactuantes (IBM) propuesto en [69] y análogo al hamiltoniano definido para el modelo vibrónico en la sección anterior.

El invariante cuadrático de Casimir de  $U(2)$  no se ha incluido en la ecuación (3.98) porque su presencia no altera las propiedades del estado fundamental, sin embargo puede afectar crucialmente a la transición de fase para estados excitados (ESQPT) del sistema [89].

Así pues, dependiendo del valor de  $\alpha$ , se pueden distinguir cuatro escenarios diferentes para el hamiltoniano (3.98) [23, 87],

1. Caso lineal-rígido:  $\alpha = 0$ . El espectro de energía se corresponde con

el de un oscilador anarmónico en dos dimensiones truncado con la correspondiente degeneración en  $l$  (simetría dinámica I).

2. Caso cuasi-lineal:  $0 < \alpha \leq 0,2$ . Para esta situación lo más llamativo es la aparición de una anarmonicidad *positiva*. La degeneración que había en  $l$  se rompe de un modo particular, con valores de la energía más bajos conforme aumentan los valores de  $l$ .
3. Caso cuasi-doblado:  $0,2 < \alpha < 1$ . Esta situación se caracteriza por la aparición de una anarmonicidad que es negativa para los estados de más baja energía y que pasa a ser positiva a altas energías. De la misma manera que en el caso anterior, la degeneración en  $l$  se vuelve a romper. Esta situación se conoce como la inversión de Dixon en Física Molecular [90].
4. Caso rígido-doblado:  $\alpha = 1$ . El espectro de energías es el de un roviador (sistema rotando y vibrando) truncado en dos dimensiones (simetría dinámica II). El número cuántico  $l$  se corresponde con la proyección del momento angular sobre el eje de la figura, normalmente etiquetado como  $K$ , con bandas rotacionales montadas encima de cada estado vibracional.

### 3.2.2. Estudio del modelo $U(3)$ en la aproximación de campo medio

Para estudiar el límite de campo medio en el modelo  $U(3)$ , al igual que en el modelo vibrónico, se hace uso del formalismo de los estados intrínsecos, con lo que se propone un estado coherente como estado fundamental del sistema

$$|[N]; r, \theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (b_c^\dagger)^N |0\rangle \quad , \quad (3.99)$$

donde  $r$  y  $\theta$  son coordenadas polares asociadas a  $x$  e  $y$  y  $b_c^\dagger$  es el condensado bosónico

$$b_c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} (\sigma^\dagger + x\tau_x^\dagger + y\tau_y^\dagger) \quad . \quad (3.100)$$

Los estados coherentes (3.99) se pueden generalizar para incluir estados excitados [91, 92]. Además, la definición del condensado bosónico (3.100) no es única, de hecho una elección diferente para el mismo álgebra bosónico  $U(3)$  se puede encontrar en [92].

La expresión para el estado coherente del estado fundamental, conocido también como estado intrínseco, proporciona expresiones en términos de coordenadas y momentos clásicos de cualquier operador que se construya con los elementos del álgebra que generan los espectros. A su vez, debemos señalar que en general los parámetros variacionales del estado coherente son complejos y representan tanto coordenadas como momentos [93]. En el presente trabajo únicamente consideraremos la dependencia en las coordenadas, de tal manera que todos los momentos  $(p_r, p_\theta)$  se fijarán a cero.

Está claro que la energía del estado fundamental vendrá dada por el valor esperado del hamiltoniano en el estado intrínseco (3.99),

$$E(r, \theta) \equiv \frac{\langle [N]; r, \theta | \hat{\mathcal{H}} | [N]; r, \theta \rangle}{\langle [N]; r, \theta | [N]; r, \theta \rangle}. \quad (3.101)$$

La expresión que se obtiene es una funcional de los parámetros variacionales, por tanto, minimizando  $E(r, \theta)$  con respecto a  $r$  y  $\theta$ , se obtiene una aproximación a la energía exacta del estado fundamental válida a orden  $N$ , esto es, para  $N$  grande.

La superficie de energía para el hamiltoniano (3.98) se obtiene directamente de la ecuación (3.101). Así, la energía por partícula  $\mathcal{E} = E/N$  viene dada por

$$\mathcal{E}(r, \alpha) = \epsilon \left[ (1 - \alpha) \frac{r^2}{1 + r^2} + \alpha \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2 \right]. \quad (3.102)$$

Esta superficie de energía no depende del ángulo polar  $\theta$ , puesto que el hamiltoniano es un operador escalar.

Minimizando la energía (3.102) con respecto a  $r$ , para determinados valores del parámetro de control  $\alpha$ , se obtiene el valor de equilibrio  $r_e$  que define la fase del sistema. Se observa la aparición de dos fases o límites geométricos, a saber, una fase simétrica (o lineal) y otra deformada (o no

lineal). El mínimo de energía para el primer caso se encuentra en el valor de equilibrio  $r_e = 0$ , mientras que para el segundo caso el mínimo de energía se tiene en  $r_e = \sqrt{(5\alpha - 1)/(3\alpha + 1)} \neq 0$ . La fase simétrica se da para todos aquellos valores del parámetro de control que verifican  $\alpha \leq \alpha_c = 0,2$  y para los valores  $\alpha > \alpha_c = 0,2$ , se tiene la fase deformada. Al evaluar la superficie de energía en  $r = r_e$ , obtenemos que

$$\mathcal{E}(r_e, \alpha) = \begin{cases} \alpha & 0 \leq \alpha \leq \alpha_c \\ \frac{-9\alpha^2 + 10\alpha - 1}{16\alpha} & \alpha_c < \alpha \leq 1 \end{cases} . \quad (3.103)$$

Si se calculan las derivadas de  $\mathcal{E}(r_e, \alpha)$  con respecto a  $\alpha$ , se tiene que la segunda derivada es discontinua en  $\alpha = \alpha_c$ , con lo que podemos usar  $r_e$  como un parámetro de control clásico [23]. De acuerdo con la clasificación de Ehrenfest para las transiciones de fase, ésta se trataría de una transición de fase de segundo orden.

El estudio de la transición de fase en este modelo se puede realizar mediante el análisis de diversos observables en su límite de  $N$  grande, al igual que se procedió con el modelo vibrónico en la sección precedente. Los resultados numéricos para la mayoría de los observables que se van a estudiar en el modelo bosónico  $U(3)$  se pueden encontrar en [23]. Por completitud, vamos a proceder a revisar muy brevemente los principales resultados de campo medio. En la siguiente sección se obtendrán analíticamente las siguientes correcciones a orden  $N$  de los observables seleccionados.

Los cuatro observables que vamos a analizar son: la energía del estado fundamental por partícula ( $\mathcal{E}_0$ ), el valor esperado del número de bosones cartesianos en el estado fundamental por partícula ( $\langle \hat{n} \rangle / N$ ), el gap de energía para el primer estado excitado ( $\Delta_{1ph}$ ), y la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el primer estado excitado ( $T/N$ ). El cálculo en campo medio de  $\mathcal{E}_0$  y  $\langle \hat{n} \rangle / N$  es directo. La energía por partícula viene dada por (3.103) y el valor esperado para el operador número de  $U(2)$  es

$$\langle [N]; r, \theta | \hat{n} | [N]; r, \theta \rangle = N \frac{r_e^2}{1 + r_e^2} = \begin{cases} 0 & 0 \leq \alpha \leq \alpha_c \\ \frac{5\xi - 1}{8\xi} & \alpha_c < \alpha \leq 1 \end{cases} . \quad (3.104)$$

Ahora bien, el cálculo para los otros dos observables implica el uso de un estado excitado y es ligeramente más elaborado. A continuación procedemos a detallar los resultados que se obtienen para el límite de campo medio.

Con el objetivo de estudiar excitaciones a una partícula-hueco en el marco de campo medio se construyen bosones intrínsecos excitados considerando excitaciones intrínsecas sobre el estado fundamental. Esos estados son ortogonales a (3.100). Existen dos modos posibles de construir bosones excitados salvo diferencia de fase

$$b_1^\dagger = \frac{1}{r\sqrt{1+r^2}} (-r^2\sigma^\dagger + x\tau_x^\dagger + y\tau_y^\dagger), \quad (3.105a)$$

$$b_2^\dagger = \frac{1}{r} (y\tau_x^\dagger - x\tau_y^\dagger). \quad (3.105b)$$

Así, la posible excitación partícula-hueco ( $1ph$ ) viene dada por

$$|[N]; i, r, \theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} b_i^\dagger (b_c^\dagger)^{N-1} |0\rangle, \quad i = 1, 2. \quad (3.106)$$

Es decir, el primer estado excitado se obtiene reemplazando en la ecuación (3.99) un bosón fundamental por uno excitado. Este procedimiento no es más que aplicar la aproximación de Tamm-Dancoff (TDA) [91]. El gap de energía entre el primer estado excitado y el estado fundamental del sistema se calcula de este modo como

$$\Delta_{1ph}^{(i)} = \langle [N]; i, r, \theta | \hat{\mathcal{H}} | [N]; i, r, \theta \rangle - \langle [N]; r, \theta | \hat{\mathcal{H}} | [N]; r, \theta \rangle, \quad i = 1, 2. \quad (3.107)$$

Con lo que obtenemos las siguientes expresiones para el gap de energía tanto en la fase esférica como en la fase deformada para las dos posibles excitaciones consideradas

$$\Delta_{1ph}^{(1)} = \begin{cases} 1 - 3\alpha & 0 \leq \alpha \leq \alpha_c \\ \frac{1}{4} + \frac{31}{8}\alpha - \frac{1}{8\alpha} & \alpha_c < \alpha \leq 1 \end{cases}, \quad (3.108a)$$

$$\Delta_{1ph}^{(2)} = \begin{cases} 1 - 3\alpha & 0 \leq \alpha \leq \alpha_c \\ \frac{1-\alpha}{2} & \alpha_c < \alpha \leq 1 \end{cases}. \quad (3.108b)$$

El resultado (3.108b) que se obtiene usando el bosón excitado (3.105b), implica que esta excitación pasa a ser un boson espúreo de Goldstone en la fase deformada ( $\alpha > \alpha_c$ ) asociado con una rotación en el plano. Esto concuerda con el hecho de que existen dos grados de libertad vibracionales degenerados en la configuración simétrica (lineal) que se correlacionan con un grado de libertad vibracional más otro rotacional en el caso deformado (no lineal). Obsérvese que para  $\alpha < \alpha_c$  el gap es el mismo en ambos casos y las excitaciones están degeneradas.

Por consiguiente hay que poner especial cuidado en la definición del observable  $\Delta_{1ph}$ . La aparición de un bosón de Goldstone en la fase deformada ( $\alpha > \alpha_c$ ) implica que el primer estado excitado en dicha fase se corresponde con un estado con dos cuantos de excitación en la fase simétrica. Esto se puede apreciar a partir de la energía de correlación en [23] y es un hecho general de la QPT  $U(2L+1) - SO(2L+2)$  [69]. En particular, si se desea comparar con los resultados numéricos presentados en [23], hay que tener en cuenta que el gap de energía  $\Delta_{1ph}$  no se corresponde ni con el primer gap de energía vibracional  $\Gamma_{u=1,vib}$ , ni con el primer gap de energía rotacional  $\Gamma_{l=1,rot}$ , usando la notación de [23]. Por tanto, para poder comparar los resultados que presentamos aquí con los cálculos publicados en [23], el gap  $\Delta_{1ph}$  se corresponde con  $\Gamma_{l=1,rot}$  para  $\alpha < \alpha_c$  y  $\Gamma_{u=1,vib}$  para  $\alpha > \alpha_c$ .

En lo que respecta a la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el primer estado excitado, comenzamos definiéndolo en términos de los generadores del álgebra de  $U(3)$ . Para estudiar dicha transición usamos el operador dipolar de transición [23, 69, 86, 88]

$$\hat{T}_{\pm} = \hat{D}_{\pm} , \quad (3.109)$$

y se calcula la probabilidad de transición o intensidad de transición entre los estados  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  como

$$I_{2 \rightarrow 1} \propto \frac{1}{g_2} \left( \left| \langle \psi_2 | \hat{T}_+ | \psi_1 \rangle \right|^2 + \left| \langle \psi_2 | \hat{T}_- | \psi_1 \rangle \right|^2 \right) , \quad (3.110)$$

donde  $g_2$  es un factor estadístico que tiene en cuenta la degeneración del

estado inicial.

Siguiendo la notación en [69], denotamos por  $T$  la intensidad de transición entre el estado fundamental ( $0_1$ ) y el primer estado excitado con momento angular uno ( $1_1$ ) y lo normalizamos por un factor  $N$ . Se acepta que no se puede distinguir entre valores negativos y positivos del momento angular  $l$ . Por tanto, si cualquiera de los estados involucrados tienen un momento angular diferente de cero, habría que sumarle las contribuciones positivas y negativas de  $l$ .

Al igual que antes, hay una diferencia importante en el tratamiento de la región simétrica y deformada [69]. Con el objetivo de dejar más clara esta cuestión, se expresan los bosones intrínsecos (3.100) y (3.105) en coordenadas polares

$$b_c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} \left( \sigma^\dagger - r \frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_+^\dagger + r \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_-^\dagger \right), \quad (3.111a)$$

$$b_1^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} \left( -r \sigma^\dagger - \frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_+^\dagger + \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_-^\dagger \right), \quad (3.111b)$$

$$b_2^\dagger = \frac{i}{\sqrt{2}} \left( e^{i\theta} \tau_+^\dagger + e^{-i\theta} \tau_-^\dagger \right). \quad (3.111c)$$

El valor de equilibrio de  $r$  en la fase simétrica es  $r_e = 0$ , con lo que la expresión de los bosones intrínsecos se simplifica a

$$b_c^\dagger = \sigma^\dagger, \quad (3.112a)$$

$$b_1^\dagger = -\frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_+^\dagger + \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_-^\dagger, \quad (3.112b)$$

$$b_2^\dagger = \frac{ie^{i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_+^\dagger + \frac{ie^{-i\theta}}{\sqrt{2}} \tau_-^\dagger. \quad (3.112c)$$

En este caso particular  $b_c^\dagger$  posee un momento angular cero, mientras que  $b_1^\dagger$  y  $b_2^\dagger$  son una mezcla de los bosones  $\tau_+^\dagger$  y  $\tau_-^\dagger$ . No obstante, es bastante simple construir bosones con un momento angular  $2D$  bien definido a partir de

combinaciones lineales de (3.112b) y (3.112c). Por tanto, si se construyen bosones con un momento angular  $2D$  bien definido, entonces en la fase simétrica se tiene que

$$\langle \pm 1_1 | \hat{T}_\pm | 0_1 \rangle = \pm \sqrt{2N}, \quad (3.113)$$

en donde se denota por  $|0_1\rangle$  el estado fundamental intrínseco y por  $|\pm 1_1\rangle$  el primer estado excitado con  $l = \pm 1$ .

Con todas estas consideraciones, la intensidad de transición entre el primer estado excitado y el estado fundamental en la fase simétrica viene dada por

$$\frac{T}{N} = \frac{1}{2} \frac{|\langle 1_1 | \hat{T}_+ | 0_1 \rangle|^2 + |\langle -1_1 | \hat{T}_- | 0_1 \rangle|^2}{N} = 2, \quad (3.114)$$

donde el factor  $\frac{1}{2}$  tiene en cuenta la degeneración en el primer estado excitado.

Por otra parte, puesto que en la región deformada existe una banda de infinitos estados degenerados en el límite de  $N$  grande (son modos de Goldstone), el cálculo de campo medio de la intensidad de transición es algo más complicado. En particular, el primer estado excitado colapsa con el estado fundamental en la fase deformada para  $\alpha = 1$ . Tal y como ya se ha explicado en el cálculo del gap de energía  $\Delta_{1ph}$ , la excitación (3.111c) pasa a ser un grado de libertad rotacional espúreo en la fase deformada. Así, con el objetivo de calcular correctamente en esta fase la intensidad de transición vibracional, la excitación (3.111c) se debe excluir y únicamente se deben considerar los bosones físicos  $b_1^\dagger$  (3.111b). Por tanto, en la fase deformada se tiene

$$\frac{T}{N} = \frac{|\langle 1_1 | \hat{T}_+ | 0_1 \rangle|^2 + |\langle 1_1 | \hat{T}_- | 0_1 \rangle|^2}{N} = 2 \left( \frac{1 - r^2}{1 + r^2} \right)^2. \quad (3.115)$$

Si se sustituye el valor de equilibrio de  $r$ ,  $r_e = \sqrt{(5\alpha - 1)/(3\alpha + 1)}$ , en la



ecuación (3.115) resulta que

$$\frac{T}{N} = \frac{(1 - \alpha)^2}{8\alpha^2} . \quad (3.116)$$

Tal y como se especifica más adelante, cuando se compare la probabilidad de transición en la fase deformada con los cálculos numéricos hay que tener en cuenta que en el cálculo de  $T/N$ , el estado excitado inicial será el segundo estado  $l = 1$ ,  $|1_2\rangle$ , porque el primer estado es un modo de Goldstone. Obsérvese que las ecuaciones (3.114) y (3.116) se han obtenido en el marco de la aproximación TDA y por consiguiente no son completamente autoconsistentes.

Basándonos en la referencia [69], la transición al primer estado excitado (bosón de Goldstone) se puede tener en cuenta definiendo un nuevo observable  $T'$  en la fase deformada

$$\begin{aligned} \frac{T'}{N} &= \frac{|\langle 0_1 | \hat{T}_+ | 0_1 \rangle|^2 + |\langle 0_1 | \hat{T}_- | 0_1 \rangle|^2}{N} \\ &= 8N \frac{r^2}{(1 + r^2)^2} . \end{aligned} \quad (3.117)$$

Si se evalúa esta expresión en el valor de equilibrio  $r_e$  se obtiene que

$$\frac{T'}{N} = N \frac{(5\alpha - 1)(1 + 3\alpha)}{8\alpha^2} . \quad (3.118)$$

Es importante no olvidar que, nuevamente, este resultado es únicamente válido para la fase deformada en donde queda definido el correspondiente observable  $T'$ . Por último, observar que  $T$  escala como  $N$  mientras que  $T'$  escala como  $N^2$ , lo cual concuerda con lo presentado en [69].

### 3.2.3. Estudio del modelo $U(3)$ en la aproximación de más allá de campo medio

La descripción que proporciona el campo medio para la energía del estado fundamental y otras magnitudes de interés, como las estudiadas

anteriormente, es únicamente válida en el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ). Para tamaños finitos del sistema, es decir  $N$  finito, los resultados de campo medio son válidos únicamente hasta orden  $N$ . De tal manera que si se desea buscar correcciones, como por ejemplo efectos de orden  $N^0$ , es necesario ir más allá de la citada aproximación, como bien sabemos del estudio realizado para el modelo vibrónico. Los cálculos de las citadas correcciones al límite de campo medio mejoran sensiblemente la descripción de los observables en un entorno del punto crítico, en donde la aproximación de campo medio falla. Para llevar a cabo esta tarea se procede de manera análoga al caso del modelo vibrónico pero adaptándolo al modelo  $U(3)$ . De esta forma, primero se hace una transformación de Holstein-Primakoff y una transformación de shift, seguida de una transformación de Bogoliubov. En primer lugar se mostrarán los resultados para la transformación de Holstein-Primakoff y de shift. En las siguientes dos subsecciones se detallará la transformación de Bogoliubov, la cual permitirá extraer las correcciones por tamaño finito del sistema en cada fase.

Recordemos que la transformación de Holstein-Primakoff ofrece un desarrollo en serie de potencias de  $1/N$  las cuales incluyen ordenadamente las sucesivas correcciones a  $N$ . Además, la transformación es hermítica y respeta las relaciones de conmutación para los bosones (para una revisión sobre métodos de desarrollo bosónico véase [32]). Además, el término dominante del desarrollo coincide con la contribución de campo medio, con lo que recuperamos de una manera natural dicha aproximación en el límite de  $N$  grande.

En el desarrollo de Holstein-Primakoff, el bosón escalar  $\sigma$  se sustituye en favor de dos nuevos bosones cartesianos  $b_i$ ,  $i = x, y$ ; los cuales poseen las usuales relaciones de conmutación,  $[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$ . Los nuevos bosones  $b_i^\dagger(b_i)$  vienen dados por

$$\tau_i^\dagger \tau_j = b_i^\dagger b_j, \quad (3.119a)$$

$$\tau_i^\dagger \sigma = \sqrt{N} b_i^\dagger \sqrt{1 - \hat{n}_b/N} = (\sigma^\dagger \tau_i)^\dagger, \quad (3.119b)$$

$$\hat{n}_\sigma = \sigma^\dagger \sigma = N - \hat{n}_b, \quad (3.119c)$$

donde  $i, j = x, y$ , y  $\hat{n}_b = b_x^\dagger b_x + b_y^\dagger b_y$ . Los bosones  $b_i^\dagger$  satisfacen las relaciones de conmutación a cada orden en  $N$  en el desarrollo de Taylor de la raíz cuadrada de (3.119b). Con el objetivo de contemplar en nuestro modelo la existencia de dos fases, una esférica y otra deformada, se introduce un nuevo conjunto de bosones,  $c_i^\dagger(c_i)$ , con  $i = x, y$  que se relacionan con los anteriormente definidos por medio de una transformación de desplazamiento o de shift

$$b_i^\dagger = \sqrt{N}\lambda\delta_{i,x} + c_i^\dagger, \quad (3.120)$$

donde  $i = x, y$ . El parámetro de desplazamiento  $\lambda$  es cero en la fase esférica y diferente de cero en la fase deformada.

En el desarrollo de Holstein-Primakoff, el cociente  $\hat{n}_b/N$  se asume que es mucho menor que uno, lo cual justifica que se pueda realizar un desarrollo de la raíz cuadrada en serie de potencias. Así pues, cuando se lleva a cabo esta transformación sobre el hamiltoniano (3.98), el resultado es un desarrollo en potencias de  $N$ :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{1/2} + \hat{H}_0 + \mathcal{O}(1/\sqrt{N}), \quad (3.121)$$

donde  $\hat{H}_i$  incorpora los términos con una dependencia del tipo  $N^i$ .

El primer término viene dado por

$$\hat{H}_1 = N [\alpha + (1 - 5\alpha)\lambda^2 - 4\alpha\lambda^4]. \quad (3.122)$$

Estableciendo que  $\lambda = r/\sqrt{1+r^2}$ , después de algunas operaciones algebraicas, se llega a que  $\hat{H}_1$  coincide con el resultado de campo medio (3.102). Los valores de equilibrio del parámetro de orden y el correspondiente diagrama de fase se calculan a partir de la minimización de este término. En el modelo  $U(3)$  se recupera el diagrama de fase incluido en la figura 3.12b.

El siguiente término en el desarrollo del hamiltoniano,  $\hat{H}_{1/2}$ , viene dado por

$$\hat{H}_{1/2} = \sqrt{N}\lambda [1 + \alpha(8\lambda^2 - 5)] (c_x^\dagger + c_x). \quad (3.123)$$

Este término se anula una vez que se fija el valor de equilibrio de  $\lambda$  (o

equivalentemente  $r$ ). Esto es debido a que  $\hat{H}_{1/2} = \frac{2}{\sqrt{N}} \frac{d\hat{H}_1}{d\lambda}$ . Por tanto, la primera corrección por tamaño finito al límite de campo medio viene dada por el término  $\hat{H}_0$ , el cual es cuadrático en los operadores bosónicos  $c$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \lambda^2(4\lambda^2 - 1)\alpha + (1 - 3\alpha + 14\lambda^2\alpha)c_x^\dagger c_x + (1 - 3\alpha + 4\lambda^2\alpha)c_y^\dagger c_y \\ &+ (5\lambda^2 - 1)\alpha (c_x^\dagger c_x^\dagger + c_x c_x) + (2\lambda^2 - 1)\alpha (c_y^\dagger c_y^\dagger + c_y c_y). \end{aligned} \quad (3.124)$$

A continuación se procederá a explicar en detalle cómo se diagonaliza este término con una transformación de Bogoliubov en las fases simétrica y deformada. Los resultados analíticos que se obtendrán con este método se compararán con los resultados obtenidos de una diagonalización exacta del presente hamiltoniano para valores finitos de  $N$ .

### 3.2.3.1. Transformación de Bogoliubov en la fase esférica para el modelo $U(3)$

Recordemos que el caso simétrico, conocido también en estructura molecular como configuración lineal, se da para valores del parámetro de control comprendidos entre  $0 \leq \alpha \leq 0,2$ . El parámetro de orden asociado es  $r_e = 0$  y, por consiguiente,  $\lambda_e = 0$ . Como resultado  $H_0$  tiene la misma dependencia tanto para  $x$  como para  $y$

$$\hat{H}_{0,sim} = \Theta \sum_{i=x,y} c_i^\dagger c_i + \Delta \sum_{i=x,y} (c_i^\dagger c_i^\dagger + c_i c_i), \quad (3.125)$$

con  $\Theta = 1 - 3\alpha$  y  $\Delta = -\alpha$ . El hamiltoniano (3.125) se diagonaliza con una transformación de Bogoliubov

$$\begin{aligned} c_i^\dagger &= u_i a_i^\dagger + v_i a_i, \\ c_i &= u_i a_i + v_i a_i^\dagger, \end{aligned} \quad (3.126)$$

donde  $i = x, y$ . Si se impone que la transformación sea canónica (los nuevos operadores bosónicos  $a$  satisfacen las mismas relaciones de conmutación que los operadores bosónicos  $c$ ) y que los términos no diagonales en los bosones

$a$  sean nulos, entonces se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\begin{aligned}\Delta(u^2 + v^2) + \Theta uv &= 0, \\ u^2 - v^2 &= 1,\end{aligned}\tag{3.127}$$

donde el subíndice  $i$  se ha omitido ya que las ecuaciones son las mismas tanto para la coordenada  $x$  como para la  $y$ . Con un poco de álgebra se tiene que las soluciones de las ecuaciones (3.127) son

$$\begin{aligned}u &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Theta}{\sqrt{\Theta^2 - 4\Delta^2}} \right)}, \\ v &= -\sqrt{\frac{1}{2} \left( -1 + \frac{\Theta}{\sqrt{\Theta^2 - 4\Delta^2}} \right)}.\end{aligned}\tag{3.128}$$

Así el hamiltoniano (3.125) adopta una forma diagonal una vez que se ha llevado a cabo la transformación de Bogoliubov

$$\hat{H}_{0,sim} = [3\alpha - 1 + \Xi^{sim}(\alpha)^{1/2}] + \Xi^{sim}(\alpha)^{1/2} \hat{n}_a + \mathcal{O}(1/N), \tag{3.129}$$

donde  $\hat{n}_a$  es el operador número para los bosones  $a$  y  $\Xi^{sim} = 5(\alpha_c - \alpha)(1 - \alpha)$ .

Cuando se tiene en cuenta tanto el resultado de campo medio (3.103) como la corrección a orden  $N^0$  (3.129), se puede obtener directamente la energía del estado fundamental por partícula y la energía del gap del primer estado excitado:

$$\mathcal{E}_0^{sim} = \alpha + N^{-1} [3\alpha - 1 + \Xi^{sim}(\alpha)^{1/2}], \tag{3.130a}$$

$$\Delta_{1ph}^{sim} = \Xi^{sim}(\alpha)^{1/2}. \tag{3.130b}$$

Ya se sabe que el teorema de Hellman-Feynman permite calcular fácilmente la corrección al valor esperado del número de bosones  $\tau$ . Dicho teorema recordemos que establece que la derivada respecto a un autovalor de un operador dado es igual al valor esperado de la derivada de este operador con la correspondiente autofunción. Si se define un nuevo parámetro de control  $x$  tal que  $\alpha = 1/(1+x)$ , se aplica el teorema citado anteriormente y se tiene

en cuenta que la componente de campo medio para este observable es nula, se obtiene que

$$\frac{\langle \hat{n} \rangle}{N} = \frac{d}{dx} [(1+x)\mathcal{E}_0^{sim}(x)] = \frac{1}{N} \frac{1 - 3\alpha - \Xi^{sim}(\alpha)^{1/2}}{\Xi^{sim}(\alpha)^{1/2}} + \mathcal{O}(N^{-2}). \quad (3.131)$$

El último observable que se estudia es el operador de transición  $T$ , que proporciona la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el primer estado excitado. Para obtener la corrección más allá de campo medio de los elementos de matriz del operador (3.109) es necesario expresarlo en términos de los bosones cartesianos  $b_i$ , con  $i = x, y$ , que definen la transformación de Holstein-Primakoff (3.119) y luego realizar la correspondiente transformación de desplazamiento (3.120). La expresión que se obtiene para  $\hat{T}_\pm$ , teniendo en cuenta que en la fase simétrica  $\lambda = 0$ , es

$$\begin{aligned} \hat{T}_\pm &= -\sqrt{N} \left( (c_x^\dagger + c_x) \pm i(c_y^\dagger + c_y) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2N} [c_x^\dagger \hat{n}_c + \hat{n}_c c_x + i(c_y^\dagger \hat{n}_c + \hat{n}_c c_y)] \right). \end{aligned} \quad (3.132)$$

Si se sustituyen los bosones  $c$  por los bosones  $a$  mediante la transformación de Bogoliubov definida en las ecuaciones (3.126, 3.127), y se tiene en cuenta que el primer estado excitado está doblemente degenerado:  $|\pm 1_1\rangle = \mp \frac{a_x^\dagger \pm i a_y^\dagger}{\sqrt{2}} |0\rangle$  entonces se tiene que

$$\langle \pm 1_1 | \hat{T}_\pm | 0_1 \rangle = \mp \sqrt{2N} (u + v). \quad (3.133)$$

Para este caso, el observable  $T$  adopta la forma

$$\frac{T}{2N} = \frac{|\langle 1_1 | \hat{T}_+ | 0_1 \rangle|^2 + |\langle -1_1 | \hat{T}_- | 0_1 \rangle|^2}{2N} = 2 \sqrt{\frac{1-\alpha}{1-5\alpha}}. \quad (3.134)$$

Este resultado coincide con el primer término en el desarrollo del observable  $T$  en [69] y a partir del cual se puede extraer información sobre cómo escala dicha magnitud con el tamaño finito del sistema. Pero (3.134)

no coincide con el cálculo de la TDA (3.114). La siguiente corrección (orden cero en  $N$ ) no se puede calcular a este nivel e implica una transformación de Bogoliubov más elaborada que incluya términos no lineales en los operadores de creación y destrucción [94].

### 3.2.3.2. Transformación de Bogoliubov en la fase deformada para el modelo $U(3)$

La fase deformada, también conocida en estructura molecular como fase no lineal, se da para valores del parámetro de control comprendidos entre  $0,2 < \alpha \leq 1$ . El parámetro de orden asociado es  $r_e = \sqrt{(5\alpha - 1)/(3\alpha + 1)}$  y, por consiguiente,  $\lambda_e^2 = (5\alpha - 1)/(8\alpha)$ . Para este caso,  $\hat{H}_0$  posee una dependencia diferente respecto  $x$  e  $y$

$$\hat{H}_{0,def} = \lambda^2(4\lambda^2 - 1)\alpha + \sum_{i=x,y} \Theta_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i=x,y} \Delta_i (c_i^\dagger c_i^\dagger + c_i c_i), \quad (3.135)$$

con

$$\begin{aligned} \Theta_x &= 1 + (14\lambda^2 - 3)\alpha, \\ \Theta_y &= 1 + (4\lambda^2 - 3)\alpha, \\ \Delta_x &= (5\lambda^2 - 1)\alpha, \\ \Delta_y &= (2\lambda^2 - 1)\alpha. \end{aligned} \quad (3.136)$$

Con el objetivo de diagonalizar (3.135), se realiza de nuevo una transformación de Bogoliubov y se sigue el procedimiento explicado en la fase simétrica. En este caso la solución (3.128) sigue siendo válida pero las componentes en  $x$  e  $y$  se deben tratar separadamente. Así se tiene que

$$\hat{H}_{0,def} = E_0^{def} + \frac{\Xi_x(\alpha)^{1/2}}{2} \hat{n}_{a_x} + \frac{\Xi_y(\alpha)^{1/2}}{2} \hat{n}_{a_y} + \mathcal{O}(1/N), \quad (3.137)$$

donde  $\hat{n}_{a_i}$  es el operador número para los bosones  $a_i$ , con  $i = x, y$ , y

$$E_0^{def} = (3 - 10\lambda^2 + 4\lambda^4)\alpha - 1 + \Xi_x(\alpha)^{1/2} + \Xi_y(\alpha)^{1/2}, \quad (3.138)$$

$$\Xi_x(\alpha) = 1 + (28\lambda^2 - 6)\alpha + (5 - 44\lambda^2 + 96\lambda^4)\alpha^2, \quad (3.139)$$

$$\Xi_y(\alpha) = 1 + (8\lambda^2 - 6)\alpha + (5 - 8\lambda^2)\alpha^2. \quad (3.140)$$

La energía del estado fundamental por partícula y el gap de energía para el primer estado excitado se calculan teniendo en cuenta esta corrección con  $\lambda_e^2 = \frac{5\alpha-1}{8\alpha}$ , y la contribución de campo medio (3.103)

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0^{def} &= \frac{-9\alpha^2 + 10\alpha - 1}{16\alpha} \\ &+ N^{-1} \left[ \frac{1 - 6\alpha - 27\alpha^2 + 8\alpha\Xi^{def}(\alpha)^{1/2}}{16\alpha} \right], \end{aligned} \quad (3.141a)$$

$$\Delta_{1ph}^{def} = \Xi^{def}(\alpha)^{1/2}, \quad (3.141b)$$

donde  $\Xi^{def}(\alpha) = \Xi_x(\alpha) = 5(\alpha - \alpha_c)(1 + 3\alpha)$ . La contribución asociada a la coordenada  $y$  es un bosón espúreo de Goldstone asociado con una rotación del estado fundamental del sistema.

Al igual que en la fase simétrica, el cálculo de la corrección al valor esperado al número de bosones  $\tau$  en el estado fundamental se obtiene haciendo uso del teorema de Hellman-Feynman y el correspondiente cambio de variable  $\alpha = 1/(1+x)$

$$\frac{\langle \hat{n} \rangle}{N} = \frac{5\alpha - 1}{8\alpha} + \frac{1}{N} \frac{4\alpha(\alpha - 1) + (1 - 3\alpha)\Xi^{def}(\alpha)^{1/2}}{8\alpha\Xi^{def}(\alpha)^{1/2}} + \mathcal{O}(N^{-2}). \quad (3.142)$$

El último observable que se estudia es la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el primer estado excitado. En esta fase, tal y como se explicó en el límite de campo medio, es necesario distinguir entre los observables  $T$  y  $T'$ .

Puesto que el grado de libertad en la coordenada  $y$  es espúreo, el desarrollo



del operador de transición en la fase deformada es

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\pm} &= -\sqrt{N}\sqrt{1-\lambda^2} \left\{ 2\lambda\sqrt{N} \left[ 1 - \frac{1}{2\sqrt{N}} \frac{\lambda}{1-\lambda^2} (c_x^\dagger + c_x) - \frac{1}{2N} \frac{1}{1-\lambda^2} \hat{n}_c \right] \right. \\ &+ c_x^\dagger \left[ 1 - \frac{1}{2\sqrt{N}} \frac{\lambda}{1-\lambda^2} (c_x^\dagger + c_x) - \frac{1}{2N} \frac{1}{1-\lambda^2} \hat{n}_c \right] \\ &\left. + \left[ 1 - \frac{1}{2\sqrt{N}} \frac{\lambda}{1-\lambda^2} (c_x^\dagger + c_x) - \frac{1}{2N} \frac{1}{1-\lambda^2} \hat{n}_c \right] c_x \right\}, \end{aligned} \quad (3.143)$$

con los coeficientes de Bogoliubov

$$u_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{23\alpha - 3}{4\sqrt{(5\alpha - 1)(3\alpha + 1)}}}, \quad (3.144)$$

$$v_x = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{-1 + \frac{23\alpha - 3}{4\sqrt{(5\alpha - 1)(3\alpha + 1)}}}. \quad (3.145)$$

A continuación se aplica la transformación de Bogoliubov (3.126) a los bosones  $c$ , donde ya se conocen los coeficientes de dicha transformación, y se tiene en cuenta que para esta fase el primer estado excitado es el  $|1_1\rangle = a_x^\dagger|0_1\rangle$ . Con todos estos ingredientes se deduce que el elemento de matriz del operador de transición en la fase deformada adopta la expresión

$$\begin{aligned} \langle 1_1 | \hat{T}_{\pm} | 0_1 \rangle &= -\sqrt{N}\sqrt{1-\lambda^2} \langle 0_1 | a_x \\ &\times \left[ 2\lambda\sqrt{N} + \frac{1-2\lambda^2}{1-\lambda^2} (u_x + v_x) (a_x^\dagger + a_x) \right] | 0_1 \rangle \\ &= -\sqrt{N} \frac{1-2\lambda^2}{\sqrt{1-\lambda^2}} (u_x + v_x) . \end{aligned} \quad (3.146)$$

Señalar que, al igual que sucedía en la fase esférica, las correcciones que tienen órdenes más bajos en  $N$  no se pueden extraer sin aplicar una transformación de Bogoliubov más general. Por consiguiente, hasta orden  $N$ ,

el observable  $T$  es

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} &= \frac{\left| \langle 1_1 | \hat{T}_+ | 0_1 \rangle \right|^2 + \left| \langle 1_1 | \hat{T}_- | 0_1 \rangle \right|^2}{2N} = \frac{(1 - 2\lambda^2)^2}{1 - \lambda^2} (u_x + v_x)^2 \\ &= \frac{(\alpha - 1)^2}{4\alpha \sqrt{(5\alpha - 1)(1 + 3\alpha)}}. \end{aligned} \quad (3.147)$$

En el caso de  $T'$ , los valores esperados relevantes para los operadores de transición (3.143) llevan a

$$\frac{T'}{N} = \left| \langle 0_1 | \hat{T}_+ | 0_1 \rangle \right|^2 + \left| \langle 0_1 | \hat{T}_- | 0_1 \rangle \right|^2 = \frac{(1 + 3\alpha)(5\alpha - 1)}{8\alpha^2}, \quad (3.148)$$

en donde se recupera el resultado calculado en la aproximación de campo medio. Por último, al igual que en el caso anterior, no se puede ir más allá de este resultado con la transformación de Bogoliubov definida en (3.126).

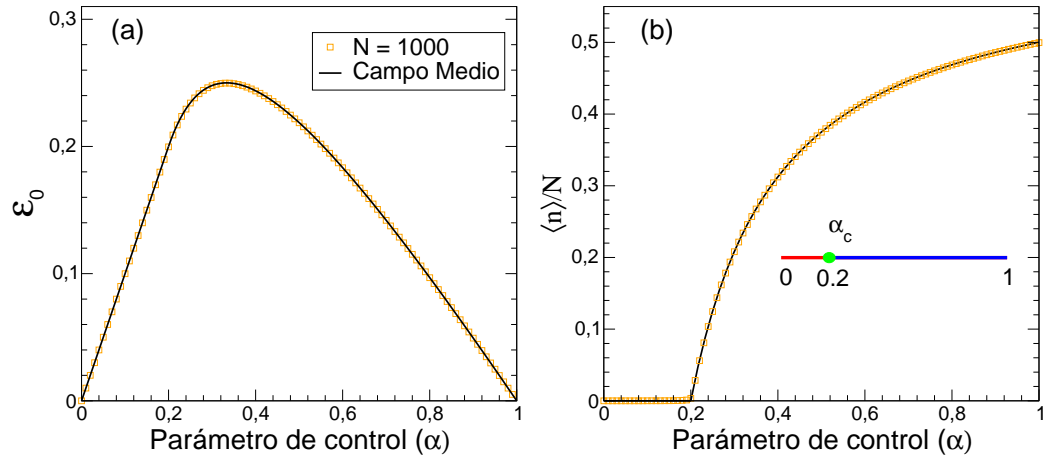
### 3.2.4. Comparación con los resultados numéricos

En esta sección se van a comparar los resultados obtenidos analíticamente tanto para la aproximación de campo medio como para la aproximación de más allá de campo medio con los resultados que se obtienen numéricamente. Ya se vió que cada simetría dinámica proporciona una base, en la que el hamiltoniano del sistema (3.98) se puede diagonalizar exactamente. En este caso, los cálculos numéricos se han llevado a cabo usando la base asociada con la simetría dinámica I. Una discusión detallada del cálculo de los elementos de matriz en la base de cada cadena se puede encontrar en [23].

#### 3.2.4.1. Energía del estado fundamental y valor esperado del operador número

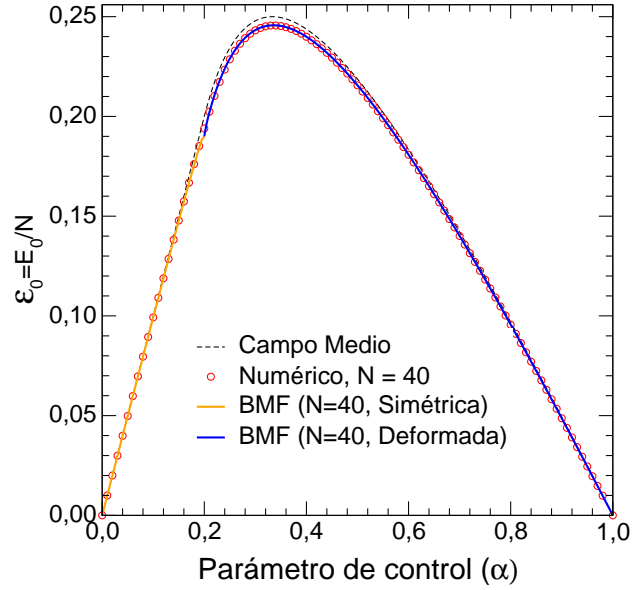
A continuación se compararán los cálculos numéricos para la energía por partícula del estado fundamental ( $\mathcal{E}_0$ ) y el valor esperado del operador número por partícula  $\langle \hat{n} \rangle / N$  con los cálculos analíticos llevados a cabo en cada una de las dos aproximaciones realizadas (campo medio y más allá de campo medio).

El objetivo es mostrar que la aproximación de campo medio es tanto mejor cuanto más grande sea el tamaño del sistema, pero que la aproximación más allá de campo medio mejora sensiblemente los resultados proporcionados por el primero para tamaños más pequeños del sistema así como en un entorno de donde se produce la QPT. Además, se verá que  $\langle \hat{n} \rangle / N$  puede tomarse como un parámetro de orden del sistema, ya que en una fase es cero mientras que en la otra es diferente de cero.



**Figura 3.12:** Comparación de la aproximación de campo medio (línea negra) con los resultados numéricos (cuadrados naranjas) para (a) la energía por partícula del estado fundamental ( $\mathcal{E}_0$ ) y (b) el valor esperado del operador número  $\hat{n}$  (número de bosones  $\tau$ ) por partícula en el estado fundamental ( $\langle \hat{n} \rangle / N$ ) como función del parámetro de control  $\alpha$ . En ambos casos el tamaño del sistema es  $N = 1000$ .

En los paneles a y b de la figura 3.12 se representa la energía por partícula del estado fundamental y el valor esperado del operador número de  $U(2)$  por partícula, también, en el estado fundamental del sistema,  $\langle \hat{n} \rangle / N$ , respectivamente. En el cálculo se ha tomado un sistema de  $N = 1000$  partículas. En los dos casos es destacable el acuerdo entre el cálculo numérico y el resultado de campo medio. El segundo observable se puede considerar como un parámetro de orden para la QPT del estado fundamental, debido a que es cero en la fase simétrica y distinto de cero una vez que se atraviesa el punto crítico. Además, en la figura 3.12b se incluye de manera esquemática el diagrama de fases asociado con el hamiltoniano (3.98). El diagrama de fases es unidimensional porque sólo se tiene un parámetro de control,

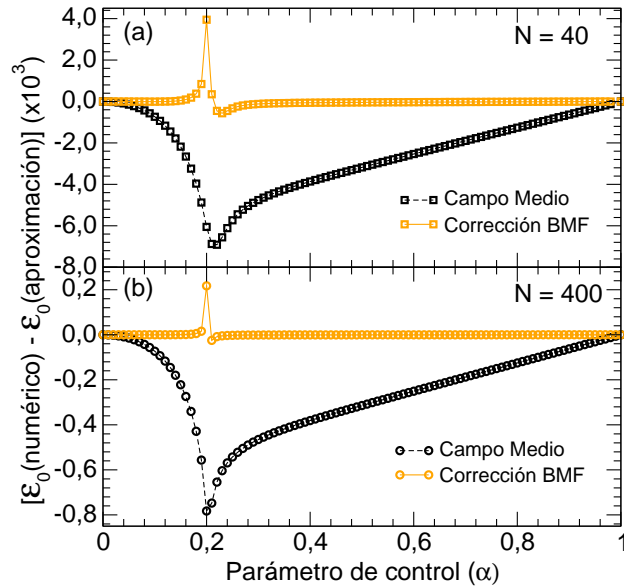


**Figura 3.13:** Energía por partícula del estado fundamental ( $\mathcal{E}_0(\alpha)$ ) del hamiltoniano (3.98) como función del parámetro de control  $\alpha$ , en las distintas aproximaciones. Con BMF (Beyond Mean Field) se designa la aproximación de más allá de campo medio.

el cual define dos fases: una simétrica (en rojo) y otra no simétrica (en azul), también denominadas como lineal y no lineal. Ambas fases están separadas por una transición de fase continua (de segundo orden) en el punto crítico  $\alpha_c = 0,2$  (punto verde).

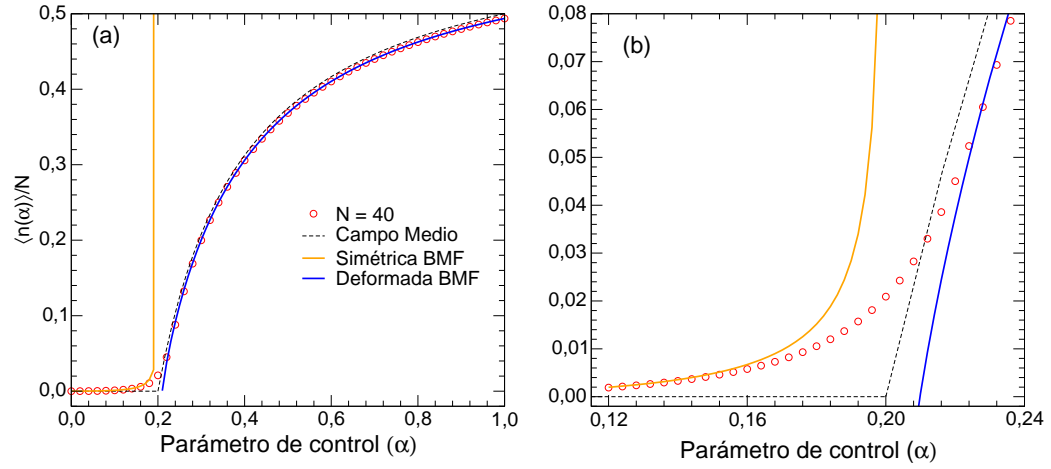
En la figura 3.13 se muestran los resultados obtenidos para  $\mathcal{E}_0$  con los diferentes métodos mencionados anteriormente pero para un tamaño del sistema más pequeño que antes,  $N = 40$ . De este modo se pone de manifiesto el efecto que tiene el tamaño finito del sistema sobre la QPT. La línea negra discontinua es el resultado de campo medio (el cual es independiente de  $N$ ) dado en la ecuación (3.103), los círculos rojos son los resultados numéricos de la diagonalización del hamiltoniano para  $N = 40$ . La corrección por tamaño finito de  $N$  para la fase simétrica,  $0 \leq \alpha \leq 0,2$ , viene dada en (3.130a), y se representa con línea naranja continua. La corrección para la fase deformada (3.141a), válida para los valores del parámetro de control  $0,2 < \alpha \leq 1$ , se indica con línea azul continua.

Está claro que los resultados de campo medio y las correcciones calculadas



**Figura 3.14:** Diferencias entre la energía por partícula del estado fundamental calculada numéricamente y usando las dos aproximaciones realizadas en esta memoria. El panel a muestra los resultados obtenidos con  $N = 40$  y el panel b con  $N = 400$ , ambos como función del parámetro de control  $\alpha$ .

se ajustan bien a los resultados numéricos para los valores del parámetro de control cercanos a una simetría dinámica (valores de  $\alpha$  cercanos a cero o uno). No obstante, cuando el parámetro de control toma valores próximos al punto crítico  $\alpha_c = 0,2$ , la corrección por tamaño finito de  $N$  describe mejor al sistema que el campo medio. En el punto crítico  $\alpha = 0,2$ , la corrección a campo medio muestra un pequeño pico característico de esta aproximación. Puesto que en esta escala es complicado distinguir la diferencia entre los resultados numéricos y los resultados obtenidos con la corrección más allá de campo medio, en la figura 3.14 se muestra la diferencia de ambos cálculos para  $N = 40$  y  $400$ . De esta manera se puede apreciar la mejora que se obtiene en el cálculo analítico cuando se incluyen correcciones al campo medio. Además, tal y como cabría esperar, conforme se aumenta el tamaño del sistema  $N$ , tanto campo medio como más allá de campo medio van describiendo mejor el cálculo numérico. Las diferencias entre las aproximaciones analíticas y el cálculo numérico siguen un patrón similar a los resultados presentados en [69].



**Figura 3.15:** El valor esperado del operador número  $\hat{n}$  (número de bosones  $\tau$ ) por partícula en el estado fundamental ( $\langle \hat{n} \rangle / N$ ) del hamiltoniano (3.98) como función del parámetro de control  $\alpha$ . Los cálculos numéricos se representan con círculos rojos, el cálculo de campo medio con línea negra discontinua y el cálculo de la corrección a campo medio con línea naranja continua para la fase simétrica y con línea azul continua para la fase deformada. Se ha considerado un tamaño del sistema  $N = 40$ .

En la figura 3.14 se observa que las correcciones al campo medio de la energía por partícula del estado fundamental mejoran considerablemente los resultados que se obtienen con la aproximación de campo medio. De hecho, la diferencia entre ambas aproximaciones es tanto mayor conforme nos vamos acercando al punto crítico  $\alpha_c = 0,2$ .

Por otra parte, los resultados tanto numéricos como analíticos para el valor esperado en el estado fundamental del operador número de  $U(2)$ ,  $\hat{n}$ , se representan en los dos paneles de la figura 3.15. La figura 3.15a muestra el comportamiento de dicho observable en todo el rango de valores posibles del parámetro de control. En el panel b de la misma figura, se realiza un zoom en un entorno del punto crítico. Los resultados numéricos para  $N = 40$  en ambos paneles se muestran con círculos rojos, la línea negra discontinua es el resultado de campo medio (3.104) y las correcciones analíticas a campo medio, tanto en la fase esférica (3.131) como en la fase deformada (3.142) se muestran con una línea continua naranja y azul respectivamente.

Tal y como se espera, el acuerdo entre los resultados numéricos y analíticos son mejores para la aproximación de más allá de campo medio para las dos

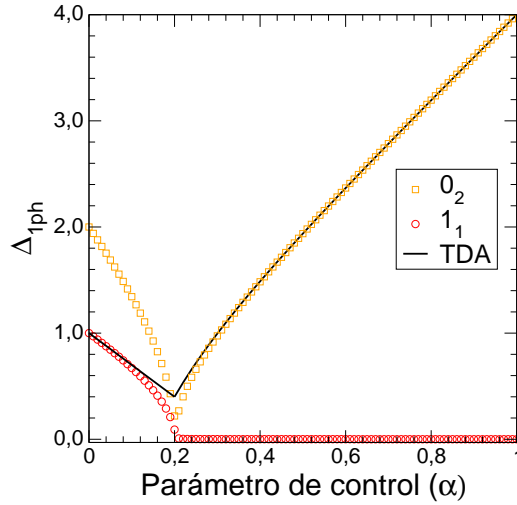
fases, simétrica y deformada. Además, al igual que en el anterior observable, la discrepancia con los resultados numéricos disminuye conforme aumenta el tamaño del sistema  $N$ . No obstante, las correcciones calculadas (3.131) y (3.142) se hacen singulares en el punto crítico. Esta divergencia se puede corregir mediante el cálculo de más términos en el desarrollo de  $1/N$  (3.121). En realidad, esto ya ha sido realizado para otros sistemas bosónicos de dos niveles con ayuda de un método conocido como transformaciones unitarias continuas (CUTS) [69, 71, 77–79]. En cualquier caso, este comportamiento divergente que se obtiene es útil para el cálculo de los exponentes críticos, tal y como se mostrará en la siguiente sección.

### 3.2.4.2. Gap de energía para el primer estado excitado

A continuación se procede a realizar un estudio para el gap análogo al realizado anteriormente para los observables  $\mathcal{E}_0$  y  $\langle \hat{n} \rangle / N$ . En primer lugar se mostrará la comparación entre el cálculo exacto (numérico) y el cálculo analítico en campo medio. Posteriormente se presenta la corrección a campo medio y cómo dicha corrección describe mejor los efectos debidos al tamaño finito del sistema.

En la figura 3.16 se representa el gap de energía entre el estado fundamental y el primer estado excitado  $\Delta_{1ph}$ . En este caso, tal y como se explica en la sección 3.2.2, la comparación entre campo medio y el cálculo numérico se debe realizar entre distintos estados en las dos fases. Así, la comparación se realiza con el cálculo numérico del gap de energía para el primer estado excitado con  $l = 1$  (simbolizado con cuadrados naranjas en la figura 3.16) en la fase simétrica, mientras que en la fase deformada el gap de energía que se calcula se corresponde con el segundo estado excitado con  $l = 1$  (simbolizado con círculos rojos en la figura 3.16). En ambos casos se encuentra que hay un buen acuerdo entre los resultados analíticos y numéricos si nos centramos en regiones próximas a las simetrías dinámicas ( $\alpha = 0$  y  $\alpha = 1$ ) pero, tal y como se espera, dicho acuerdo es tanto peor conforme nos acercamos al punto crítico  $\alpha_c = 0,2$ .

Es importante señalar que, por un lado, el estado excitado  $1_1$  corresponde



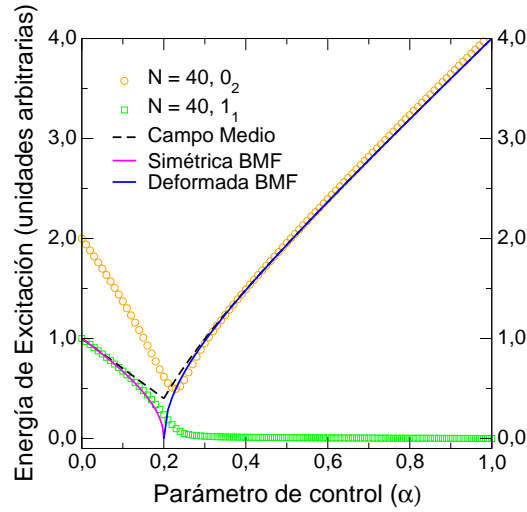
**Figura 3.16:** Gap de energía para el primer estado excitado ( $\Delta_{1ph}$ ) como función del parámetro de control  $\alpha$ . En línea negra continua se tiene el cálculo de campo medio y con cuadrados naranjas y círculos rojos el cálculo numérico. El tamaño del sistema es  $N = 1000$ .

a un cuanto de vibración en la fase simétrica, mientras que en la fase deformada forma parte de una banda rotacional infinitamente degenerada asociada con el bosón de Goldstone. Por otro lado, el estado  $0_2$  es un estado cuántico de dos cuantos de vibraciones en la fase simétrica y un cuanto de vibraciones en la fase deformada.

La figura 3.17 muestra la comparación entre el cálculo numérico para  $\Delta_{1ph}$ , la aproximación de campo medio y la corrección a campo medio, tanto en la fase esférica como en la fase deformada. Esta vez el tamaño del sistema es  $N = 40$ . En círculos naranja se tienen los resultados numéricos para el gap de energía con el nivel  $0_2$  y en cuadrados verdes el gap de energía para el estado  $1_1$ . La línea negra discontinua se refiere al resultado de la TDA (3.108b). Las correcciones analíticas a la aproximación de campo medio en la fase simétrica (3.130b) y en la fase deformada (3.141b) se muestran en líneas continuas magenta y azul respectivamente.

Tal y como se mencionó anteriormente, se observa que el estado asociado a una excitación partícula-hueco en la región simétrica (estado  $1_1$  con cuadrados verdes en la figura 3.17) pasa a ser un bosón espúreo de Goldstone





**Figura 3.17:** Gap de energía para el primer estado excitado ( $\Delta_{1ph}$ ) para el hamiltoniano (3.98) como función del parámetro de control  $\alpha$ . Los resultados numéricos para los estados  $0_2$  y  $1_1$  se simbolizan con círculos rojos y cuadrados verdes respectivamente. El tamaño del sistema es  $N = 40$ .

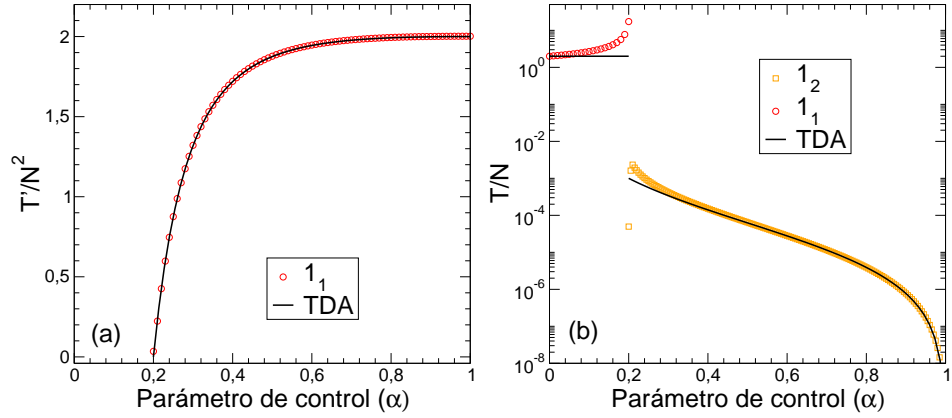
en la fase deformada cuando se atraviesa el punto crítico, donde el primer estado excitado se corresponde con un estado de dos partículas-hueco (estado  $0_2$  con círculos naranjas en la figura 3.17). Este mismo fenómeno ya se observó cuando se estudió el mismo observable para el modelo vibrónico. Es más, los resultados obtenidos están en concordancia con los resultados presentados en [69] para las transiciones  $U(2L + 1) - SO(2L + 2)$ .

Al igual que en el caso anterior, la nueva expresión analítica para el gap de energía mejora notablemente los resultados proporcionados por la TDA y describe adecuadamente los resultados numéricos hasta valores del parámetro de control  $\alpha$  muy próximos al punto crítico.

### 3.2.4.3. Probabilidad de transición

Por último, en lo que se refiere al análisis de los observables estudiados hasta el momento, se presentan a continuación los resultados obtenidos para la probabilidad de transición  $T$ .

En la figura 3.18 se presenta el cálculo de la TDA para la probabilidad de transición normalizada y ésta se compara con los resultados numéricos.

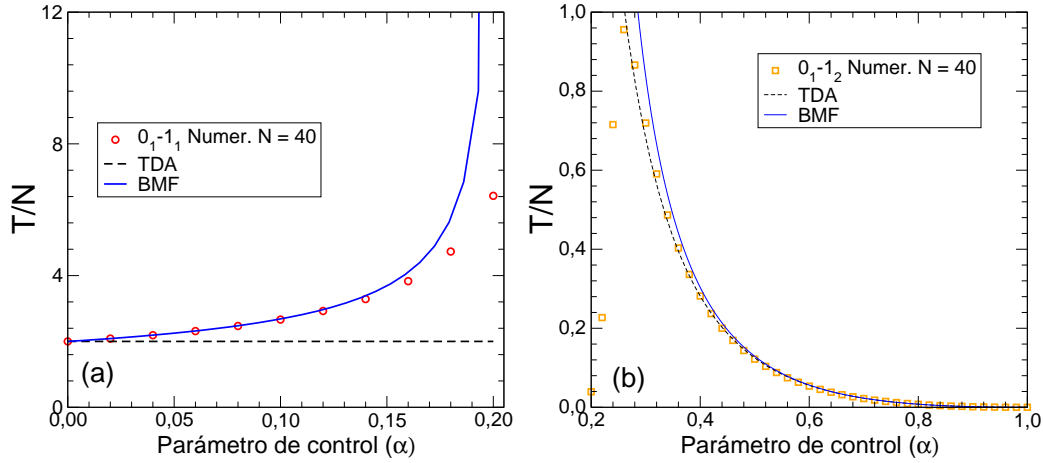


**Figura 3.18:** El cálculo de la TDA viene simbolizado con línea negra continua y los resultados numéricos por cuadrados naranjas y círculos rojos (veáse la leyenda de la figura) para los observables  $T'/N^2$  (panel a) y  $T/N$  (panel b) como función del parámetro de control  $\alpha$ . El observable  $T'$  (panel a) únicamente se define en la fase deformada ( $\alpha > \alpha_c$ ). El observable  $T$  (panel b) se compara con los resultados numéricos para la transición del  $\pm 1_1$  al  $0_1$  en la fase simétrica ( $\alpha < \alpha_c$ ) y para la transición del  $\pm 1_2$  al  $0_1$  en la fase deformada ( $\alpha > \alpha_c$ ). El tamaño del sistema es  $N = 1000$ .

El tamaño del sistema es  $N = 1000$ . En concreto, en el panel a de la figura 3.18 se muestra  $T'/N^2$ . Este observable se define en la fase deformada y se compara con el resultado numérico de la transición del  $0_1$  al  $\pm 1_1$ . En el panel b de la figura 3.18 se compara la aproximación de campo medio de  $T$ , normalizado con  $N$ , con los resultados numéricos. En este caso el cálculo numérico se lleva a cabo para la transición del  $0_1$  al  $\pm 1_1$  en la fase simétrica y para la transición del  $0_1$  al  $\pm 1_2$  en la fase deformada. Una vez más, tal y como era de esperar, el ajuste entre los resultados numéricos y los analíticos es tanto mejor conforme nos alejamos del punto crítico.

En la figura 3.19 se comparan diferentes resultados analíticos para  $T/N$  con un cálculo numérico en un sistema de  $N = 40$ . En concreto, en el panel a de la misma figura se tiene el cálculo de la TDA con línea discontinua y su corrección (3.134) en línea continua. Los resultados numéricos son los relativos a la probabilidad de transición del primer estado excitado  $\pm 1_1$  al estado fundamental.

Los resultados para el observable  $T$  en la fase deformada se muestran en el panel b de la figura 3.19. Hay que destacar que el primer estado excitado con



**Figura 3.19:** Observable  $T$  en la fase simétrica (panel a) y en la fase deformada (panel b). Obsérvese que en la fase simétrica se compara con los resultados numéricos de la probabilidad de transición correspondiente al estado  $1_1$ , mientras que en la fase deformada se compara con el estado  $1_2$  (ver texto). En línea discontinua se tiene la TDA y la corrección más allá de campo medio se simboliza con línea azul continua. Los cálculos numéricos que se simbolizan con círculos rojos (panel a) o cuadrados naranjas (panel b). El tamaño del sistema es  $N = 40$ .

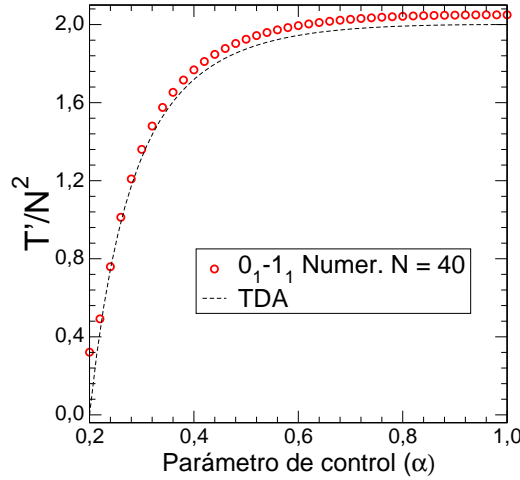
$l = 1$  es un modo de Goldstone y por consiguiente, los resultados numéricos se calculan para el segundo estado excitado con  $l = 1, 1_2$ .

Los resultados de campo medio en la fase deformada para  $T'$  (3.148) se visualizan en la figura 3.20. Una vez más se comparan resultados tanto numéricos como analíticos en un sistema de  $N = 40$ .

Claramente el resultado analítico para  $T$  en la fase simétrica (3.134) mejora notablemente el proporcionado por la TDA. En el caso particular de  $T'$ , la corrección más allá de campo medio no se puede calcular con las herramientas desarrolladas ya que sería necesario realizar una transformación de Bogoliubov no lineal.

### 3.2.5. Propiedades de escalado por tamaño finito para el modelo vibrónico $U(3)$

Al igual que en el modelo vibrónico, se ha comprobado que las correcciones sobre campo medio desarrolladas en el presente trabajo reproducen bien los



**Figura 3.20:** Observable  $T'$  en la fase deformada. En línea discontinua se tiene la TDA y los cálculos numéricos que se simbolizan con círculos rojos. El tamaño del sistema es  $N = 40$ .

cálculos exactos, incluso para sistemas donde el número de partículas  $N$  es pequeño y, además, cuando  $N$  es grande se recupera la aproximación de campo medio. Sin embargo, en las diversas gráficas anteriores se ha podido observar que en una pequeña región próxima al punto crítico los cálculos analíticos no se ajustaban bien a los cálculos exactos. Por ello, para analizar cómo se comportan los observables estudiados anteriormente en el punto crítico, se realiza un estudio de cómo escalan frente al tamaño finito del sistema. Para ello, ya se vió que las correcciones sobre campo medio incluían un comportamiento singular en el punto crítico. Aprovecharemos este hecho para obtener los exponentes críticos de cada observable tal y como se hizo con el modelo vibrónico. Dichos exponentes críticos permitirán conocer cómo escala cada observable.

Por tanto, a continuación se procederá a obtener los exponentes críticos de los observables estudiados anteriormente. Los exponentes críticos se compararán con los resultados numéricos publicados en [23]. Presumiblemente esta es la primera vez que se calculan analíticamente los exponentes críticos para una transición  $U(2L) - SO(2L + 1)$  con valores semienteros de  $L$  ( $L = 1/2$ ). Para recordar cómo extraer los exponentes críticos se puede volver a revisar la sección 3.1.6.

$\Phi$	$x_\Phi$	$n_\Phi$	Exponentes críticos	Resultados numéricos [23]
$\mathcal{E}_0$	+1/2	+1	-4/3	$-A_{\epsilon 1} = -0,9564(5)^1$
$\Delta_{1ph}$	+1/2	0	-1/3	$-A_{\Gamma_{1,vib}} = -0,33743(10)$
$\langle \hat{n} \rangle$	-1/2	0	+1/3	$-A_{n1} + 1 = 0,3770(5)$
$T/N$	-1/2	0	+1/3	$0,32026(13)^2$

**Tabla 3.2:** Exponentes críticos para los observables estudiados: energía del estado fundamental ( $\mathcal{E}_0$ ), energía del gap ( $\Delta_{1ph}$ ), valor esperado de bosones  $\tau$  ( $\langle \hat{n} \rangle$ ), y la probabilidad de transición normalizada  $T/N$ .

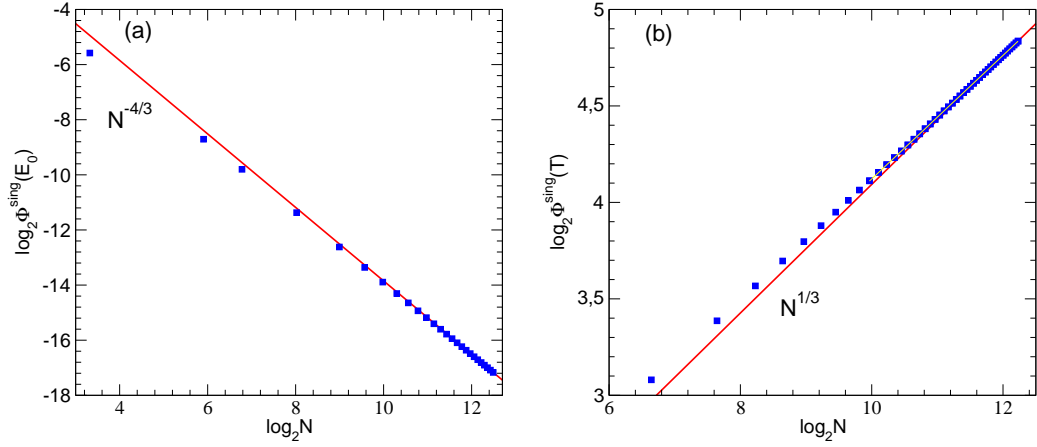
A modo de ejemplo, si nos centramos en la fase simétrica en la energía del estado fundamental (3.130a), los términos regulares y singulares son  $\mathcal{E}_0^{reg} = \alpha + (3\alpha - 1)/N$  y  $\mathcal{E}_0^{sing} = \Xi^{sim}(\alpha)^{1/2}/N$  respectivamente. Por tanto,  $x_\Phi = 1/2$ ,  $n_\Phi = 1$  y el exponente crítico es  $N^{-4/3}$ . Un valor idéntico se obtiene si se calcula el exponente en la fase deformada usando la ecuación (3.141a). El valor de los exponentes para los diferentes observables estudiados en el presente modelo se pueden encontrar en la tercera columna de la Tabla 3.2. Los resultados que se obtienen coinciden con los exponentes críticos calculados en [69] para la transición  $U(2L) - SO(2L + 1)$  con valores de  $L$  enteros.

Los exponentes críticos calculados para  $\Delta_{1ph}$  y  $\langle \hat{n} \rangle$  se ajustan relativamente bien con los calculados numéricamente en Ref. [23], tal y como se refleja en la última columna de la Tabla 3.2, y también coinciden con los valores asintóticos que se sugieren en esa referencia. Puesto que la definición para los observables en este trabajo y en la referencia [23] son diferentes, la comparación de los exponentes no siempre es directa. Para facilitar esta comparación se ha incluido en la última columna de la Tabla 3.2 el valor numérico y la notación que se usa [23] para los observables.

Los exponentes críticos calculados analíticamente coinciden con los calculados numéricamente en [23] salvo para la energía del estado fundamental del sistema. La discrepancia para este observable se debe a que en el cálculo

<sup>1</sup>La diferencia en este caso se explica incluyendo la parte regular en el cálculo del exponente crítico en [23]. Ver la discusión en el texto.

<sup>2</sup>Este exponente crítico no se calculó en [23].



**Figura 3.21:** Gráfica en escala  $\log\text{-}\log$  de la parte singular de la energía de estado fundamental ( $\Phi = \mathcal{E}_0$ , panel a) y de la parte singular de la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el primer estado excitado ( $\Phi = T/N$ , panel b) evaluados en el punto crítico ( $\alpha_c = 0,2$ ) como función del tamaño del sistema. Los cuadrados azules simbolizan los resultados numéricos y la línea roja la ley de potencias esperada.

numérico realizado en [23] no se hace una distinción entre las componentes regular y singular. Se puede ver fácilmente que en la ecuación (3.130a), si la componente singular de la energía del estado fundamental no está aislada, el exponente crítico que se obtiene es  $-1$  al igual que en [23]. En la figura 3.21a se representan los cálculos numéricos reelaborados para la energía del estado fundamental dejando a un lado la parte regular. Los resultados obtenidos en escala  $\log\text{-}\log$  presentan la dependencia esperada.

También se ha calculado numéricamente el exponente crítico de la intensidad de transición. Los resultados se presentan en la figura 3.21b, la cual refleja que los resultados numéricos siguen la dependencia predicha. El ajuste numérico de los resultados para  $N > 1000$  proporciona el valor dado en la tabla 3.2 para éste exponente crítico. Dicho valor numérico concuerda razonablemente bien con el predicho teóricamente.

### 3.3. Resumen y conclusiones

En el presente capítulo se han introducido dos modelos algebraicos de interés en Física Molecular, a saber, el modelo vibrónico y el modelo  $U(3)$ .

Éste último se puede considerar como el límite  $2D$  del modelo vibrónico. Dichos modelos algebraicos son sistemas bosónicos de dos niveles que exhiben transiciones de fase cuánticas para su estado fundamental. Para su estudio se han revisado brevemente las propiedades algebraicas de ambos modelos con el objetivo de conocer las simetrías dinámicas que presentan. Especialmente útil ha sido la introducción del formalismo Q-consistente, ya que nos ha permitido expresar el hamiltoniano para cada modelo de la manera más simple posible pero manteniendo toda la física de la QPT. Para el modelo vibrónico se ha estudiado la transición de fase  $U(3) - SO(4)$  y para el modelo  $U(3)$  la transición  $U(2) - SO(3)$ .

En ambos modelos se ha obtenido la funcional de energía que proporciona la aproximación de campo medio. También se han introducido las técnicas que nos han permitido ir más allá de la aproximación de campo medio. En cada caso, los observables han sido estudiados numéricamente, diagonalizando cada hamiltoniano en una base adecuada, y analíticamente con las aproximaciones mencionadas anteriormente. Los resultados numéricos y analíticos se han comparado y se ha visto que las correcciones al campo medio se ajustan mucho mejor a los resultados numéricos para un entorno próximo al punto crítico que los cálculos a campo medio.

Finalmente, los resultados obtenidos con las correcciones al campo medio nos han permitido estudiar analíticamente cómo escalan con el tamaño finito del sistema los observables estudiados en cada modelo. Los exponentes críticos obtenidos concuerdan con los presentados en [23, 69]. Aunque en [69] se estudia de una manera general las correcciones por tamaño finito de transiciones  $U(2L+1) - SO(2L+2)$  para  $L$  entero, aquí ponemos de manifiesto que los resultados que se presentan en dicha referencia siguen siendo válidos para  $L$  semientero.





## Capítulo 4

# Transiciones de fase en estados excitados y decoherencia: modelo de Lipkin

El modelo de Lipkin fue originalmente introducido en Física Nuclear por Lipkin, Meshkov y Glick en el 1965 [24–26], pero ha encontrado multitud de aplicaciones en otras áreas de la Física como pueden ser la Mecánica Estadística de cadenas de espines [95], los condensados de Bose-Einstein [96] o el entrelazamiento cuántico [97] por citar sólo algunos ejemplos. El continuo interés que aún hoy en día suscita este tipo de modelos se debe al hecho de que describen sistemas cuánticos exactamente solubles de muchas partículas interaccionantes, aparte de ser unos de los modelos más simples en los que se pueden explorar transiciones de fase cuánticas (QPTs).

El modelo de Lipkin, en el lenguaje bosónico que vamos a usar en este capítulo, se representa por un sistema de bosones escalares susceptibles de ocupar dos niveles energéticos no degenerados. Se denota por bosones tipo  $s$  a los que ocupan el nivel más bajo y bosones tipo  $t$  a los que están en el nivel superior. Haciendo uso del formalismo CQF, que se viene usando en este trabajo, se puede introducir el hamiltoniano del modelo de Lipkin

imponiendo que  $L = 0$  en (3.18),

$$\hat{H} = \alpha \hat{n}_t - \frac{1 - \alpha}{N} \hat{Q}^\omega \hat{Q}^\omega, \quad (4.1)$$

con  $\hat{n}_t$ , número de bosones tipo  $t$ , y  $\hat{Q}^\omega$  definidos como:

$$\hat{n}_t = t^\dagger t, \quad \hat{Q}^\omega = s^\dagger t + t^\dagger s + \omega t^\dagger t, \quad (4.2)$$

en términos de los dos tipos de bosones escalares  $s$  y  $t$ , siendo  $\alpha$  y  $\omega$  los dos parámetros de control independientes. En este tipo de hamiltonianos el número total de bosones  $N = \hat{n}_s + \hat{n}_t$  se conserva. Obsérvese además que las unidades vienen determinadas por el parámetro  $\alpha$ , el cual siempre se expresará en unidades arbitrarias de energía. Por tanto, en lo que sigue, la energía y el tiempo vendrán expresados en unidades arbitrarias. Nótese que los bosones  $s$  y  $t$  representan el papel de los bosones  $s$  y  $p_\mu$  del modelo vibrónico respectivamente. La diferencia entre ambos modelos reside en que mientras el modelo vibrónico queda descrito con un álgebra  $U(4)$ , el de Lipkin lo hace con un álgebra  $U(2)$ . Por otra parte, la conexión entre el hamiltoniano (4.1) y un modelo de Lipkin generalizado o un modelo de espines se puede obtener introduciendo una transformación de Schwinger cuyos operadores  $\hat{S}^+$ ,  $\hat{S}^-$  y  $\hat{S}^z$  son

$$\hat{S}^+ = t^\dagger s, \quad (4.3)$$

$$\hat{S}^- = s^\dagger t, \quad (4.4)$$

$$\hat{S}^z = \frac{1}{2}(t^\dagger t - s^\dagger s), \quad (4.5)$$

que satisfacen las relaciones de conmutación del álgebra  $SU(2)$ ,

$$[\hat{S}^+, \hat{S}^-] = 2\hat{S}^z, \quad (4.6)$$

$$[\hat{S}^z, \hat{S}^+] = \hat{S}^+, \quad (4.7)$$

$$[\hat{S}^z, \hat{S}^-] = -\hat{S}^-. \quad (4.8)$$

$\hat{S}$  representa el espín total de una cadena de  $N$  átomos de espín  $1/2$ .

En la literatura se pueden encontrar diversos estudios realizados sobre las propiedades del modelo de Lipkin, incluyendo su comportamiento en transiciones de fase cuánticas [15, 98]. Sin embargo, nuestro objetivo será el estudio del proceso de la decoherencia de un qubit (partícula de espín  $1/2$  que consideraremos como el sistema) inmerso en un entorno bosónico descrito por un modelo de Lipkin. De hecho, la conexión entre el proceso de la decoherencia y la presencia de transiciones de fase cuánticas en el entorno ha sido recientemente estudiada en otros modelos [99–101].

Una de las ventajas que presenta el modelo de Lipkin es que es lo suficientemente simple como para estudiar la decoherencia de una forma cómoda, sin necesidad de manipular tediosas expresiones matemáticas, pero a la vez posee una dinámica interna no trivial que lo hace sumamente interesante.

A continuación se estudiará el diagrama de fases del modelo de Lipkin y su relación con la densidad de niveles de energía en el espectro. Después se discutirá la interacción del entorno (modelo de Lipkin) con el sistema (qubit) y finalmente se estudiará cómo el fenómeno de la decoherencia en el sistema se ve afectado por la presencia de una transición de fase cuántica para estados excitados (ESQPT) en el entorno.

## 4.1. El modelo para el estudio de la decoherencia

Siguiendo la notación de [100] se considerará un sistema compuesto por una partícula de espín  $1/2$  acoplada a un entorno bosónico, de modo que el sistema y el entorno evolucionan de acuerdo al hamiltoniano  $\hat{H}_{S\mathcal{E}}$ ,

$$\hat{H}_{S\mathcal{E}} = \hat{\mathcal{I}}_S \otimes \hat{\mathcal{H}}_E + |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{\mathcal{H}}_{\lambda_0} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{\mathcal{H}}_{\lambda_1}, \quad (4.9)$$

siendo  $\hat{\mathcal{I}}_S$  el hamiltoniano correspondiente a los grados de libertad internos del sistema,  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  las dos componentes del espín, y  $\lambda_0, \lambda_1$  la fuerza de acoplamiento de cada componente al entorno. Además, los tres términos  $\hat{\mathcal{H}}_E$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_{\lambda_0}$  y  $\hat{\mathcal{H}}_{\lambda_1}$  actúan sobre el espacio de Hilbert del ambiente. Con este tipo de acoplamiento el entorno evoluciona con un hamiltoniano efectivo que depende del estado del sistema  $|j\rangle$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_j = \hat{\mathcal{H}}_E + \hat{\mathcal{H}}_{\lambda_j}$ , con  $j = 0, 1$ . El término  $\hat{\mathcal{H}}_{\lambda_j}$  es el que hace posible que el entorno cruce un punto crítico como consecuencia de la interacción con la partícula de espín  $1/2$  [100].

Como se mencionó anteriormente, el entorno se va a modelar como un sistema bosónico de dos niveles descrito por un modelo de Lipkin generalizado, cuyo hamiltoniano recordemos que es

$$\hat{H}_E = \alpha \hat{n}_t - \frac{1 - \alpha}{N} \hat{Q}^\omega \hat{Q}^\omega, \quad (4.10)$$

con  $\hat{n}_t$  y  $\hat{Q}^\omega$  definidos en (4.2).

A continuación se expondrán muy brevemente los principales resultados que se obtienen al realizar un estudio en el marco de la teoría de campo medio para el hamiltoniano  $\hat{H}_E$ .

### 4.1.1. Teoría de campo medio para $\hat{H}_E$ , hamiltoniano del modelo de Lipkin

En el capítulo 1 ya se mostró que dado un sistema bosónico se puede obtener un campo medio en el que las partículas se mueven de forma que no

interactúan entre sí. Esta es la aproximación de Hartree-Bose [38]. En dicha aproximación, el estado fundamental será un condensado  $|g\rangle$  de bosones, donde todos ellos ocupan el estado monoparticular de mínima energía. Con el propósito de estudiar el diagrama de fases para el hamiltoniano (4.10) en función de los parámetros de control  $\alpha$  y  $\omega$ , se introduce el condensado bosónico, dependiente de un parámetro variacional  $\beta$ , que describe de forma aproximada el estado fundamental de un sistema bosónico descrito por el modelo de Lipkin,

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}(\Gamma_g^\dagger)^N|0\rangle, \quad (4.11)$$

donde  $|0\rangle$  denota el vacío bosónico y con

$$\Gamma_g^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}}(s^\dagger + \beta t^\dagger). \quad (4.12)$$

Al evaluar el valor esperado del hamiltoniano en este condensado se obtiene una superficie de energía dependiente del parámetro variacional  $\beta$ :

$$\begin{aligned} E(N, \beta) &= \frac{\langle g|H_E|g\rangle}{\langle g|g\rangle} = N \frac{\beta^2}{(1+\beta^2)^2} \left\{ 5\alpha - 4 + 4\beta\omega(\alpha - 1) \right. \\ &\quad \left. + \beta^2 [\alpha + \omega^2(\alpha - 1)] \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Minimizando dicha superficie de energía (4.13) con respecto a  $\beta$ , para valores dados de los parámetros de control  $\alpha$  y  $\omega$ , se obtiene el valor de equilibrio  $\beta_e$  que define la fase del sistema en el estado fundamental. El valor  $\beta_e = 0$  se corresponde con la fase simétrica y el valor  $\beta_e \neq 0$  se corresponde con la fase no simétrica o deformada.

Este hamiltoniano presenta una QPT de segundo orden para  $\omega = 0$  y una QPT de primer orden si  $\omega \neq 0$ . En este último caso el punto crítico se define como aquella situación en la que los mínimos en la fase simétrica y en la fase deformada están degenerados y sus energías son iguales a cero. Puesto que el estudio del diagrama de fase para este modelo se puede encontrar en varias publicaciones [15, 98] únicamente se resumirán las principales características:

1.  $\beta = 0$  siempre es un punto estacionario. Si  $\omega = 0$ , la solución con  $\beta = 0$  es un máximo para  $\alpha < 4/5$  y pasa a ser un mínimo para  $\alpha > 4/5$ . En el caso de que  $\alpha = 4/5$ ,  $\beta = 0$  es un punto de inflexión. Así,  $\alpha = 4/5$  es el punto en el cual  $\beta = 0$  comienza a ser un mínimo y define la línea antiespinodal en el plano  $\omega - \alpha$ .
2. Si  $\omega \neq 0$  existe una región donde coexisten dos mínimos, uno esférico y otro deformado. Esta región se define como la comprendida entre el punto donde aparece el mínimo  $\beta = 0$  (punto antiespinodal) y aquél donde aparece otro mínimo en  $\beta \neq 0$  (punto espinodal). La línea espinodal viene dada por la ecuación implícita,

$$\frac{3\alpha}{3\alpha - 4} = \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} \left( 1 - \left( 1 + \frac{\mathcal{B}}{\mathcal{A}} \right)^{\frac{3}{2}} \right), \quad (4.14)$$

donde  $\mathcal{A} = (4 - 3\alpha + 2(\alpha - 1)\omega^2)^2$  y  $\mathcal{B} = 36\omega^2(\alpha - 1)^2$ . Así por ejemplo, para  $\omega = 1/\sqrt{2}$ ,  $\alpha \simeq 0,822559$ .

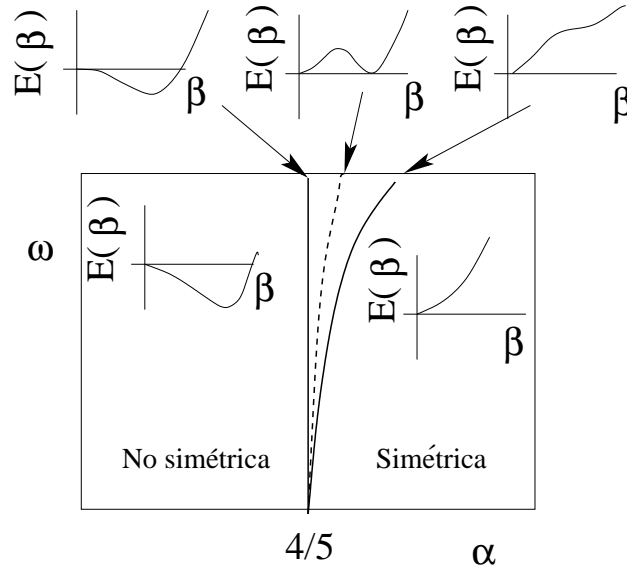
3. En la región de coexistencia, el punto crítico viene definido por la condición de que ambos mínimos (esférico y deformado) están degenerados. En el punto crítico los dos mínimos degenerados se encuentran en  $\beta_e = 0$  y  $\beta_e = \omega/2$  y la energía del sistema es cero. La línea crítica viene dada por

$$\alpha_c = \frac{4 + \omega^2}{5 + \omega^2}. \quad (4.15)$$

Por ejemplo, para  $\omega = 1/\sqrt{2}$  el punto crítico se encuentra en  $\alpha_c = 9/11$ .

4. Conforme al análisis anterior, para  $\omega \neq 0$  se tiene una transición de fase de primer orden, mientras que para  $\omega = 0$  se tiene una transición de fase de segundo orden en  $\alpha = 4/5$ . En este caso, los puntos crítico, antiespinodal y espinodal constituyen un único punto.

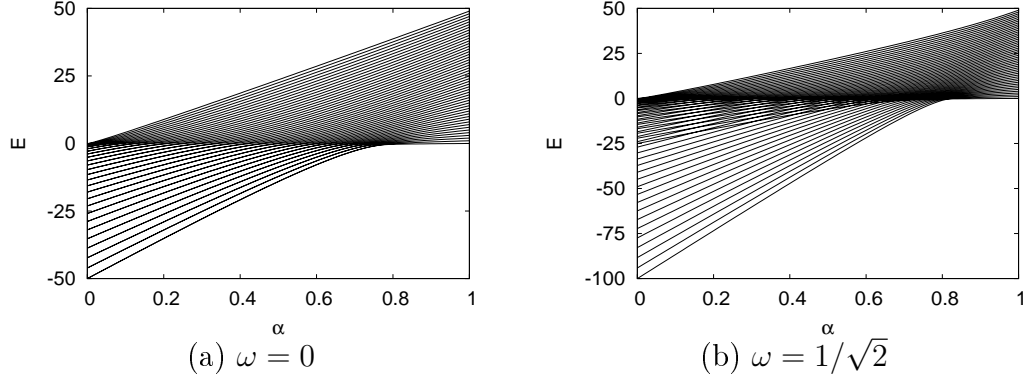
Todo este análisis queda expuesto gráficamente en la figura 4.1, donde se presenta de forma esquemática el diagrama de fases para el hamiltoniano  $\hat{H}_E$



**Figura 4.1:** Esquema del diagrama de fase para  $\hat{H}_E$  (4.10) como función de los parámetros de control  $\alpha$  y  $\omega$ .

(4.10) en el plano  $\omega - \alpha$ .

Además, el hamiltoniano (4.1) también presenta una transición de fase cuántica para estados excitados (ESQPT). Recordemos que una ESQPT es una evolución no analítica de algún estado excitado del sistema a medida que se varía el parámetro de control del hamiltoniano. Este tipo de transición es análoga a una transición de fase en el estado fundamental (QPT) pero con la diferencia de que se produce para estados excitados. Dichos estados vienen definidos por la energía,  $E_c$ , en que se produce la transición. Según [19] se pueden distinguir fundamentalmente dos tipos distintos de ESQPTs: se tiene una ESQPT de primer orden si en el límite termodinámico existe un cruce de dos niveles a la energía crítica  $E = E_c$ , mientras que la ESQPT es continua si el número de niveles que interaccionan es localmente grande en  $E = E_c$  pero sin que se produzca un cruce real. Puesto que la entropía de un sistema cuántico está relacionada con su densidad de estados, es posible establecer una relación en el límite termodinámico entre una ESQPT y una transición de fase estándar a una cierta temperatura crítica [102]. Estos tipos de transiciones de fase se han identificado recientemente en el



**Figura 4.2:** Niveles de energía del hamiltoniano (4.10) como función de  $\alpha$  para  $N = 50$  y dos valores distintos de  $\omega$ .

modelo de Lipkin [7, 8, 12], en el modelo de bosones interactuantes [9–11], y de forma más general en hamiltonianos bosónicos o fermiónicos de pairing para sistemas de dos niveles (para una completa revisión, incluyendo análisis semiclásicos se puede consultar la referencia [13]). En todos los casos la ESQPT se produce por encima del valor crítico del parámetro de control del hamiltoniano, lo que implica que el punto crítico se va moviendo desde el estado fundamental hasta el correspondiente estado excitado.

Este comportamiento se puede visualizar en la figura 4.2, donde se presenta el espectro de niveles energéticos para el hamiltoniano (4.10) con  $N = 50$  y en función del parámetro de control  $\alpha$  para  $\omega = 0$  (panel (a)) y para  $\omega = 1/\sqrt{2}$  (panel (b)). En ambos casos se aprecia un colapso de niveles a la energía  $E \approx 0$  para  $\alpha < \alpha_c$ . En el panel (b) se aprecia además una curva crítica adicional para  $E < 0$  que divide el diagrama de niveles en dos regiones: una en la que los niveles se comportan suavemente, y otra en la que la densidad de niveles aumenta y se observan algunos cruces de niveles. Un comportamiento similar se ha encontrado en un hamiltoniano tipo cúspide [20].

Es un hecho general que se puede reconocer cualquier transición de fase para estados excitados analizando la dependencia de la densidad de niveles cuánticos  $\rho(\mathcal{E}, \alpha)$  con la energía escalada  $E/N = \mathcal{E}$ . Esta dependencia en el



punto donde se produce la ESQPT,  $\mathcal{E}_c(\alpha)$ , muestra una no analiticidad cuyo tipo permite clasificar el comportamiento crítico de acuerdo con la tipología estándar de las transiciones de fase termodinámicas. La no analiticidad de  $\rho(\mathcal{E}, \alpha)$  se refleja en fenómenos específicamente discontinuos en el flujo de los niveles escalados de energía  $\mathcal{E}_i(\alpha)$  a través de la curva  $\mathcal{E}_c(\alpha)$  [13, 20].

La teoría semiclásica de la densidad de niveles [103–105] conduce a la descomposición

$$\rho(\mathcal{E}, \alpha) = \bar{\rho}(\mathcal{E}, \alpha) + \tilde{\rho}(\mathcal{E}, \alpha), \quad (4.16)$$

donde  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{\rho}$  representan componentes suaves y oscilatorias, respectivamente, de la densidad de niveles. A su vez, la componente oscilante se puede expresar como una suma sobre órbitas periódicas de la siguiente forma general  $\tilde{\rho} = \sum_k A_k \cos(\hbar^{-1}S_k + \phi_k)$ , donde  $A_k$  y  $\phi_k$  son la amplitud y una cierta fase de la  $k$ -ésima contribución de la órbita, mientras que  $S_k = \oint \vec{p} \cdot d\vec{x}$  representa la acción sobre dicha órbita. Esta parte conduce a oscilaciones infinitamente rápidas que se cancelan si la densidad de niveles se integra sobre un intervalo de energía arbitrariamente estrecho en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ . En este límite, únicamente la componente suave de la ecuación (4.16) es relevante. Ésta se expresa por medio de órbitas de longitud cero, proporcionando la siguiente fórmula

$$\bar{\rho}(\mathcal{E}, \lambda) = (2\pi\hbar)^{-f} \underbrace{\int \delta(\mathcal{E} - \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, \lambda)) d\vec{p} d\vec{x}}_{\Omega(\mathcal{E}, \lambda)}, \quad (4.17)$$

donde  $\mathcal{H}$  es el hamiltoniano clásico que depende en general de vectores de dimensión  $f$  de las coordenadas  $\vec{x}$  y los momentos  $\vec{p}$ . La cantidad  $\Omega(\mathcal{E}, \alpha) d\mathcal{E}$  representa un volumen de dimensión  $2f$  en el espacio de fase disponible para el intervalo de energía  $(\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E})$ .

De estas consideraciones se deduce que en los sistemas con análogo termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ) y límite clásico ( $\hbar \rightarrow 0$ ), cualquier tipo de no analiticidad en la dependencia de la energía del volumen de espacio fásico clásico genera una ESQPT a nivel cuántico. Tales no analiticidades se pueden seguir, por ejemplo, de la presencia de puntos estacionarios en el hamiltoniano [6, 8, 11, 13, 20, 106–108]. La dependencia de la densidad

de niveles con la energía escalada es la clave para la clasificación de la ESQPT debido a que la entropía en la colectividad microcanónica cuántica es proporcional al logaritmo de  $\rho(\mathcal{E}, \alpha)$ . Esto es consistente con la clasificación de la correspondiente transición de fase térmica. Así por ejemplo, un salto de  $\Omega(\mathcal{E}, \alpha)$  en  $\mathcal{E}_c(\alpha)$  se corresponde con una transición de fase de primer orden. Además, se sabe que en sistemas con  $f = 1$  existen efectos de la ESQPT incluso más fuertes que en las de primer orden. Estos efectos se asocian con un pico infinito de  $\Omega(\mathcal{E}, \alpha)$  que se muestra en la correspondiente dependencia de  $\rho(\mathcal{E}, \alpha)$ . El origen de este comportamiento se encuentra con frecuencia en un máximo local del potencial unidimensional a la energía  $\mathcal{E}_c(\alpha)$ . Por otra parte, una no analiticidad de carácter más suave en  $\Omega(\mathcal{E}, \alpha)$ , como puede ser una discontinuidad en la derivada o una derivada infinita, producen una transición de fase continua. Esto sucede típicamente en sistemas con más de un grado de libertad [20]. En el caso de una derivada discontinua de orden  $(n - 1)$  ( $n \geq 2$ ) la transición es de orden  $n$ . Para una derivada singular (infinita) la transición no tiene clasificación según Ehrenfest.

Por consiguiente, una forma sencilla de analizar el diagrama de fases es por medio de la densidad de estados. Con el objetivo de obtener una aproximación analítica para esta magnitud se parte de un estado coherente del tipo

$$|N, \beta\rangle = e^{\sqrt{\frac{N}{(1+\beta^2)}}(s^\dagger + \beta t^\dagger)} |0\rangle, \quad (4.18)$$

en el que el parámetro  $\beta$  se reemplaza por un parámetro complejo  $z = \tan(\phi/2) \exp(i\xi)$  y en términos del cual la energía se expresa como

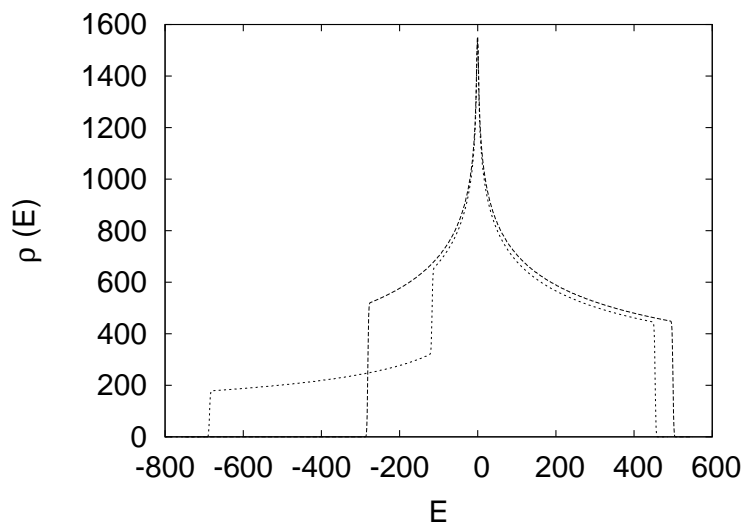
$$\mathcal{H}(\phi, \xi) = \langle N, \phi, \xi | \hat{H} | N, \phi, \xi \rangle. \quad (4.19)$$

Una buena aproximación para la densidad de estados ya sabemos que se obtiene calculando cuántos niveles de energía hay en un intervalo  $(E, E+dE)$ ,

$$\rho(E) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int d\xi d\phi |J(\phi, \xi)| \delta(\mathcal{H}(\phi, \xi) - E), \quad (4.20)$$

en donde  $|J(\phi, \xi)|$  es el jacobiano de la transformación  $(\phi, \xi) \rightarrow (p, q)$ , con  $p$  y  $q$  coordenadas canónicas del hamiltoniano, y  $\mathcal{N}$  es una constante de

normalización.



**Figura 4.3:** Densidad de estados del hamiltoniano (4.10) para  $N = 1000$ ,  $\alpha = 0,5$ . La línea discontinua se corresponde con el caso  $\omega = 0$  y la línea de puntos se corresponde con el caso  $\omega = 1/\sqrt{2}$ .

En la figura 4.3 se muestra la densidad de niveles del hamiltoniano (4.10) calculada mediante la ecuación (4.20), para  $N = 1000$ ,  $\alpha = 1/2$  y los mismos valores de  $\omega$  que en la figura 4.2. Se observa que el colapso de niveles en  $E = 0$  produce un pico en  $\rho(E)$  tanto para  $\omega = 0$  como para  $\omega = 1/\sqrt{2}$ . Es más, en éste último caso, también se observa un salto en la densidad de estados para un valor dado de  $E < 0$  ( $E \approx -125$  para este valor de  $\omega$ ). Aunque las figuras 4.2 y 4.3 no se pueden comparar cuantitativamente hablando porque son sistemas con diferentes tamaños, se puede realizar una comparación cualitativa en lo que se refiere al comportamiento de la figura 4.3 respecto a lo que se observa en la figura 4.2. En efecto, para  $\omega = 1/\sqrt{2}$  ya se mencionó que aparece en el panel (b) de la figura 4.2 una curva crítica adicional para  $E < 0$  que divide al diagrama de niveles en dos regiones. Si fijamos el valor  $\alpha = 0,5$  y vamos subiendo en energía, antes de alcanzar la curva crítica correspondiente a  $E \approx 0$ , se cruza la otra curva que mencionábamos anteriormente y esto queda reflejado en la figura 4.3 como una discontinuidad en la densidad de niveles. Similares resultados se obtienen para diferentes valores de  $\alpha$  y  $\omega$ . En

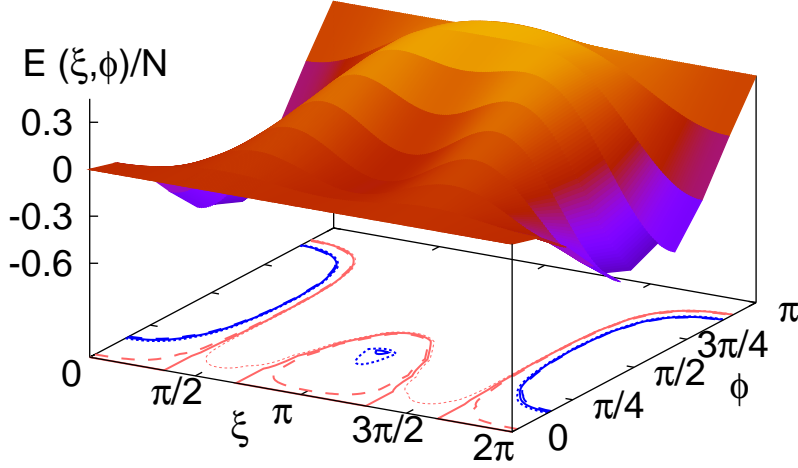
particular, el salto en la densidad de estados para cierto valor de la energía  $E < 0$  únicamente se observa si  $\omega > 0$ . Por tanto, esto nos lleva a concluir que en este modelo hay dos tipos de ESQPT. Si conservamos la terminología que se usa en las transiciones de fase termodinámicas, contamos los niveles de energía hasta una energía dada  $E$  y se toma  $N(E) = \int dE \rho(E)$  como el análogo de la energía libre  $F(N, T)$ , entonces se concluye que:

- a) Existe una transición de fase cuántica de tipo  $\lambda$  a la energía  $E_c^{(2)} = 0$ , para cualquier valor del parámetro  $\omega$ .
- b) Existe también una transición de fase cuántica de primer orden para un valor de la energía crítica  $E_c^{(1)} < 0$  si  $\omega > 0$ .

Mediante el estudio de la superficie de energía  $\mathcal{H}(\phi, \xi)$  se puede estimar el valor de las energías críticas a las que se producen estas transiciones de fase cuánticas. En la figura 4.4 se representa  $\mathcal{H}(\phi, \xi)/N$  en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  para  $\alpha = 1/2$  y  $\omega = 1/\sqrt{2}$ . Las curvas dibujadas en la base de la figura son las curvas de nivel para valores dados de la energía  $\mathcal{H}(\phi, \xi)/N = \mathcal{E}$ . Las curvas rojas discontinuas representan distintos valores de  $E$  alrededor de  $E_c^{(2)}$  para la transición de fase continua. La línea roja continua representa el punto crítico  $E_c = 0$ ; éste es el único valor para el que la curva de nivel no es analítica. Por otra parte, las curvas azules representan diferentes valores de  $E$  alrededor de la energía crítica  $E_c^{(1)}$  a la que se produce la ESQPT de primer orden. En este caso, se observa una isla alrededor de  $\xi = \pi$  que se corresponde con un mínimo local de la superficie de energía. Esto motiva la aparición de otra región en el plano  $(\phi, \xi)$  para el que la ecuación  $\mathcal{H}(\phi, \xi)/N = \mathcal{E}$  tiene solución, y por consiguiente la densidad de estados  $\rho(E)$  aumenta de manera súbita.

#### 4.1.1.1. Más allá del campo medio

Al igual que en el modelo vibrónico, se realiza aquí un estudio más allá de campo medio con ayuda de una transformación de Holstein-Primakoff, una transformación de desplazamiento (shift) y una transformación de Bogoliubov. Como es sabido, la transformación de Holstein-Primakoff ofrece un



**Figura 4.4:** Superficie de energía  $\mathcal{H}(\phi, \xi)/N$  en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  para  $\alpha = 1/2$  y  $\omega = 1/\sqrt{2}$ . Las curvas de nivel se han dibujado en la base de la figura.

desarrollo simple y natural en potencias de  $1/N$  en donde el primer término coincide con la expresión obtenida en campo medio para la magnitud que se esté estudiando.

Recordemos que la transformación de Holstein-Primakoff elimina el boson de tipo  $s$  transformando los operadores bosónicos bilineales de la siguiente manera:

$$t^\dagger t = b^\dagger b, \quad (4.21)$$

$$t^\dagger s = N^{1/2} b^\dagger \left(1 - \frac{\hat{n}_b}{N}\right)^{1/2} = (s^\dagger t)^\dagger, \quad (4.22)$$

$$s^\dagger s = N - \hat{n}_b. \quad (4.23)$$

Los bosones  $b$  satisfacen la relación de conmutación  $[b, b^\dagger] = 1$ . Se realiza un desarrollo de la raíz en sucesivas potencias de  $N$  suponiendo que  $\langle \hat{n}_b \rangle / N \ll$

1. El siguiente paso consiste en introducir los bosones  $c$  a través de una transformación de Shift,

$$\begin{aligned} b^\dagger &= \sqrt{N}\lambda + c^\dagger, \\ b &= \sqrt{N}\lambda + c, \end{aligned} \quad (4.24)$$

con la relación de conmutación  $[c, c^\dagger] = 1$ . La transformación de Shift permite considerar tanto estados deformados como esféricos. El caso esférico se recupera para  $\lambda = 0$ .

Con estas transformaciones se obtiene un Hamiltoniano del tipo:

$$\hat{H}_E = \hat{H}_1 N + \hat{H}_{1/2} N^{1/2} + \hat{H}_0 N^0 + \theta(1/\sqrt{N}). \quad (4.25)$$

El término  $\hat{H}_1$  coincide con la energía por partícula que proporciona el campo medio. Para obtener la  $\lambda$  de equilibrio,  $\lambda_e$ , basta simplemente imponer la condición de mínimo en  $\hat{H}_1$ :

$$\left. \frac{\partial \hat{H}_1}{\partial \lambda} \right|_{\lambda_e} = 0. \quad (4.26)$$

En  $\lambda = \lambda_e$  se tiene que  $\hat{H}_{1/2} = 0$  ya que  $\hat{H}_{1/2} = \frac{1}{2} \frac{\partial \hat{H}_1}{\partial \lambda}$ . Además,  $\lambda$  está relacionada con la  $\beta$  del campo medio por medio de la relación:

$$\lambda = \frac{\beta}{\sqrt{\beta^2 + 1}}, \quad (4.27)$$

obteniéndose que la energía de campo medio es,

$$E(N, \beta, \alpha, \omega) = N \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} [5\alpha - 4 + \alpha\beta^2 + \beta\omega(\alpha - 1)(4 + \beta\omega)]. \quad (4.28)$$

Nótese que la ecuación (4.28) es la misma que la ecuación (4.13) obtenida usando los condensados bosónicos. Así pues el Hamiltoniano dado en (4.25)

hasta el orden  $N^0$  queda de la forma:

$$\hat{H}_E \approx E(N, \beta_e, \alpha, \omega) + \hat{H}_0 N^0, \quad (4.29)$$

siendo  $\beta_e$  el valor de  $\beta$  que hace mínima la ecuación (4.28).

Ahora bien, el término  $\hat{H}_0$ , dependiente de los operadores  $c$  y  $c^\dagger$ , no es diagonal en ellos. Mediante una transformación de Bogoliubov se consigue su diagonalización.

Se define dicha transformación como:

$$\begin{aligned} c^\dagger &= u d^\dagger + v d, \\ c &= v d^\dagger + u d, \end{aligned} \quad (4.30)$$

los operadores  $d$  y  $d^\dagger$  cumplen la relación de conmutación  $[d, d^\dagger] = 1$ . Puesto que además la transformación ha de conservar las relaciones de conmutación entre  $c$  y  $c^\dagger$ , se deduce que los parámetros  $u$  y  $v$  deben verificar que

$$u^2 - v^2 = 1. \quad (4.31)$$

Con esta transformación el Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  poseerá términos no diagonales del tipo  $d^\dagger d^\dagger$  y  $dd$ , pero imponiendo que se anulen los coeficientes que acompañan a este tipo de operadores se llega a una relación entre  $u$  y  $v$ ,

$$\Delta(u^2 + v^2) + \xi uv = 0, \quad (4.32)$$

donde  $\Delta = \Delta(\alpha, \omega, \beta_e)$  y  $\xi = \xi(\alpha, \omega, \beta_e)$  son coeficientes conocidos que dependen de los parámetros de control  $\alpha$  y  $\omega$  y de  $\beta_e$ . Con las ecuaciones (4.31) y (4.32) se obtiene finalmente la expresión de  $u$  y  $v$  para la transformación de Bogoliubov:

$$u = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - 4\Delta^2}} + 1 \right)}, \quad (4.33)$$

$$v = -\sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - 4\Delta^2}} - 1 \right)}. \quad (4.34)$$

La aplicación sucesiva de las tres transformaciones citadas anteriormente conduce finalmente a un Hamiltoniano diagonal en los operadores  $d$  y  $d^\dagger$ ,

$$\hat{H}_E = E(N, \beta_e, \alpha, \omega) + E'_0 + W_0^{1/2} d^\dagger d, \quad (4.35)$$

siendo,

$$\begin{aligned} W_0 &= \frac{\left[ \alpha - (3\alpha - 4)\beta_e^2 + 2(\alpha - 1)\omega\beta_e(2 + \omega\beta_e - \beta_e^2) \right]}{(1 + \beta_e^2)^2} \times \\ &\times \left[ 5\alpha - 4 - (19\alpha - 20)\beta_e^2 \right. \\ &\left. + 2(\alpha - 1)\omega\beta_e(6 + 3\omega\beta_e - 7\beta_e^2 - \beta_e^4) \right], \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} E'_0 &= \frac{\left[ -\alpha + (7\alpha - 8)\beta_e^2 + 2(\alpha - 1)\omega\beta_e(-2 - \omega\beta_e + 2\beta_e^2) \right]}{2(1 + \beta_e^2)} \\ &+ \frac{W_0^{1/2}}{2}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Los términos  $E'_0$  y  $W_0 = W_0(\alpha, \omega, \beta_e)$  son conocidos al haberse fijado  $\beta_e$ ,  $\alpha$  y  $\omega$ .  $E'_0$  es un término que surge de la transformación de Bogoliubov y modifica la energía del estado fundamental. Así pues, se tiene que  $E(N, \beta_e, \alpha, \omega) + E'_0 = E_0$  es una constante que representa la energía en el estado fundamental de los operadores  $d$  y  $d^\dagger$  y  $W_0^{1/2}$  es el gap de energía entre el estado fundamental y el primer estado excitado de los bosones  $d$ .

#### 4.1.2. Acoplamiento del entorno con el qubit

Hasta ahora nos hemos centrado en el estudio del hamiltoniano que modela al entorno. Se ha analizado su diagrama de fases, viéndose que existe tanto una QPT como una ESQPT. Además se ha obtenido una expresión analítica para la energía de campo medio así como su corrección, por medio de



las aproximaciones que permiten ir más allá de campo medio. Ahora estamos interesados en estudiar el hamiltoniano de interacción entre el qubit y el entorno.

Para tal fin, puesto que se pretende relacionar el fenómeno de la decoherencia en un qubit con la estructura de las fases y puntos críticos del entorno definido por el hamiltoniano (4.10), proponemos que únicamente habrá interacción entre el qubit y el entorno si éste primero se encuentra en estado  $|1\rangle$  y que tal interacción será proporcional al número de bosones tipo  $t$  en el entorno. Es decir, el hamiltoniano de acoplamiento vendrá dado por

$$\hat{\mathcal{H}}_{\lambda_j} = \lambda_j \hat{n}_t \quad (4.38)$$

y  $\lambda_0 = 0$  si el qubit se encuentra en el estado  $|0\rangle$ , mientras que  $\lambda_1 = \lambda$  si el qubit está en el estado  $|1\rangle$ . De tal manera que el entorno vendrá descrito por un hamiltoniano efectivo dependiente del estado del qubit:

$$\hat{H}_0 = \alpha \hat{n}_t - \frac{1 - \alpha}{N} \hat{Q}^\omega \hat{Q}^\omega, \quad (4.39)$$

$$\hat{H}_1 = (\alpha + \lambda) \hat{n}_t - \frac{1 - \alpha}{N} \hat{Q}^\omega \hat{Q}^\omega. \quad (4.40)$$

Por tanto, el parámetro de acoplamiento entre el sistema y el entorno modifica el hamiltoniano del entorno. Se verá que, para ciertos valores de  $\alpha$  y de  $\lambda$ , esta modificación conlleva un cruce en las líneas críticas del diagrama de fases del citado hamiltoniano. Fenómenos similares han sido analizados previamente por varios autores [100, 101, 109], estudiando si un *quantum quench* que lleva al entorno a una QPT implica algún tipo de universalidad en el proceso de decoherencia.

En este modelo, como ya se apuntaba anteriormente, el qubit puede forzar una transición de fase en (4.40) dependiendo del valor que tome  $\lambda$ . De hecho, se tiene que para un valor cualquiera de  $\alpha$ , el valor de  $\lambda$  que motiva una transición de fase cuántica para el estado fundamental en  $\hat{H}_1$  viene dado por la relación

$$\frac{\alpha_c}{\alpha_c - 1} = \frac{\alpha + \lambda_*}{\alpha - 1}, \quad (4.41)$$

con lo que, para un valor dado de  $\omega$ , se obtiene la ecuación

$$\lambda_* = (1 - \alpha)(4 + \omega^2) - \alpha. \quad (4.42)$$

Esta ecuación indica que si  $\lambda > \lambda_*$  el estado del entorno salta de una fase a otra. Es decir, si  $\lambda < \lambda_*$  el entorno se encuentra en la fase no simétrica, para  $\lambda > \lambda_*$  se encuentra en la fase simétrica y en  $\lambda = \lambda_*$  se produce la QPT para el estado fundamental. El principal objetivo del presente capítulo es mostrar que, en lugar de la QPT para el estado fundamental, lo que provoca un mayor impacto en el proceso de la decoherencia es la presencia de una ESQPT en el entorno.

Es evidente que el acoplamiento de un qubit externo aporta energía al entorno siempre y cuando  $\lambda > 0$ . Este aporte puede llevarle a la energía crítica del estado excitado y para realizar una estimación de la magnitud del acoplo  $\lambda_c$  que lleva al entorno a dicha energía, suponemos que partimos del estado fundamental del hamiltoniano  $\hat{H}_0$  para un determinado valor de  $\alpha$ , y conectamos entonces el qubit. Haciendo uso entonces del estado coherente (4.11) se puede obtener directamente esta energía transferida al entorno, la cual viene dada por

$$\Delta E(N, \beta, \lambda) = \langle N, \beta | \lambda \hat{n}_t | N, \beta \rangle = \lambda N \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}. \quad (4.43)$$

Por tanto, el acoplamiento crítico  $\lambda_c$  que hace que el entorno posea la energía crítica  $E_c$  es

$$E(N, \beta) + \Delta E(N, \beta, \lambda_c) = E_c. \quad (4.44)$$

Así, definimos el acoplo crítico como aquél que lleva al entorno a la energía crítica según (4.44). Esta expresión es válida tanto para la energía crítica

$E_c^{(1)}$  de la transición de primer orden como para la energía crítica  $E_c^{(2)}$  de la transición de segundo orden. Pero en general, la ecuación (4.44) es una ecuación trascendente, es decir, no se puede despejar el parámetro  $\lambda_c$  y entonces,  $\lambda_c^{(1)}$  y  $\lambda_c^{(2)}$ , asociados a  $E_c^{(1)}$  y  $E_c^{(2)}$  respectivamente, se deben calcular numéricamente.

Señalar finalmente que la energía del sistema en realidad estará distribuida alrededor del valor de  $E_c$  (con una forma presumiblemente Gaussiana, si bien en el capítulo 5 se estudiará esto en más detalle en modelos de Óptica Cuántica). Esto conlleva que, al menos para un sistema finito, puedan observarse comportamientos anómalos en la distribución de energía para acoplos alrededor de  $\lambda_c$ , cuando, debido a la anchura finita de la distribución de energías, el entorno ya se percata de que hay un fenómeno crítico.

## 4.2. Cálculo de la decoherencia

Recordemos que estamos interesados en estudiar las propiedades del qubit que se ha conectado al entorno, para lo cual resolvemos el sistema completo mediante la ecuación de Schrödinger y trazamos, después, los grados de libertad del entorno. De este modo podemos analizar el fenómeno de decoherencia que experimenta el qubit y cómo éste se ve afectado por la presencia de una QPT o una ESQPT en el entorno.

Si se supone que el estado inicial del sistema completo (qubit+entorno) viene descrito por

$$|\psi_{S\mathcal{E}}(0)\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle)|\mathcal{E}(0)\rangle, \quad (4.45)$$

en el que se han incluido todos los grados internos de libertad del sistema bosónico en el estado  $|\mathcal{E}(0)\rangle$ . El cálculo de la matriz densidad reducida es relativamente simple. En efecto, puesto que por definición

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_{\mathcal{E}}|\psi_{S\mathcal{E}}(t)\rangle\langle\psi_{S\mathcal{E}}(t)|, \quad (4.46)$$

es necesario aplicar el operador evolución  $e^{-i\hat{H}_j t}$  al estado inicial (4.45), donde  $\hat{H}_j$  ( $j = 0, 1$ ) es el hamiltoniano efectivo dado por (4.39) ó (4.40). Teniendo en cuenta que  $e^{-i\hat{H}_j t}|0\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t}|0\rangle$  y que  $e^{-i\hat{H}_j t}|1\rangle = e^{-i\hat{H}_1 t}|1\rangle$ , entonces

$$|\psi_{\mathcal{S}\mathcal{E}}(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_j t}|\psi_{\mathcal{S}\mathcal{E}}(0)\rangle = ae^{-i\hat{H}_0 t}|0\rangle|\mathcal{E}(0)\rangle + be^{-i\hat{H}_1 t}|1\rangle|\mathcal{E}(0)\rangle. \quad (4.47)$$

Está claro que el hamiltoniano efectivo actúa sobre los estados del espacio de Hilbert del entorno. El estado en el que se encuentra el qubit únicamente cambia la naturaleza del hamiltoniano. A partir de estas consideraciones, el cálculo de la matriz densidad reducida del sistema es directo, resultando que

$$\begin{aligned} \rho_{\mathcal{S}}(t) &= \text{Tr}_{\mathcal{E}}|\psi_{\mathcal{S}\mathcal{E}}(t)\rangle\langle\psi_{\mathcal{S}\mathcal{E}}(t)| \\ &= |a|^2|0\rangle\langle 0| + ab^*r(t)|0\rangle\langle 1| + a^*br^*(t)|1\rangle\langle 0| + |b|^2|1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Se observa que los términos no diagonales de la expresión (4.48) están modulados por el factor de decoherencia  $r(t)$  que no es más que el solapamiento entre dos estados del entorno evolucionando el estado inicial  $|\mathcal{E}(0)\rangle$  con dos hamiltonianos diferentes,

$$r(t) = \frac{\langle\mathcal{E}(0)|e^{i\hat{H}_0 t}e^{-i\hat{H}_1 t}|\mathcal{E}(0)\rangle}{\langle\mathcal{E}(0)|\mathcal{E}(0)\rangle}. \quad (4.49)$$

Esta expresión es la misma que para el eco de Loschmidt [100] o la fidelidad [110], y contiene toda la información relevante acerca del proceso de la decoherencia. Además representa la probabilidad de que el sistema vuelva a su estado inicial al cabo de un tiempo  $t$ . Resaltar que de esta manera se obtiene una descripción de la decoherencia que sufre el qubit mediante un análisis intrínseco del entorno, de modo que las propiedades de éste determinan el proceso de decoherencia. Finalmente, destacar que lo importante es  $|r(t)|^2$ , que es lo que determina la amplitud de los términos no diagonales de la matriz densidad y otras magnitudes asociadas, como la entropía lineal  $\text{Tr}\rho^2$ , que determina si el estado es puro ( $\text{Tr}\rho^2 = 1$ ) o mezcla

( $\text{Tr}\rho^2 < 1$ ).

Si el entorno está inicialmente en su estado fundamental  $|g_0\rangle$  de  $\hat{H}_0$ , entonces el factor de decoherencia será el mismo que (4.49) salvo por un factor de fase irrelevante,

$$r(t) = \frac{\langle g_0 | e^{-i\hat{H}_1 t} | g_0 \rangle}{\langle g_0 | g_0 \rangle}. \quad (4.50)$$

La expresión que se obtiene para el factor de decoherencia no se puede usar directamente porque en general  $|g_0\rangle$  no es autoestado del hamiltoniano  $\hat{H}_1$ . Para poder realizar cálculos se tienen dos opciones: o bien se resuelve numéricamente, es decir, se resuelve exactamente, lo cual es posible porque el modelo de Lipkin es un modelo exactamente soluble, o bien se realizan diversas aproximaciones sobre el estado  $|g_0\rangle$  y se resuelve analíticamente. Obviamente los dos tipos de cálculos descritos deben de dar resultados similares.

En las siguientes subsecciones se proporcionan diferentes métodos para calcular (4.50): un método basado en la aproximación más allá de campo medio realizada en el capítulo anterior, otro método en el marco de campo medio basado en el uso de la TDA considerando tanto excitaciones una partícula-un hueco y excitaciones a dos partículas-dos huecos. Aunque en primer lugar se va a presentar una base en la que se diagonaliza exactamente el hamiltoniano de Lipkin y que permite obtener un cálculo exacto del factor de decoherencia.

### 4.2.1. Cálculo exacto de la decoherencia

Ya se mencionó que una de las múltiples ventajas que presentaba el modelo de Lipkin para nuestros propósitos era que se trataba de un modelo exactamente soluble. Esto quiere decir que podemos encontrar una base completa de autoestados del hamiltoniano. Para estudiar los autoestados de dicho hamiltoniano, al igual que en el capítulo anterior al estudiar el modelo vibrónico, se introduce el álgebra no compacta  $SU(1,1)$  de operadores de pares de bosones [68, 69]. Los generadores del citado álgebra son

$$\hat{K}_s^+ = \frac{1}{2}s^\dagger s^\dagger = (\hat{K}_s^-)^\dagger, \quad (4.51)$$

$$\hat{K}_s^0 = \frac{1}{2}\hat{n}_s + \frac{1}{4}, \quad (4.52)$$

$$\hat{K}_t^+ = \frac{1}{2}t^\dagger t^\dagger = (\hat{K}_t^-)^\dagger, \quad (4.53)$$

$$\hat{K}_t^0 = \frac{1}{2}\hat{n}_t + \frac{1}{4}. \quad (4.54)$$

Estos tres tipos de operadores satisfacen las habituales relaciones de conmutación del álgebra  $SU(1,1)$  (para un mayor detalle véase el capítulo 3).

Consecuentemente, el hamiltoniano (4.40) se puede expresar en términos de los operadores  $K$ ,

$$\hat{H}_1 = (\alpha + \lambda)\hat{n}_t - \frac{1 - \alpha}{N}(4\hat{K}_s^+ \hat{K}_t^- + 4\hat{K}_t^+ \hat{K}_s^- + \hat{n}_s + \hat{n}_t + 2\hat{n}_s \hat{n}_t). \quad (4.55)$$

Para calcular los autovalores de (4.55) se diagonaliza el hamiltoniano en una base análoga a la usada para diagonalizar exactamente el hamiltoniano del modelo vibrónico,

$$|\tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t\rangle = \frac{1}{\sqrt{C_{s,\nu_s}^{\tilde{n}_s} C_{t,\nu_t}^{\tilde{n}_t}}} (\hat{K}_s^+)^{\tilde{n}_s} (\hat{K}_t^+)^{\tilde{n}_t} |\nu_s; \nu_t\rangle. \quad (4.56)$$

La constante de normalización viene dada por

$$C_{\rho,\nu_\rho}^{\tilde{n}_\rho} = \langle \tilde{n}_\rho, \nu_\rho | \tilde{n}_\rho, \nu_\rho \rangle = \frac{\tilde{n}_\rho! (2\tilde{n}_\rho + 2\nu_\rho - 1)!!}{2^{\tilde{n}_\rho} (2\nu_\rho - 1)!!}, \quad (4.57)$$

siendo  $\rho = s$  ó  $\rho = t$ .

Los elementos necesarios para la diagonalización de este hamiltoniano son,

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t | \hat{n}_s | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t \rangle = 2\tilde{n}_s + \nu_s, \quad (4.58)$$

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t | \hat{n}_t | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t \rangle = 2\tilde{n}_t + \nu_t, \quad (4.59)$$

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t | \hat{K}_s^+ \hat{K}_s^- | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t \rangle = \tilde{n}_s \left( \tilde{n}_s + \nu_s - \frac{1}{2} \right), \quad (4.60)$$

$$\langle \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t | \hat{K}_t^+ \hat{K}_t^- | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t \rangle = \tilde{n}_t \left( \tilde{n}_t + \nu_t - \frac{1}{2} \right), \quad (4.61)$$

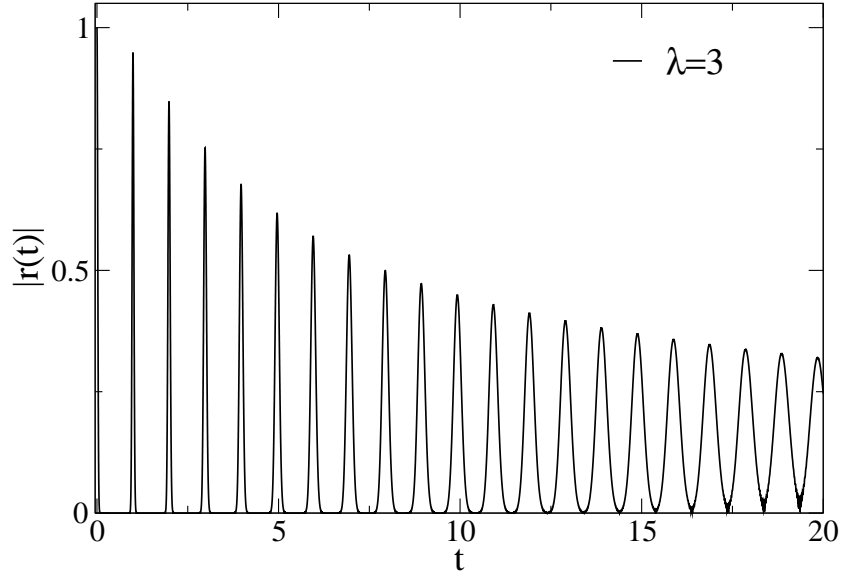
$$\begin{aligned} \langle (\tilde{n}_s - 1), \nu_s; (\tilde{n}_t + 1), \nu_t | \hat{K}_t^+ \hat{K}_s^- | \tilde{n}_s, \nu_s; \tilde{n}_t, \nu_t \rangle = \\ \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{n}_s(\tilde{n}_t + 1)(2\tilde{n}_s + 2\nu_s - 1)(2\tilde{n}_t + 2\nu_t + 1)}. \end{aligned} \quad (4.62)$$

Al igual que se tenía para el modelo vibrónico, dentro de cada subespacio el hamiltoniano es tridiagonal pudiéndose diagonalizar fácilmente para valores grandes de  $N$ . Éste es el algoritmo que se implementa en un programa para obtener los resultados numéricos de la decoherencia.

Para tener una idea de cómo se comporta el factor de decoherencia se presenta la figura 4.5. Para este cálculo el entorno tiene un tamaño de  $N = 1000$  partículas y se han fijado los parámetros  $\alpha = 0,5$ ,  $\omega = 0$  y  $\lambda = 3$ . El comportamiento que se observa, oscilante casi periódico y que decae en el tiempo, es general para otros valores de los parámetros y tamaño del sistema. Un análisis detallado de la decoherencia  $|r(t)|$  se realizará en la sección de resultados.

### 4.2.2. Cálculo de la decoherencia en la aproximación más allá de campo medio

Como se acaba de mencionar, el estado  $|g_0\rangle$  no es en general autoestado de  $\hat{H}_1$ , por tanto para calcular  $r(t)$  de manera analítica es necesario diagonalizar  $\hat{H}_1$  en una base apropiada y expresar  $|g_0\rangle$  como combinación lineal de los autoestados de  $\hat{H}_1$ . Como no se tiene una expresión analítica para los autoestados de  $\hat{H}_1$ , el desarrollo que se propone de  $|g_0\rangle$  en autoestados de  $\hat{H}_1$  se realiza en el marco de la aproximación de más allá de campo medio,



**Figura 4.5:**  $|r(t)|$  para un sistema donde  $N = 1000$ ,  $\alpha = 0,5$ ,  $\omega = 0$  y  $\lambda = 3$ .

donde sí conocemos los autoestados,

$$|g_0\rangle = f(d'^{\dagger})|g_1\rangle, \quad (4.63)$$

siendo  $|g_1\rangle$  el estado fundamental de  $\hat{H}_1$  y con

$$f(d'^{\dagger}) = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n (d'^{\dagger})^n,$$

donde se han incluido los operadores de la transformación de Bogoliubov del Hamiltoniano  $\hat{H}_1$ ,  $d'^{\dagger}$  y  $d'$ . Así mismo, vamos a llamar  $d^{\dagger}$  y  $d$  a los operadores de la transformación de Bogoliubov para  $\hat{H}_0$ . Ambos tipos de operadores están relacionados mediante la siguiente transformación:

$$d^{\dagger} = X d'^{\dagger} - Y d' + \delta, \quad (4.64)$$

$$d = X d' - Y d'^{\dagger} + \delta, \quad (4.65)$$

siendo:



$$X = u_0 u_1 - v_0 v_1, \quad (4.66)$$

$$Y = v_0 u_1 - u_0 v_1, \quad (4.67)$$

$$\delta = (u_0 - v_0) \sqrt{N} (\lambda_{e1} - \lambda_{e0}). \quad (4.68)$$

$u_j$  y  $v_j$  son los coeficientes de la transformación de Bogoliubov en el Hamiltoniano efectivo  $\hat{H}_j$ , y  $\lambda_{ej}$  es el parámetro que minimiza  $\hat{H}_{0j}$  (ver la ecuación (4.25)).

Además se verifica que los estados fundamentales  $|g_0\rangle$  y  $|g_1\rangle$  de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$  son los estados de vacío también de los operadores destrucción  $d$  y  $d'$  respectivamente, es decir:

$$d|g_0\rangle = d'|g_1\rangle = 0. \quad (4.69)$$

Con la condición (4.69) se puede obtener una expresión que determine los coeficientes  $\gamma_n$  de la transformación (4.63) obteniéndose una relación de recurrencia para dichos coeficientes,

$$\gamma_1 = -\frac{\delta}{X} \gamma_0, \quad (4.70)$$

$$\gamma_n = \frac{Y \gamma_{n-2} - \delta \gamma_{n-1}}{Xn} \quad \text{para } n \geq 2. \quad (4.71)$$

Así pues, se obtienen todos los coeficientes  $\gamma_n$  en función de  $\gamma_0$ . Por comodidad se puede tomar  $\gamma_0 = 1$  y posteriormente normalizar el estado  $|g_0\rangle$ . Tras un poco de álgebra básica se puede obtener una expresión general para el coeficiente  $\gamma_n$  si  $n \geq 2$ ,

$$\begin{aligned}
\gamma_n = & \frac{2^{-(n+2)} \left( 4 \left( -\frac{\delta}{X_n} + \sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2} \right)^n - 2^n \left( -\frac{\delta}{X_n} - \sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2} \right)^n \right)}{\sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2}} \gamma_1 \\
& + \frac{\left( -\frac{\delta}{X_n} - \sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2} \right)^n \left( -\frac{\delta}{X_n} + \sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2} \right)}{8\sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2}} \gamma_0 \\
& + \frac{2^{-(n+2)} \left( -\frac{\delta}{X_n} + \sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2} \right)^n \left( \frac{\delta}{X_n} + \sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2} \right)}{8\sqrt{4\frac{Y}{X_n} + \left(\frac{\delta}{X_n}\right)^2}} \gamma_0. \quad (4.72)
\end{aligned}$$

Bajo estas consideraciones el factor de decoherencia resulta ser:

$$r(t) = \frac{\sum_n |\gamma_n|^2 n! e^{-iW_1 t n}}{\sum_m |\gamma_m|^2 m!}, \quad (4.73)$$

donde  $W_1$  representa el gap de energía para los bosones  $d'$ , calculado mediante una transformación de Holstein-Primakoff, una transformación de desplazamiento (shift) y una transformación de Bogoliubov. De forma análoga a cómo se calculó  $W_0$  en el apartado anterior,

$$\begin{aligned}
W_1 = W_0 + & \frac{\lambda[6\alpha - 4 + \lambda + 16(\alpha - 1)\omega\beta_{e1} + (24 - 8\omega^2 + \alpha(8 - 22\omega^2) + \lambda)\beta_{e1}^2]}{(1 + \beta_{e1}^2)} \\
& + \frac{\lambda[-16(\alpha - 1)\omega\beta_{e1}^3 - 2(\alpha - 1)\omega\beta_{e1}^5]}{(1 + \beta_{e1}^2)}. \quad (4.74)
\end{aligned}$$

A partir del factor de decoherencia se calcula la decoherencia propiamente dicha como  $|r(t)|^2$ .

Como se puede observar en la expresión (4.73), la decoherencia depende de los coeficientes  $\gamma_n = \gamma_n(\alpha, \omega, \beta_1)$ , al igual que de  $W_1 = W_1(\alpha, \omega, \lambda, \beta_1)$ . Así pues, para calcularla simplemente hay que establecer un punto  $(\alpha, \omega)$  y tomar un valor determinado para la fuerza de acoplo  $\lambda$  entre el sistema y el ambiente. Posteriormente se calcula el  $\beta_{ej}$  de equilibrio para los dos Hamiltonianos  $\hat{H}_0$

y  $\hat{H}_1$ , lo que proporciona  $\beta_{e0}$  y  $\beta_{e1}$ ; y aunque en principio los sumatorios que aparecen en la expresión (4.73) contienen infinitos términos, se comprueba que cada coeficiente  $|\gamma_m|$  se hace cada vez más pequeño en un término aproximadamente del orden de  $10^{-m}$ , de modo que para  $m = 10$  podemos cortar el sumatorio sin cometer en dicho proceso demasiado error.

Hasta aquí se ha desarrollado una técnica para calcular la decoherencia usando las herramientas matemáticas que nos permiten ir más allá de campo medio. A continuación se ofrecen dos técnicas adicionales para realizar el mismo cálculo y finalmente se compararán con el cálculo que se obtiene de resolver el problema exactamente.

### 4.2.3. Cálculo de la decoherencia en el marco del campo medio usando la TDA

#### 4.2.3.1. La base

En la sección anterior ya se introdujo el condensado bosónico como herramienta básica que describe el estado fundamental del modelo de Lipkin. Por claridad, lo recordamos de nuevo

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\Gamma_g^\dagger)^N |0\rangle, \quad (4.75)$$

con

$$\Gamma_g^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta^2}} (s^\dagger + \beta t^\dagger). \quad (4.76)$$

Este condensado bosónico  $\Gamma_g^\dagger$  se puede considerar como la primera componente de una nueva base de bosones, conocidos como bosones deformados o intrínsecos [111, 112]. Estos bosones deformados están relacionados con los bosones esféricos (sistema laboratorio) mediante una transformación unitaria  $\eta$  de Hartree-Bose,

$$\Gamma_p^\dagger = \sum_{lm} \eta_{lm}^p \gamma_{lm}^\dagger, \quad \gamma_{lm}^\dagger = \sum_p \eta_{lm}^{p*} \Gamma_p^\dagger, \quad (4.77)$$

en donde los parámetros de deformación  $\eta_{lm}^p$  verifican las condiciones de ortonormalización,

$$\sum_{lm} \eta_{lm}^{p'*} \eta_{lm}^p = \delta_{pp'}, \quad \sum_p \eta_{lm}^{p'*} \eta_{l'm'}^p = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (4.78)$$

Se ha considerado que, en general, los bosones se pueden etiquetar con los números cuánticos  $l, m$ . La suma en  $l$  debe ser entendida para cada uno de los dos niveles de que consta el modelo. Como para el modelo de Lipkin se sabe que  $l = 0$  las expresiones anteriores se simplifican bastante ya que en cada nivel únicamente tendremos un tipo de bosón. Así pues se tendrían únicamente dos coeficientes  $\eta^p$ , a saber,  $\eta_{00\downarrow}^p$  para el nivel inferior y  $\eta_{00\uparrow}^p$  para el nivel superior, que en general no serán iguales. Para evitar una posible confusión debido a esta notación se denotará por  $\eta_{l_0}^p$  al correspondiente  $\eta_{00\uparrow}^p$  del nivel superior y  $\eta_{l_0}^p$  para el nivel inferior. El índice  $p$  etiqueta los diferentes bosones deformados, que en este caso serán sólo dos. A partir de la minimización de la energía del estado fundamental se obtienen los parámetros  $\eta$  para  $p = g$ . El resto de parámetros  $\eta$  para los bosones excitados se obtendrían usando la condición de ortogonalidad (4.78).

Una vez que se ha definido la nueva base de bosones, se puede construir una base para estados excitados considerando excitaciones intrínsecas sobre el estado fundamental, es decir, reemplazando un bosón  $g$  por otro excitado, dos bosones  $g$  por dos excitados y así sucesivamente. En este estudio únicamente se considerarán excitaciones hasta dos partículas,

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} \Gamma_p^\dagger (\Gamma_g)^{N-1} |0\rangle, \quad (4.79)$$

$$|pp'\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{p,p'}}} \frac{1}{\sqrt{(N-2)!}} \Gamma_p^\dagger \Gamma_{p'}^\dagger (\Gamma_g)^{N-2} |0\rangle, \quad (4.80)$$

donde  $p, p' \neq g$ .

Usando la citada base es posible construir un hamiltoniano diagonal en términos de los nuevos bosones. En este punto se distinguirán dos casos posibles:

1. Un hamiltoniano en el que sólo se incluyen términos hasta una sólo excitación partícula-hueco (esto es la TDA estrictamente).
2. Un hamiltoniano en el que se incluyen excitaciones hasta segundo orden, esto es considerar excitaciones del tipo dos partículas-dos huecos.

Para el primer caso el hamiltoniano toma la expresión,

$$\hat{H} = \langle g|\hat{H}|g\rangle + \left(\langle p|\hat{H}|p\rangle - \langle g|\hat{H}|g\rangle\right) \Gamma_p^\dagger \Gamma_p = E_0 + \Delta_p \Gamma_p^\dagger \Gamma_p. \quad (4.81)$$

Para el segundo caso el hamiltoniano toma la expresión,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \langle g|\hat{H}|g\rangle + \left(\langle p|\hat{H}|p\rangle - \langle g|\hat{H}|g\rangle\right) \Gamma_p^\dagger \Gamma_p \\ &+ \left(\frac{\langle p^2|\hat{H}|p^2\rangle}{2} - \langle p|\hat{H}|p\rangle + \frac{\langle g|\hat{H}|g\rangle}{2}\right) \Gamma_p^\dagger \Gamma_p^\dagger \Gamma_p \Gamma_p \\ &= E_0 + \Delta_p \Gamma_p^\dagger \Gamma_p + \Omega_p \Gamma_p^\dagger \Gamma_p^\dagger \Gamma_p \Gamma_p, \end{aligned}$$

donde  $E_0 = \langle g|\hat{H}|g\rangle$ ,  $\Delta_p = \left(\langle p|\hat{H}|p\rangle - \langle g|\hat{H}|g\rangle\right)$ , y  $\Omega_p = \frac{\langle p^2|\hat{H}|p^2\rangle}{2} - \langle p|\hat{H}|p\rangle + \frac{\langle g|\hat{H}|g\rangle}{2}$ .

#### 4.2.3.2. Cálculo del factor decoherencia $r(t)$

Para calcular el factor decoherencia (4.50) es necesario tener una transformación entre el estado fundamental de  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_1$ . Para tal propósito se introducen los bosones deformados de  $\hat{H}_1$ ,  $\Lambda_p$ ,

$$\Lambda_p^\dagger = \sum_{lm} \xi_{lm}^p \gamma_{lm}^\dagger, \quad \gamma_{lm}^\dagger = \sum_p \xi_{lm}^{p*} \Lambda_p^\dagger. \quad (4.82)$$

La relación entre los bosones deformados de  $\hat{H}_0$ ,  $\Gamma_p$ , y los bosones deformados de  $\hat{H}_1$ ,  $\Lambda_p$ , viene dada por,

$$\Lambda_p^\dagger = \sum_{lmp'} \xi_{lm}^p \eta_{lm}^{p'*} \Gamma_{p'}^\dagger = \sum_{p'} f_{p'p}^* \Gamma_{p'}^\dagger, \quad (4.83)$$

$$\Gamma_p^\dagger = \sum_{lmp'} \eta_{lm}^p \xi_{lm}^{p'*} \Lambda_{p'}^\dagger = \sum_{p'} f_{pp'} \Lambda_{p'}^\dagger, \quad (4.84)$$

siendo  $\xi$  los parámetros de deformación del hamiltoniano  $\hat{H}_1$ .

Como  $\hat{H}_1|g_1\rangle = E_1|g_1\rangle$ , es posible expresar el estado  $|g_0\rangle$  en términos del estado  $|g_1\rangle$ ,

$$|g_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \sum_p f_{gp} \Lambda_p^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (4.85)$$

En el caso particular del modelo de Lipkin,  $p = g$  que es el caso esférico ó  $p = \beta$  que es el caso deformado, de modo que la ecuación (4.85) toma la forma,

$$|g_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( f_{gg} \Lambda_g^\dagger + f_{g\beta} \Lambda_\beta^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (4.86)$$

Las expresiones de los parámetros de deformación son:

$$\begin{aligned} \eta_{00}^g &= \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}}, & \eta_{10}^g &= \frac{\beta}{\sqrt{1+\beta^2}}, \\ \eta_{00}^\beta &= \frac{-\beta}{\sqrt{1+\beta^2}}, & \eta_{10}^\beta &= \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}}. \end{aligned} \quad (4.87)$$

Recordemos que el parámetro  $\beta$  se anula en la fase simétrica (esférica), mientras que es diferente de cero en la fase no simétrica (deformada). En lo que sigue se denotará con  $\beta_0$  al parámetro de  $\hat{H}_0$  y con  $\beta_1$  al parámetro de  $\hat{H}_1$ . Así pues, teniendo en cuenta (4.83) y las relaciones (4.82) se tiene que los coeficientes  $f_{gg}$  y  $f_{g\beta}$  toman la siguiente forma,

$$f_{gg} = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta_0^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \beta_1^2}} (1 + \beta_0 \beta_1), \quad (4.88)$$

$$f_{g\beta} = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta_0^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \beta_1^2}} (\beta_0 - \beta_1). \quad (4.89)$$

Desarrollando el binomio de la expresión (4.86),

$$|g_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} f_{gg}^{N-k} f_{g\beta}^k (\Lambda_g)^{N-k} (\Lambda_\beta^\dagger)^k |0\rangle, \quad (4.90)$$

se puede calcular fácilmente el factor decoherencia obteniéndose que,

$$r(t) = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} f_{gg}^{2(N-k)} f_{g\beta}^{2k} e^{-iE_1 t} = \sum_{k=0}^N \alpha_k e^{-iE_1 t}, \quad (4.91)$$

siendo  $\alpha_k = \binom{N}{k} f_{gg}^{2(N-k)} f_{g\beta}^{2k}$ . La expresión de  $E_1$  dependerá de la aproximación que se haga, de modo que si se hace uso estrictamente de la TDA (4.81),

$$E_1 = E_0 + \Delta_{\beta_1} k, \quad (4.92)$$

pero si se realiza una TDA considerando términos del tipo dos partículas-dos huecos (4.82), entonces

$$E_1 = E_0 + \Delta_{\beta_1} k + \Omega_{\beta_1} k(k-1). \quad (4.93)$$

Si nos centramos en la aproximación de la TDA a una excitación partícula-hueco, ya se mencionó que  $E_1$  vendrá dado por (4.92), y por consiguiente el factor decoherencia  $r(t)$  adopta una forma más compacta con la siguiente transformación,

$$e^{-i\Delta_{\beta_1} t k} = e^{-i(\Delta_{\beta_1}/2)tN} \cdot e^{i(\Delta_{\beta_1}/2)t(N-k)} \cdot e^{-i(\Delta_{\beta_1}/2)t k}, \quad (4.94)$$

con lo que finalmente se obtiene

$$r(t) = e^{-i(\Delta_{\beta_1}/2)tN} \left( f_{gg}^2 e^{i(\Delta_{\beta_1}/2)t} + f_{g\beta}^2 e^{-i(\Delta_{\beta_1}/2)t} \right)^N. \quad (4.95)$$

Un primer análisis revela que el factor de decoherencia  $r(t)$  (4.95) no proporciona una buena aproximación a los resultados exactos que veremos en la sección siguiente. El módulo de  $r(t)$  es

$$\begin{aligned} |r(t)| &= \left| (f_{gg}^2) e^{i(\Delta_{\beta_1}/2)t} + (f_{g\beta}^2) e^{-i(\Delta_{\beta_1}/2)t} \right|^N = |f_{g\beta}|^{2N} \left| \left( \frac{f_{gg}}{f_{g\beta}} \right)^2 + e^{i\Delta_{\beta_1}t} \right|^N \\ &= (f_{g\beta})^{2N} \left( 1 + \left( \frac{f_{gg}}{f_{g\beta}} \right)^4 + 2 \left( \frac{f_{gg}}{f_{g\beta}} \right)^2 \cos(\Delta_{\beta_1}t) \right)^N. \end{aligned} \quad (4.96)$$

Esta expresión es simplemente una función oscilante con una única frecuencia  $\Delta_{\beta_1}$  y, por tanto, no va a reproducir el decaimiento en el tiempo del módulo del factor de decoherencia que se ha observado en la figura 4.5. Esto lleva a concluir que la aproximación TDA a una excitación partícula-hueco no es suficiente para describir el decaimiento de la envolvente del módulo del factor de decoherencia y, por ello, manteniendo la misma idea, se deben incluir las anarmonicidades que proporcionan las excitaciones a dos partículas-huecos. Esta es la razón por la cual también se construyeron paralelamente los estados de dos excitaciones.

Finalmente, para calcular  $r(t)$ , lo más conveniente es expresar el hamiltoniano de Lipkin (4.40) en orden normal

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= (a + c + f)t^\dagger t + b(t^\dagger s + s^\dagger t) + ct^\dagger s^\dagger st + d(t^\dagger t^\dagger ss + s^\dagger s^\dagger tt) \\ &\quad + e(t^\dagger t^\dagger st + t^\dagger s^\dagger tt) + ft^\dagger t^\dagger tt, \end{aligned} \quad (4.97)$$

donde los coeficientes  $a, b, c, d, e, f$  vienen dados por,



$$a = \alpha + \lambda - 2\frac{\omega - 1}{N}, \quad (4.98)$$

$$b = \omega\frac{\alpha - 1}{N}, \quad (4.99)$$

$$c = 2\frac{\alpha - 1}{N}, \quad (4.100)$$

$$d = \frac{\alpha - 1}{N}, \quad (4.101)$$

$$e = 2\omega\frac{\alpha - 1}{N}, \quad (4.102)$$

$$f = \omega^2\frac{\alpha - 1}{N}. \quad (4.103)$$

Los elementos de matriz necesarios para el cálculo son los siguientes:

$$\begin{aligned} \langle g_1 | \hat{H}_1 | g_1 \rangle = & (a + c + f) \frac{\beta_1^2}{1 + \beta_1^2} N + 2b \frac{\beta_1}{1 + \beta_1^2} N \\ & \frac{N(N-1)}{(1 + \beta_1^2)^2} [(c + 2d)\beta_1^2 + 2e\beta_1^3 + f\beta_1^4], \end{aligned} \quad (4.104)$$

$$\begin{aligned} \langle \beta_1 | \hat{H}_1 | \beta_1 \rangle = & (a + c + f - 2b\beta_1) \frac{1}{1 + \beta_1^2} + c \left( \frac{1 - \beta_1^2}{1 + \beta_1^2} \right)^2 (N-1) \\ & \frac{4(N-1)}{(1 + \beta_1^2)^2} [f\beta_1^2 - 2d\beta_1^2 + e(\beta_1 - \beta_1^3)] \\ & (a + c + f) \frac{\beta_1^2}{1 + \beta_1^2} (N-1) + 2b \frac{\beta_1}{1 + \beta_1^2} (N-1) \\ & + \frac{(N-1)(N-2)}{(1 + \beta_1^2)^2} [(c + 2d)\beta_1^2 + 2e\beta_1^3 + f\beta_1^4], \end{aligned} \quad (4.105)$$

$$\begin{aligned}
\langle \beta_1^2 | \hat{H}_1 | \beta_1^2 \rangle &= \frac{1}{(1 + \beta_1^2)^2} [(2c + 4d)\beta_1^2 + 4e\beta_1^3 + 2f\beta_1^4] \\
&\quad - \frac{2}{1 + \beta_1^2} (a + c + f - 2b\beta_1) + 2c \left( \frac{1 - \beta_1^2}{1 + \beta_1^2} \right)^2 (N - 2) \\
&\quad + \frac{8(N - 2)}{(1 + \beta_1^2)^2} [f\beta_1^2 - 2d\beta_1^2 + e(\beta_1 - \beta_1^3)] \tag{4.106} \\
&\quad (a + c + f) \frac{\beta_1^2}{1 + \beta_1^2} (N - 2) + 2b \frac{\beta_1}{1 + \beta_1^2} (N - 2) \\
&\quad + \frac{(N - 2)(N - 3)}{(1 + \beta_1^2)^2} [(c + 2d)\beta_1^2 + 2e\beta_1^3 + f\beta_1^4].
\end{aligned}$$

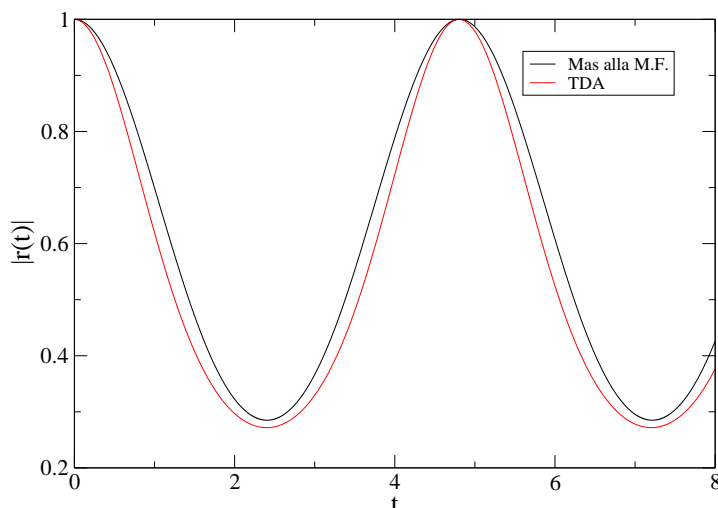
Señalar que en el hamiltoniano (4.97) aparece un término adicional  $\Delta = \alpha - 1$  que se puede despreciar ya que sólo contribuye en un factor de fase en el cálculo de la decoherencia.

En la siguiente sección se compararán las expresiones analíticas obtenidas para  $|r(t)|$  usando los métodos citados anteriormente con los resultados que se obtienen de resolver el hamiltoniano exactamente con una base apropiada.

### 4.3. Resultados

En esta sección se presentan los principales resultados de la evolución del sistema descrito por la ecuación (4.9) bajo la influencia del entorno dado por (4.10). Se analizará aquí la relación entre la decoherencia en el qubit y la transición de fase cuántica de estados excitados en el entorno. Además, se compararán los resultados numéricos (resultados de resolver exactamente el hamiltoniano) con las aproximaciones Hartree-Bose-Bogoliubov, TDA y TDA a segundo orden tanto en el caso  $\omega = 0$  como  $\omega \neq 0$ . Como casos paradigmáticos, el estudio se centrará en los casos  $\alpha = 1/2$ ,  $\omega = 0$  y  $\alpha = 1/2$ ,  $\omega = 1/\sqrt{2}$ . Diferentes elecciones para los parámetros de control del modelo proporcionan cualitativamente los mismos resultados. No hay pérdida pues de generalidad en los resultados obtenidos si se toman diferentes parámetros de control del modelo porque producen cualitativamente los mismos resultados.

La única diferencia importante reside en la distinción entre  $\omega = 0$  y  $\omega \neq 0$ . Obviamente  $\alpha$  debe ser  $\alpha < \alpha_c$  para así poder estudiar cómo la interacción con el qubit hace que el entorno cambie de fase.



**Figura 4.6:** Comparación de  $|r(t)|$  para las técnicas Hartree-Bose-Bogoliubov y para la TDA. Ambas ofrecen aproximadamente el mismo resultado. Los cálculos se han realizado para  $N = 100$ ,  $\alpha = 0,5$ ,  $\omega = 1/\sqrt{2}$  y  $\lambda = 0,2$ .

Toda la información sobre el proceso de la decoherencia que induce el entorno (4.10) en el qubit está codificada en el factor decoherencia (4.50). En primer lugar, si se compara el factor decoherencia que se obtiene al estudiar el sistema con las aproximaciones Hartree-Bose-Bogoliubov y TDA a primer orden, se observa que no se produce decaimiento alguno. Claramente estas dos aproximaciones no son buenas para describir dicho fenómeno. Es más, este hecho ya se anticipó en particular cuando se estudió la aproximación TDA a primer orden debido a que el factor decoherencia que se obtiene únicamente depende del gap del sistema, lo que proporciona una única frecuencia de oscilación. Lo mismo ocurre con la aproximación de Hartree-Bose-Bogoliubov; el factor de decoherencia viene expresado como una suma de en principio infinitos términos (4.73), todos ellos proporcionales al gap del sistema o múltiplos de ese gap y cada coeficiente de proporcionalidad

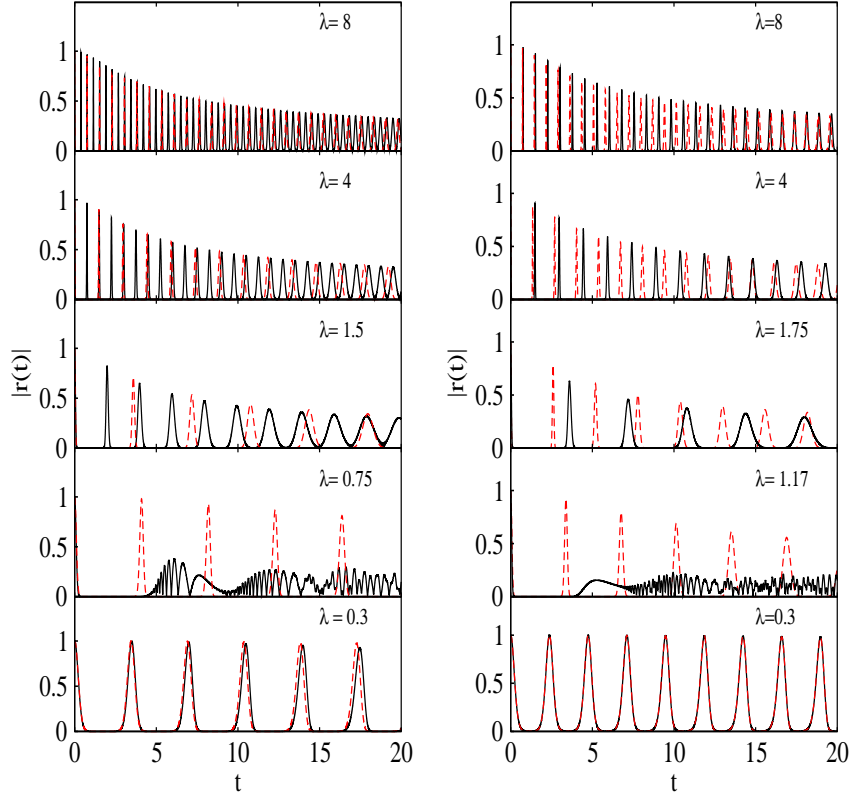
$\gamma_n$  tienden a cero conforme se va aumentando  $n$ . En la figura 4.6 se tiene precisamente una función armónica oscilando con una única frecuencia para las dos aproximaciones realizadas. Para poder describir adecuadamente el fenómeno de la decoherencia se necesitan por tanto incluir anarmonicidades en los cálculos. Por este motivo recordemos que se realizó la TDA a segundo orden.

### 4.3.1. Factor de decoherencia para la ESQPT continua

Ya se vió que el hamiltoniano de Lipkin presenta siempre una ESQPT continua del tipo  $\lambda$  independientemente del valor de  $\omega$ . Además, para  $\omega \neq 0$  también aparece una ESQPT de primer orden. En esta subsección se analizará el efecto que posee una ESQPT continua en el factor decoherencia, mientras que el efecto que induce una ESQPT de primer orden sobre la misma se discutirá en la siguiente subsección.

En la figura 4.7 se muestran los resultados del módulo del factor decoherencia para un tamaño del entorno de  $N = 1000$  bosones con  $\alpha = 1/2$  fijado, para dos valores de  $\omega$ ,  $\omega = 0$  (paneles de la izquierda) y  $\omega = 1/\sqrt{2}$  (paneles de la derecha), respectivamente. El propósito de estas figuras es mostrar el efecto que induce una ESQPT continua sobre el módulo del factor decoherencia. En cada caso se ha fijado, por tanto, el valor de  $\alpha$  y de  $\omega$  y se ha ido variando progresivamente el parámetro de acoplo  $\lambda$  entre el sistema y el entorno. Esencialmente hay dos valores  $\lambda$  de referencia. El primero es el que hemos denominado  $\lambda_*$  y corresponde al valor de  $\lambda$  al que se produce la transición de fase en el estado fundamental. Dicho valor se calcula usando la ecuación (4.42). El resultado para  $\alpha = 1/2$  y  $\omega = 0$  es  $\lambda_* = 1,5$  y para  $\alpha = 1/2$  y  $\omega = 1/\sqrt{2}$  es  $\lambda_* = 1,75$ . Esos valores son los que se han representado en los paneles centrales de la figura 4.7. El segundo valor de  $\lambda$  de referencia es  $\lambda_c$ , que es el valor de  $\lambda$  que lleva al sistema a la transición de fase en un estado excitado.

Conforme se va aumentando  $\lambda$ , el entorno va ganando energía y puede suceder que esta energía sea suficiente como para inducir en dicho entorno una ESQPT. Para comprender cómo se alcanza esta energía crítica,  $E_c$ , cuando se



**Figura 4.7:**  $|r(t)|$  para  $\alpha = 1/2$  y cinco valores diferentes de  $\lambda$  para dos elecciones de  $\omega$ ,  $\omega = 0$  panel de la izquierda y  $\omega = 1/\sqrt{2}$  panel de la derecha. En todos los casos  $N = 1000$ . La línea negra continua es la solución exacta y la línea roja discontinua es el cálculo TDA a segundo orden.

acopla el qubit al entorno obsérvese lo siguiente: se comienza la evolución con el estado fundamental del ambiente  $|g_0\rangle$ , en  $t = 0$  se introduce la interacción entre el sistema y el entorno, permitiendo que el sistema evolucione con el hamiltoniano de interacción. Instantáneamente el entorno, inicialmente en su estado fundamental con energía  $E_0$ , modificado por esta interacción se fragmenta en un conjunto de estados excitados correspondientes a una región energética con una energía promedio  $E \approx \langle g_0 | \hat{H}_1(\alpha) | g_0 \rangle$ . Por tanto, si  $\langle g_0 | \hat{H}_1(\alpha) | g_0 \rangle = 0$  entonces el acoplamiento con el qubit induce en el entorno un salto a la energía crítica,  $E_c$ . Esto último se ilustra en la figura 4.8, donde

se parte de un estado de la fase no simétrica con  $\alpha < \alpha_c$ . El acoplamiento con el qubit,  $\hat{H}_{\lambda_1} = \lambda \hat{n}_t$  aumenta la energía del entorno hasta la energía crítica  $E_c$ . Se puede obtener una expresión analítica que proporcione el valor de  $\lambda_c$  en función del parámetro de control  $\alpha$  en el caso  $\omega = 0$  gracias a la ecuación (4.44), con  $E_c = 0$ , es decir,

$$E(N, \beta) + \Delta E(N, \beta, \lambda_c) = 0, \quad (4.107)$$

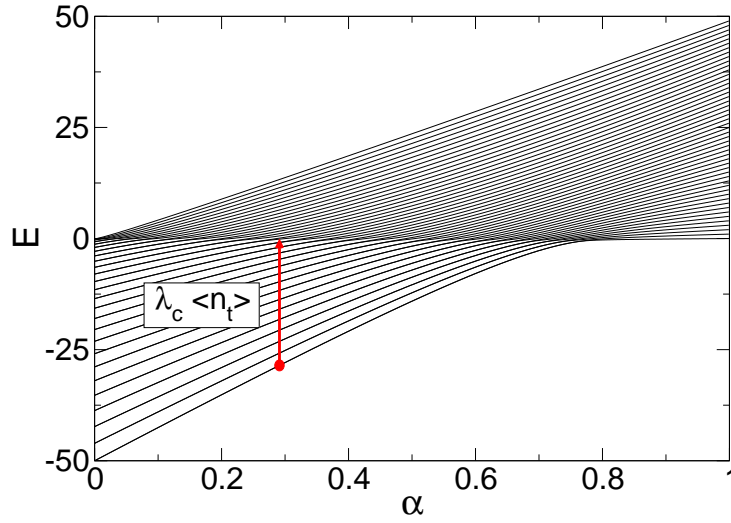
y teniendo en cuenta que en la fase no simétrica  $\beta_e = \sqrt{\frac{5\alpha-4}{3\alpha-4}}$ , con lo que se obtiene finalmente

$$\lambda_c^{(2)}(\alpha) = \frac{1}{2}(4 - 5\alpha), \quad \alpha < \frac{4}{5}. \quad (4.108)$$

Si se quisiera conocer el  $\lambda_c^{(2)}$  para un caso donde  $\omega \neq 0$  habría que resolver de nuevo la ecuación anterior (4.107), pero esta vez  $\beta_e$  se tiene que calcular numéricamente porque no es posible establecer una expresión analítica  $\beta_e(\alpha, \omega)$  que dependa explícitamente de  $\alpha$ , y  $\omega$ . Los valores que se obtienen para  $\lambda_c$  si  $\alpha = 1/2$  son:  $\lambda = 0,75$  y  $\lambda = 1,17$  para  $\omega = 0$  y  $\omega = 1/\sqrt{2}$ , respectivamente.

Esos valores son los representados en los paneles de la cuarta fila en la figura 4.7. Además de estos dos valores de referencia, en la citada figura se representan, para comparar, dos valores de  $\lambda$  mayores que  $\lambda_*$  (paneles superiores), y un valor de  $\lambda$  menor que  $\lambda_c$  (panel inferior).

Una vez discutidos los valores de referencia de  $\lambda$ , pasemos a comentar la figura 4.7. Los cálculos exactos están representados por una línea continua y se observan claramente (excepto para el caso  $\lambda = \lambda_c$ ) dos efectos en el factor de decoherencia: por una parte una envolvente que decae suavemente y por otra unas oscilaciones rápidas. La forma de la envolvente se puede ajustar a una Gaussiana para tiempos cortos y a una ley de potencias para tiempos más largos (esto es una Lorentziana); un comportamiento similar ha sido identificado en [101] si el parámetro de acoplo es más grande que el valor crítico. Además, en la figura 4.7 vemos que este patrón se rompe



**Figura 4.8:** Niveles de energía para el hamiltoniano del entorno (4.10) con  $N = 100$  en el caso  $\omega = 0$ . la flecha roja muestra el salto en energía que el acoplamiento con el qubit produce en el entorno.

drásticamente para los valores  $\lambda = \lambda_c$ . En esos casos  $|r(t)|$  decae rápidamente a cero y comienza a oscilar aleatoriamente alrededor de un valor pequeño. Este particular comportamiento constituye un punto singular tanto para la forma de la envolvente de  $|r(t)|$  como del período de sus oscilaciones. Esto quiere decir que la coherencia del sistema se pierde completamente cuando el entorno experimenta una ESQPT. Por tanto, la existencia de una ESQPT en el entorno tiene una fuerte influencia sobre la decoherencia que se induce sobre el qubit. Se puede resumir este último resultado en la siguiente conjetura: *Si el acoplamiento entre el sistema y el entorno lleva al entorno a la energía crítica  $E_c$  de una ESQPT, entonces la decoherencia inducida sobre el qubit es máxima.*

Merece la pena recordar que estamos tratando con sistemas finitos cuyo comportamiento es inevitablemente cuasiperiódico. Por consiguiente, estrictamente hablando, las faltas de recurrencias que se han observado en los paneles de la figura 4.7 donde se tiene la ESQPT puede ser temporal. Sin embargo, se conoce que en situaciones realistas la cuasiperiodicidad de la evolución cuántica a lo largo de escalas temporales largas se ve afectada por

los efectos de la decoherencia [14]. Las escalas de tiempo, a corto y medio plazo, usadas en los presentes cálculos son por tanto más relevantes desde el punto de vista práctico. A partir de estos resultados, se interpreta que la diferencia observada en el carácter del factor de decoherencia sobre el sistema es una consecuencia dinámica importante de la ESQPT.

Para entender los resultados expuestos anteriormente, hemos hecho cálculos en el marco de la aproximación TDA a segundo orden. Ya se vió que el cálculo a primer orden no daba el decaimiento de la envolvente y, por tanto, proporcionaba una descripción muy pobre del fenómeno de decoherencia. Estos resultados se representan también en la figura 4.7 con línea discontinua roja. En primer lugar, se aprecia que la aproximación de TDA hasta segundo orden es razonablemente buena para describir el fenómeno de la decoherencia en los casos de débil acoplamiento (pequeños valores de  $\lambda$  comparado con  $\lambda_c^{(2)}$ ) y fuerte acoplamiento (grandes valores de  $\lambda$  comparado con  $\lambda_c^{(2)}$ ). En particular, la forma de la envolvente queda muy bien descrita por el cálculo TDA (veáse los paneles para  $\lambda = 4$  y  $\lambda = 8$  en la figura 4.7). Puesto que esta aproximación se basa principalmente en la exactitud del primer y del segundo estado excitado de  $\hat{H}_E$ , se puede concluir que la información que se extrae de los niveles de más baja energía del espectro es suficiente para tener una buena idea sobre las propiedades de los niveles excitados más altos del hamiltoniano del entorno. Tal y como se mencionó anteriormente, un cambio en la interacción entre el qubit y el entorno implica un aumento en la energía del entorno que vendrá dada por  $\Delta E = \langle g_0 | \hat{H}_1(\lambda) | g_0 \rangle - E_0$  y por consiguiente, un valor grande de  $\lambda$  fuerza a que el estado del entorno *salte* desde su estado fundamental a un estado mezcla de más alta energía.

En segundo lugar, los cálculos de la TDA a segundo orden fallan para valores intermedios de  $\lambda$  como claramente se puede observar en los paneles de la izquierda correspondientes a  $\lambda = \lambda_c^{(2)} = 0,75$  y  $\lambda = \lambda_* = 1,5$ , y en los paneles de la derecha  $\lambda = \lambda_c^{(2)} = 1,17$  y  $\lambda = \lambda_* = 1,75$ . Como ya se sabe, esos dos valores se corresponden con los acoplamientos críticos  $\lambda_c^{(2)}$  y  $\lambda_*$ , asociados a la transición de fase de estados excitados y a la transición de fase del estado fundamental respectivamente. La razón por la que la aproximación falla para los citados valores de  $\lambda$  es la siguiente: la ESQPT supone una



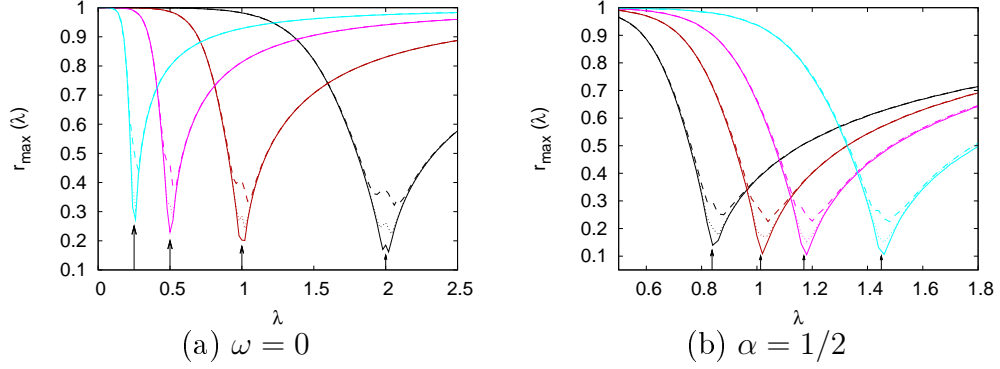
singularidad en el espectro de energía muy por encima del primer estado excitado, pero precisamente el primer estado excitado es el que proporciona la mayor contribución en el cálculo de la TDA. Por otra parte, la transición de fase para el estado fundamental no afecta a la decoherencia sufrida por el qubit debido a que el acoplamiento  $\lambda$  hace que el entorno salte muy por encima del punto crítico, el cual induce una singularidad en el gap entre el estado fundamental y el primer estado excitado. Sin embargo, puesto que el cálculo de la TDA para  $|r(t)|$  depende fuertemente de este gap, se ve espúreamente afectado por la QPT inducida por el acoplamiento crítico  $\lambda_*$ .

Finalmente, cuando mejor ajustan la aproximación Tamm-Dankoff y el cálculo exacto es para  $\lambda = 0,3$  muy por debajo de  $\lambda_c^{(2)}$ . No sólomente reproduce de manera correcta la envolvente de  $|r(t)|$ , sino que las posiciones de los máximos locales también están bien colocados. En este caso, un acoplamiento débil hace que el entorno salte desde el estado fundamental hasta un estado mezcla de baja energía. Es razonable suponer por tanto que la descripción que proporciona la TDA a segundo orden, que únicamente tiene en cuenta el primer estado excitado y una medida global de las anarmonicidades del espectro, sea una mejor aproximación para pequeños valores de  $\lambda$ .

#### 4.3.1.1. Análisis del comportamiento crítico de la decoherencia en la ESQPT continua

Ya se vió en la figura 4.7 que la decoherencia en el qubit se comporta de un modo anómalo para un acoplamiento crítico  $\lambda_c^{(2)}$ , que hace que el entorno tenga la energía crítica  $E_c^{(2)} = 0$ . Puesto que la densidad de estados en ambos casos,  $\omega = 0$  y  $\omega \neq 0$ , muestra el mismo comportamiento crítico alrededor de este valor (veáse la figura 4.3), también se espera el mismo comportamiento singular para la decoherencia.

Para comprobar esta idea, en la figura 4.9 se muestra cómo el factor de decoherencia cambia alrededor del valor crítico  $\lambda_c^{(2)}$  para diferentes valores de  $\alpha$ , de  $\omega$  y de  $N$ . Se representa  $r_{max}(\lambda)$  como cantidad representativa, la cual se define como el valor de  $|r(t)|$  en el segundo máximo, ya que el primer



**Figura 4.9:**  $r_{max}$  en función de la intensidad del acoplamiento  $\lambda$ , para distintos valores de  $\alpha$ ,  $\omega$ , y  $N$ . En el panel de la izquierda se tiene  $\omega = 0$ . Las líneas negras son para el caso  $\alpha = 0$ ; líneas rojas,  $\alpha = 0,4$ ; líneas magenta,  $\alpha = 0,6$ ; y líneas cian,  $\alpha = 0,7$ . Las líneas continuas representan  $N = 10000$ ; líneas punteadas,  $N = 2500$ ; y líneas discontinuas,  $N = 600$ . En el panel de la derecha,  $\alpha = 1/2$ , y las curvas son para los casos  $\omega = 0,2$ ,  $\omega = 1/2$ ,  $\omega = 1/\sqrt{2}$ , y  $\omega = 1$ , con el mismo código de colores que en el panel derecho. Las flechas muestran el acoplamiento crítico  $\lambda_c^{(2)}$  calculado gracias a la ecuación (4.44).

máximo es siempre  $|r(t = 0)| = 1$ . Esta magnitud proporciona una idea de la eficiencia del proceso de decoherencia sobre el qubit. En el panel de la izquierda se presenta el caso para  $\omega = 0$  y diferentes valores de  $\alpha < \alpha_c$  y  $N$ , y en el panel de la derecha se representa el caso  $\alpha = 1/2$  para varios valores de  $\omega \neq 0$  y  $N$ , (veáse el pie de figura para mayor detalle.). De la figura 4.9 se pueden extraer las siguientes conclusiones:

1.  $r_{max}(\lambda)$  es mínimo en  $\lambda \approx \lambda_c^{(2)}$ . En la tabla 4.1 se puede consultar el valor de  $\lambda_c^{(2)}$  obtenido con la ecuación (4.107) para cada caso de la figura 4.9.
2. El comportamiento de esta magnitud es suave e independiente del tamaño  $N$  del sistema, excepto en una pequeña zona alrededor de  $\lambda \approx \lambda_c^{(2)}$  donde tiene un comportamiento abrupto y dependiente de  $N$ . De tal modo que cuanto más grande es el tamaño del entorno, más pequeño es el valor de  $r_{max}(\lambda_c^{(2)})$ .

Se concluye, por tanto, que para  $\omega = 0$  y  $\omega \neq 0$ , el factor de decoherencia

$\omega = 0$			
$\alpha = 0$	$\alpha = 0,4$	$\alpha = 0,6$	$\alpha = 0,7$
$\lambda_c^{(2)} = 2$	$\lambda_c^{(2)} = 1$	$\lambda_c^{(2)} = 0,5$	$\lambda_c^{(2)} = 0,25$
$\alpha = 1/2$			
$\omega = 0,2$	$\omega = 0,5$	$\omega = 1/\sqrt{2}$	$\omega = 1$
$\lambda_c^{(2)} = 0,83$	$\lambda_c^{(2)} = 1,01$	$\lambda_c^{(2)} = 1,17$	$\lambda_c^{(2)} = 1,45$

**Tabla 4.1:** Acoplamientos críticos  $\lambda_c^{(2)}$  para los ocho casos representados en la figura 4.9

tiene un comportamiento crítico para  $\lambda = \lambda_c^{(2)}$ , donde  $r_{max}(\lambda_c^{(2)})$  sufre una pronunciada caída hacia cero y que es tanto más profunda cuanto mayor sea el valor de  $N$ .

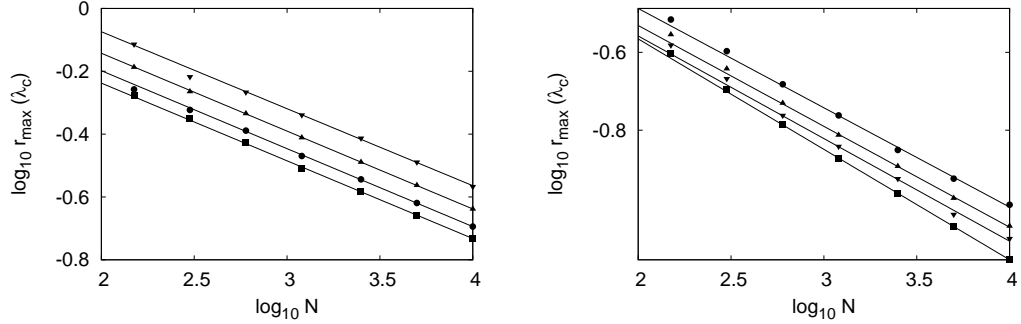
En base a estos resultados cabría preguntarse cómo se comporta  $r_{max}(\lambda_c^{(2)})$  en el límite termodinámico, para ello se procede a realizar un análisis de escalado por tamaño finito del sistema. Dado que es muy complicado hacer cálculos exactos para un tamaño más allá de  $N \approx 10000$  partículas<sup>1</sup>, se realiza un escalado de tamaño finito partiendo de sistemas con  $N = 100$  y aumentando progresivamente el tamaño hasta dos órdenes de magnitud, para así extrapolar su comportamiento a  $N \rightarrow \infty$ .

En la figura 4.10 se muestra cómo  $r_{max}(\lambda_c^{(2)})$  evoluciona con el tamaño  $N$  del entorno, tanto para  $\omega = 0$  y diferentes valores de  $\alpha$  (panel izquierdo), como para  $\alpha = 1/2$  y diferentes valores de  $\omega \neq 0$ . En todos los casos se extrae que  $r_{m\acute{a}x}(\lambda_c^{(2)})$  obedece una ley de potencias del tipo

$$r_{m\acute{a}x}(\lambda_c^{(2)}) \sim N^{-\gamma} \quad (4.109)$$

y, por consiguiente, se espera que  $r_{max}(\lambda_c^{(2)}) \rightarrow 0$  en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ . No obstante, se aprecian diferencias sutiles entre variar  $\alpha$  con  $\omega = 0$  y variar  $\omega$  con  $\alpha = 1/2$ . Los resultados para el exponente crítico  $\gamma$  se muestran en la tabla 4.2, los cuales se acercan bastante a  $\gamma = 1/4$  propuesto en [113] para  $\omega = 0$ . Sin embargo, las estimaciones numéricas parecen que

<sup>1</sup>La dificultad es esencialmente de carácter computacional ya que para un cálculo completo de  $r_{max}(\lambda_c^{(2)})$  se necesitan todos los autovectores y autovalores del hamiltoniano del entorno.



**Figura 4.10:**  $r_{max}(\lambda_c^{(2)})$  en función del tamaño del entorno  $N$ , en escala doblemente logarítmica. El panel de la izquierda trata los casos  $\omega = 0$ ; el panel de la derecha los casos  $\alpha = 1/2$ . Los cuadrados son para  $\alpha = 0$  (izquierda) y  $\omega = 0,2$  (derecha); círculos,  $\alpha = 0,4$  (izquierda) y  $\omega = 0,5$  (derecha); triángulos,  $\alpha = 0,6$  (izquierda) y  $\omega = 1/\sqrt{2}$  (derecha); triángulos invertidos,  $\alpha = 0,7$  (izquierda) y  $\omega = 1$  (derecha). Las rectas son el mejor ajuste a una ley de potencias del tipo  $r_{max}(\lambda_c^{(2)}) = AN^{-\gamma}$ .

$\omega = 0$			
$\alpha = 0$	$\alpha = 0,4$	$\alpha = 0,6$	$\alpha = 0,7$
$\gamma = 0,247 \pm 0,003$	$\gamma = 0,248 \pm 0,003$	$\gamma = 0,248 \pm 0,001$	$\gamma = 0,245 \pm 0,003$
$\alpha = 1/2$			
$\omega = 0,2$	$\omega = 0,5$	$\omega = 1/\sqrt{2}$	$\omega = 1$
$\gamma = 0,255 \pm 0,006$	$\gamma = 0,259 \pm 0,003$	$\gamma = 0,264 \pm 0,008$	$\gamma = 0,284 \pm 0,001$

**Tabla 4.2:** Exponentes  $\gamma$  del escalado por tamaño finito para los casos presentados en la figura 4.10

van aumentando para grandes valores de  $\omega$ ; en concreto, para el caso  $\omega = 1$ , el exponente crítico correspondiente  $\gamma$  es significativamente más grande que  $\gamma = 1/4$ .

Los resultados mostrados en las figuras 4.9 y 4.10 confirman que la presencia de una ESQPT en el espectro del entorno está claramente marcada por el factor decoherencia del qubit. Además, la magnitud  $r_{max}$  se comporta de forma análoga al parámetro de orden  $\hat{n}_t$  en la ESQPT [13].

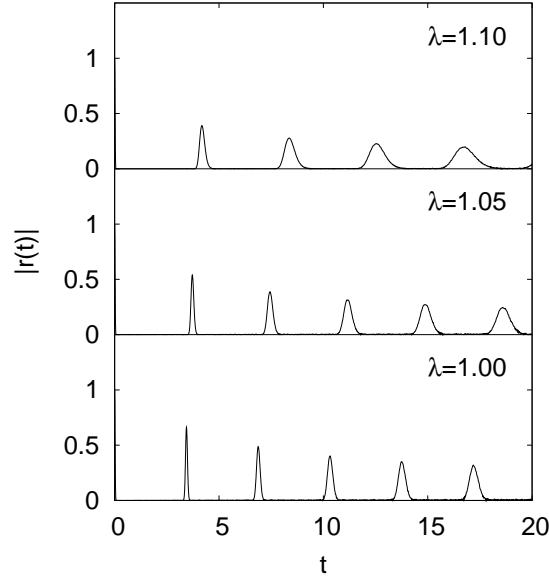
### 4.3.2. Factor de decoherencia para la ESQPT de primer orden

El hamiltoniano que se ha venido estudiando presenta para el caso  $\omega \neq 0$ , además de la ESQPT continua, que ha sido estudiada en la subsección precedente, una ESQPT de primer orden a la energía  $E_c^{(1)}$ . Esta energía crítica se puede estimar calculando el mínimo local de la superficie de energía  $\mathcal{H}(\phi, \xi)$ , tal y como se mostró en la figura 4.4. Una vez que se conoce el valor de  $E_c^{(1)}$  se puede obtener el acoplamiento crítico  $\lambda_c^{(1)}$  con ayuda de la ecuación (4.44). Así por ejemplo, para  $\alpha = 1/2$  y  $\omega = 1/\sqrt{2}$  la ESQPT de primer orden se alcanza cuando  $\lambda_c^{(1)} \approx 1,05$ .

En la figura 4.11 se representa el cálculo exacto de  $|r(t)|$  para  $\alpha = 1/2$ ,  $\omega = 1/\sqrt{2}$ , y tres valores diferentes de  $\lambda$  alrededor de  $\lambda = \lambda_c^{(1)} \approx 1,05$ . El hecho más significativo es que en  $|r(t)|$  no se observa señal alguna de ningún fenómeno crítico, a diferencia de lo que sucedía cuando se estudiaba  $|r(t)|$  próximo a  $\lambda_c^{(2)}$ . De hecho  $|r(t)|$  se comporta de manera suave alrededor  $\lambda = \lambda_c^{(1)}$ . Además, la figura 4.9 confirma también que  $r_{max}(\lambda)$  se comporta de un modo suave e independiente del tamaño del entorno para valores cercanos a  $\lambda_c^{(1)}$ . De aquí se concluye claramente que una ESQPT de primer orden no afecta a la decoherencia inducida en el qubit.

## 4.4. Resumen y conclusiones

En el presente capítulo se ha estudiado la decoherencia que se induce en un qubit debido a su interacción con un entorno. En particular, dicho entorno se ha modelado como un sistema bosónico de dos niveles, descrito por el modelo de Lipkin y que puede experimentar una transición de fase cuántica de primer orden o bien una transición de fase continua del tipo  $\lambda$ . Así pues, en primer lugar se ha presentado el modelo para el entorno y se ha estudiado su diagrama de fases así como su relación con la densidad de niveles. Después de discutir el tipo de interacción entre el entorno y el sistema se ha analizado el factor decoherencia  $|r(t)|$ , que mide cómo los elementos no diagonales de la matriz densidad reducida del sistema decaen con el tiempo. Para ello se han



**Figura 4.11:**  $|r(t)|$  para  $\alpha = 1/2$ ,  $\omega = 1/\sqrt{2}$  y tres valores distintos de  $\lambda$ . En todos los casos  $N = 10000$ .

desarrollado tres métodos que proporcionan resultados analíticos; a saber, usando las técnicas más allá de campo medio que se vieron en el capítulo 3, usando la aproximación TDA y por último la TDA a segundo orden. Los resultados analíticos que se obtienen para la decoherencia usando TDA a segundo orden se han comparado con los resultados numéricos que se obtienen de resolver exactamente el problema.

A raíz de los resultados obtenidos se afirma que la aproximación TDA y las técnicas empleadas para ir más allá del campo medio en el modelo vibrónico son insuficientes para describir adecuadamente el fenómeno de la decoherencia, ya que no se obtiene decaimiento alguno. No obstante, realizando un cálculo con la aproximación TDA hasta segundo orden somos capaces de reproducir correctamente el factor  $|r(t)|$  para cualquier valor de  $\lambda$  salvo una pequeña región donde aparece una transición de fase para estados excitados. Además, se ha encontrado que la decoherencia es máxima cuando el acoplamiento entre el sistema y el entorno fuerza una ESQPT de segundo orden en el ambiente. De modo que la decoherencia puede ser un

claro marcador para este tipo de ESQPT. Decimos para este tipo de ESQPT porque si se trata de una transición de primer orden, se ha visto que el factor de decoherencia no se ve afectado.

Finalmente, un estudio de escalado por tamaño finito del sistema revela que el factor decoherencia tiende a cero en el punto crítico siguiendo una ley de potencias.





## Capítulo 5

# Transiciones de fase en estados excitados en el modelo de Dicke y modelos relacionados

El modelo propuesto por Dicke describe la interacción de  $N$  átomos representados como sistemas de dos niveles, con un campo bosónico de  $M$  modos por medio de interacciones dipolares en una cavidad ideal. Éste es un modelo de gran importancia en óptica cuántica, esencial para las descripciones de sistemas que involucren la interacción entre materia y radiación. Dicke usó este modelo para ilustrar la importancia de los efectos colectivos en un sistema donde hay interacción entre los átomos y la luz [27], introduciendo el concepto de superradiancia, donde el conjunto atómico emite espontáneamente con una intensidad proporcional a  $N^2$  en lugar de  $N$ , tal y como cabría esperar si los átomos estuvieran radiando de manera incoherente. En dicho hamiltoniano, inicialmente se presentan los átomos como una colección de  $N$  sistemas de dos niveles idénticos, pero distinguibles, cada uno con una separación en energía de  $\hbar\omega_0$ . El  $i$ -ésimo átomo se describe por un operador de cuasiespín  $1/2 \{s_k^{(i)}; k = z, \pm\}$  cuyas componentes satisfacen las reglas de conmutación de  $SU(2)$ :  $[s_z, s_{\pm}] = \pm s_{\pm}$ ;  $[s_+, s_-] = 2s_z$ . Estos átomos de dos niveles interactúan con  $M$  modos bosónicos, los cuales poseen una frecuencia  $\{\omega_\alpha\}$ , con unas fuerzas de acoplamiento o parámetros

de acoplamiento  $\{\lambda_\alpha\}$  y dicha interacción es proporcional a los operadores de creación  $\{a_\alpha^\dagger\}$  y destrucción  $\{a_\alpha\}$ . En términos de estos operadores, el hamiltoniano de Dicke se expresa como

$$\hat{H} = \omega_0 \sum_{i=1}^N s_z^{(i)} + \sum_{\alpha=1}^M \omega_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha + \sum_{\alpha=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_\alpha}{\sqrt{N}} (a_\alpha^\dagger + a_\alpha) (s_+^{(i)} + s_-^{(i)}), \quad (5.1)$$

donde se ha tomado  $\hbar = 1$ . El origen del factor  $1/\sqrt{N}$  en la interacción proviene del hecho de que la fuerza de acoplamiento dipolar es proporcional a  $1/\sqrt{V}$ , con  $V$  el volumen de la cavidad. Si se reescribe  $\rho = N/V$ , siendo  $\rho$  la densidad de átomos en la cavidad, entonces se obtiene que  $1/\sqrt{V} = \sqrt{\rho/N}$ . La densidad se puede introducir en los parámetros de acoplamiento  $\{\lambda_\alpha\}$ , con lo que se obtiene explícitamente  $1/\sqrt{N}$  en el término de interacción. Debe observarse que este término no es más que un parámetro de escala que da información del tamaño del sistema, igualmente se podría tomar  $1/\sqrt{2N}$ . En lo que sigue nos centramos en un único modo de campo bosónico, con lo que el subíndice  $\alpha$  deja de ser necesario y simplificamos el hamiltoniano introduciendo los operadores

$$\hat{J}_z \equiv \sum_{i=1}^N s_z^{(i)}; \quad \hat{J}_\pm \equiv \sum_{i=1}^N s_\pm^{(i)}. \quad (5.2)$$

Estos operadores obedecen las usuales reglas de conmutación de  $SU(2)$ :

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm \hat{J}_\pm; \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_z. \quad (5.3)$$

En función de estos nuevos operadores, el hamiltoniano de Dicke se escribe como

$$\hat{H} = \omega_0 \hat{J}_z + \omega a^\dagger a + \frac{\lambda}{\sqrt{4j}} (a^\dagger + a) (\hat{J}_+ + \hat{J}_-). \quad (5.4)$$

En general, el conjunto de todas las configuraciones atómicas para  $N > 2$  no es trivial [114]. En términos de las configuraciones individuales de los átomos, los estados no son separables y existe entrelazamiento [115]. En el presente trabajo se tomará  $j$  de modo que pueda tener su valor máximo  $j = N/2$  y una vez fijado este valor,  $j$  permanece constante, ya que el hamiltoniano de Dicke no mezcla sectores con distintos valores de  $j$ . Por tanto, la colección de  $N$  sistemas de dos niveles queda descrita como un único sistema de  $(N + 1)$  niveles, que puede ser interpretado como un pseudoespín de longitud  $j = N/2$ . El límite termodinámico de  $N \rightarrow \infty$  es equivalente entonces a hacer que la longitud del pseudoespín tienda a infinito,  $j \rightarrow \infty$ .

En el modelo de Dicke se suele realizar la *rotating-wave approximation* (RWA), que es válida para pequeños valores de acoplamiento  $\lambda$  y desprecia los términos contra-rotacionales  $a^\dagger \hat{J}_+$  y  $a \hat{J}_-$ . Esto hace que el modelo sea integrable, simplificando el análisis pero también eliminando la posibilidad de la aparición de caos cuántico. Así pues, la aproximación RWA se traduce en una simplificación en el tratamiento del modelo de Dicke.

El modelo de Jaynes-Cummings [17] es justamente el modelo de Dicke en la aproximación RWA. La generalización de este modelo, introducida por Tavis y Cummings en el denominado modelo de Tavis-Cummings [29], continúa siendo fundamental para el estudio de propiedades básicas en electrodinámica cuántica (QED) y la comprensión de fenómenos tales como la existencia de colapsos y resurgimientos de oscilaciones Rabi [116], la formación de estados cuánticos macroscópicos, y los muchos estudios experimentales de átomos de Rydberg con números cuánticos principales muy grandes dentro de cavidades de un sólo modo [117–119].

En el presente capítulo se estudian las transiciones de fase cuánticas para estados excitados (ESQPTs) en tres modelos (dos integrables relacionados con el modelo de Jaynes-Cummings y uno no integrable, el modelo de Dicke) que describen la interacción entre un campo bosónico de un solo modo y un conjunto de átomos. Se mostrará que la presencia de la ESQPT en estos modelos afecta de manera drástica al proceso de relajación que induce un cambio repentino en el valor del parámetro de acoplamiento (*quantum quench*). La evidencia de la existencia de una ESQPT en los modelos

integrables quedará más clara que en el modelo no integrable, ya que en éste, la presencia de la ESQPT queda difuminada debido al carácter caótico del sistema alrededor de la región de la energía crítica.

## 5.1. Estructura algebraica de los modelos de Dicke y de Jaynes-Cummings

A continuación se analizará la estructura algebraica de los modelos Dicke y Jaynes-Cummings, los cuales describen un sistema compuesto por dos partes interactuantes:

1. Un campo bosónico de un sólo modo que se puede describir por medio de operadores de creación  $b^\dagger$  y de aniquilación  $b$ . Dichos operadores obedecen un álgebra de Heisenberg-Weyl  $HW(1)$ .
2. Un sistema representado por operadores de pseudoespín  $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$  y  $\hat{J}_0 = \hat{J}_z$  que satisfacen las relaciones de conmutación del álgebra de  $SU(2)$ ,

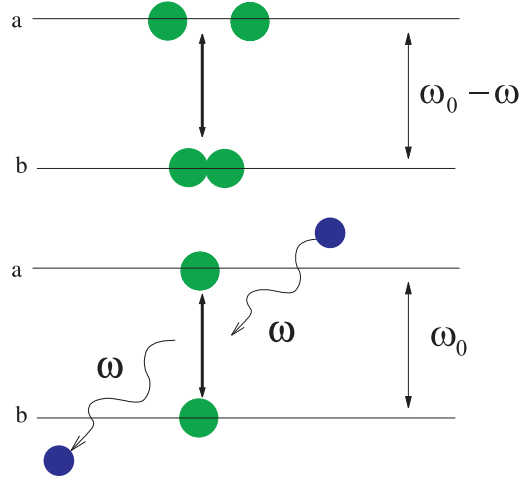
$$[\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_0, \quad (5.5)$$

o por analogía, el mismo sistema puede venir descrito también por los operadores  $\hat{K}_\pm = \hat{K}_x \pm i\hat{K}_y$  y  $\hat{K}_0 = \hat{K}_z$  que satisfacen las relaciones de conmutación del álgebra de  $SU(1,1)$

$$[\hat{K}_0, \hat{K}_\pm] = \pm\hat{K}_\pm, \quad [\hat{K}_+, \hat{K}_-] = -2\hat{K}_0. \quad (5.6)$$

Posteriormente, los álgebras  $SU(2)$  ó  $SU(1,1)$  vendrán dados en términos de operadores fermiónicos o bosónicos.

Por consiguiente, el álgebra del sistema completo será el producto directo  $HW(1) \otimes SU(\bullet)$ , en donde  $\bullet$  simboliza un álgebra especial unitaria dada. Por comodidad, en lo que sigue, únicamente se usarán los nombres abreviados  $SU(2)$  y  $SU(1,1)$  para los dos modelos presentados. Una representación esquemática de ambos modelos se puede ver en la figura 5.1.



**Figura 5.1:** Una representación esquemática de los modelos usados. El modelo  $SU(1,1)$  (dibujo superior) es útil para describir la coexistencia de moléculas de dos átomos idénticos y parejas de átomos independientes. El modelo  $SU(2)$  (dibujo inferior) describe la interacción de un campo de radiación de un único modo con una fila de átomos.

El espacio de Hilbert del sistema completo se identifica con el producto tensorial  $\mathbb{H} = \mathbb{H}^{(i)} \otimes \mathbb{H}^{(ii)}$ , donde  $\mathbb{H}^{(i)}$  es el espacio cuya base viene dada por  $\{|N_b\rangle\}$ , con  $N_b = 0, 1, \dots$  el número de bosones  $b$  y  $\mathbb{H}^{(ii)}$  coincide con el espacio asociado con una de las representaciones irreducibles de los grupos  $SU(2)$  ó  $SU(1,1)$ . Las representaciones irreducibles se clasifican por los autovalores  $c_{SU(\bullet)}^{(2)}$  de los respectivos invariantes de Casimir de segundo orden,

$$C_{SU(2)}^{(2)} = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \quad (5.7)$$

$$C_{SU(1,1)}^{(2)} = \hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2 - \hat{K}_z^2, \quad (5.8)$$

cuyos autovalores son  $c_{SU(2)}^{(2)} = j(j+1)$  (con  $j$  entero o semientero) y  $c_{SU(1,1)}^{(2)} = -k(k-1)$  ( $k > 0$  se le conoce como índice de Bargmann). Las representaciones irreducibles son de dimensión finita para el caso  $SU(2)$  (es un grupo compacto) y de dimensión infinita en el caso  $SU(1,1)$  (grupo no compacto). Las bases  $|j, m\rangle$  ( $m = -j, -j+1, \dots, +j$  es el autovalor de  $\hat{J}_0$ ) y  $|k, n\rangle$  ( $n = 0, 1, \dots$  enumera los autovalores  $k+n$  de  $\hat{K}_0$ ) se construyen mediante la acción consecutiva de los operadores escalamero  $\hat{J}_+$  y  $\hat{K}_+$  sobre los

estados más bajos  $|j, -j\rangle$  y  $|k, 0\rangle$  respectivamente.

En las siguientes subsecciones se aplicará cada álgebra al estudio de un modelo particular y se analizará su estructura.

### 5.1.1. Modelo $SU(1, 1)$

Puesto que el grupo generado por el álgebra  $SU(1, 1)$  es no compacto, las dimensiones de sus representaciones irreducibles son infinitas, tal y como se señalaba anteriormente. Los generadores de este álgebra se pueden expresar en función de otros operadores bosónicos de creación y destrucción  $a^\dagger, a$ . Así por ejemplo, una representación en términos de un único par de bosones puede ser

$$\begin{aligned}\hat{K}_+ &= \frac{1}{2}(a^\dagger)^2, \\ \hat{K}_- &= \frac{1}{2}a^2, \\ \hat{K}_0 &= \frac{1}{2}(a^\dagger a + \frac{1}{2}).\end{aligned}\tag{5.9}$$

También se puede usar otra representación en término de otros pares de bosones (como por ejemplo dos tipos de bosones), que junto con las ecuaciones (5.9) constituyen varias formas de representación de Schwinger del álgebra  $SU(1, 1)$ . Además, más adelante se introducirá de nuevo la representación bosónica de Holstein-Primakoff.

Ahora bien, para construir el hamiltoniano se acepta la simple realización dada por (5.9). En este caso hay únicamente dos representaciones irreducibles, una con  $k = \frac{1}{4}$  y otra con  $k = \frac{3}{4}$ . Sus respectivos espacios de Hilbert vienen dados por los vectores  $|N_a\rangle$  que contienen un número par o impar de bosones  $a$ . Además de estos bosones recordemos que hay otros bosones,  $b$ , que representan moléculas diatómicas. La interacción entre los bosones  $a$  y los  $b$  es tal que la creación de un bosón  $b$  implica la destrucción de un par de bosones  $a$  y viceversa. Como aplicación, este modelo puede describir de una manera esquemática la formación y disociación de moléculas diatómicas con

dos átomos idénticos [16]. El hamiltoniano se escribe entonces como

$$\hat{H}^{(1)} = \omega_0 \hat{K}_0 + \omega b^\dagger b + \frac{\lambda}{\sqrt{M^{(1)}}} \left[ b \hat{K}_+ + b^\dagger \hat{K}_- \right], \quad (5.10)$$

con  $\lambda/\sqrt{M^{(1)}} \geq 0$  un parámetro de acoplamiento escalado (el significado de  $M^{(1)}$  se explicará más adelante), y  $\omega, \omega_0$  indican las energías de monopartícula si se imponen unidades naturales,  $\hbar = 1$ .

Para cada una de la representaciones irreducibles de  $SU(1, 1)$ , las cuales vienen clasificadas por el número cuántico  $k$ , hay dos operadores que conmutan entre sí (dos grados cuánticos de libertad) que determinan la base de los estados físicos de todo el espacio de Hilbert del sistema. Uno de los operadores está asociado con el número de bosones  $b$ ,  $\hat{N}_b = b^\dagger b$ , el otro operador se corresponde con  $\hat{K}_0$ , que está relacionado con el número de bosones  $\hat{N}_a = a^\dagger a$ . Al mismo tiempo, se pueden encontrar dos integrales de movimiento: una es la energía del sistema  $H$  y la otra se puede escribir de la forma

$$M^{(1)} = 2N_b + N_a - \frac{4k-1}{2} = 2(N_b + K_0 - k). \quad (5.11)$$

El valor  $M^{(1)} \geq 0$  siempre es par y  $M^{(1)}/2$  cuenta el número de bosones tipo  $b$  más el número de pares de bosones tipo  $a$ . Si se considera que el número total de partículas del sistema se conserva, entonces  $M^{(1)}$  se debe conservar y esto implica que el hamiltoniano (5.10) es un sistema integrable, en el cual a cada valor fijado de  $M^{(1)}$  se le puede asociar una configuración espacial efectiva monodimensional (un grado de libertad).

A lo largo del capítulo se acepta que  $\omega_0 > \omega$  para este modelo  $SU(1, 1)$ . Esto significa que el estado fundamental del sistema en ausencia de interacción ( $\lambda = 0$ ) se puede identificar con un condensado molecular donde no hay átomos sueltos. Este estado toma la forma  $|N_b = M^{(1)}/2\rangle \otimes |k, 0\rangle$ , donde el primer término representa un estado con un número máximo de bosones tipo  $b$  y el segundo término tiene el valor mínimo de  $N_a = 0$  ( $N_a = 1$ ) para  $k = \frac{1}{4}$  ( $k = \frac{3}{4}$ ). No obstante, para valores suficientemente grandes del parámetro de acoplamiento  $\lambda$ , la interacción entre las moléculas y los

pares de átomos produce una distribución más equilibrada en los valores esperados  $\langle \hat{N}_a \rangle$  y  $\langle 2\hat{N}_b \rangle$ . Esto provoca la aparición de dos fases diferenciadas en el estado fundamental del sistema. Además, el cruce entre los dos tipos de estructuras del estado fundamental se hace más nítido conforme el tamaño del sistema va aumentando y en el límite termodinámico  $M^{(1)} \rightarrow \infty$ , se obtiene una transición de fase. El cálculo del valor crítico de la interacción de acoplamiento  $\lambda_{c0}^{(1)}$  que separa ambas fases se proporcionará más adelante con argumentos semiclásicos.

### 5.1.2. Modelo $SU(2)$

El grupo generado por el álgebra  $SU(2)$  es compacto, por lo que sus representaciones irreducibles son dimensionalmente finitas. Así, sus generadores se pueden construir a partir de operadores fermiónicos. Por ejemplo, se les puede asociar una fila de partículas de espín 1/2 (o átomos de dos niveles) localizados en  $2j$  lugares,

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ &= \sum_{i=1}^{2j} a_{\uparrow i}^\dagger a_{\downarrow i}, \\ \hat{J}_- &= \sum_{i=1}^{2j} a_{\downarrow i}^\dagger a_{\uparrow i}, \\ \hat{J}_0 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2j} \left( a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} - a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} \right).\end{aligned}\tag{5.12}$$

Aquí,  $a_{\uparrow i}^\dagger$  o  $a_{\uparrow i}$  y  $a_{\downarrow i}^\dagger$  o  $a_{\downarrow i}$  crean o destruyen estados de espín arriba o espín abajo del fermión en el lugar  $i$  y el operador escalera  $\hat{J}_\pm$  describe excitaciones o desexcitaciones a lo largo de la fila de fermiones. Como alternativa se pueden usar realizaciones de pares de fermiones del álgebra  $SU(2)$  (con  $\hat{J}_\pm$  creando o destruyendo pares de fermiones), o realizaciones bosónicas del tipo Schwinger o Holstein-Primakoff con espacios de Hilbert truncados. Sobre realizaciones bosónicas para el  $SU(2)$  se discutirá más adelante. Así, dependiendo de la realización específica empleada, el modelo puede recibir diferentes interpreta-



ciones físicas. En particular, aquí se considerará explícitamente la realización (5.12), que describe interacciones de fotones de una única frecuencia con átomos de dos niveles en sistemas del tipo maser.

Para este modelo, se toma uno de los siguientes hamiltonianos

$$\hat{H}^{(2)} = \omega_0 \hat{J}_0 + \omega b^\dagger b + \frac{\lambda}{\sqrt{M^{(2)}}} \left[ b \hat{J}_+ + b^\dagger \hat{J}_- \right], \quad (5.13)$$

$$\hat{H}^{(3)} = \omega_0 \hat{J}_0 + \omega b^\dagger b + \frac{\lambda}{\sqrt{M^{(3)}}} \left[ (b + b^\dagger)(\hat{J}_- + \hat{J}_+) \right], \quad (5.14)$$

donde  $\lambda/\sqrt{M^{(2)}}$  ó  $\lambda/\sqrt{M^{(3)}}$  es un parámetro de acoplamiento debidamente escalado ( $\lambda \geq 0$ ) y  $\omega, \omega_0$  son energías de monopartícula.

Cabe señalar que el hamiltoniano de Jaynes-Cummings (5.13) es muy similar al presentado en la ecuación (5.10) y se conserva la magnitud

$$M^{(2)} = 2(N_b + J_0 + j), \quad (5.15)$$

análoga a la magnitud (5.11). Por tanto, este modelo se corresponde con un sistema integrable que viene descrito de una manera efectiva por un espacio de configuración unidimensional. Esto se debe a que el modelo posee de nuevo dos grados de libertad asociados con los operadores que conmutan entre sí  $\hat{N}_b$  y  $\hat{J}_0$ . Si se define el operador  $\hat{N}_\uparrow \equiv \hat{J}_z + j$ , que cuenta el número de átomos excitados en el nivel superior, entonces  $M^{(2)}/2 = N_b + N_\uparrow$ .

Sin embargo, el modelo de Dicke (5.14) viola la conservación de  $M^{(2)}$ , pero conserva la paridad  $\Pi = (-1)^{M^{(2)}/2}$  que permite etiquetar los autoestados individuales según su paridad. En el presente trabajo se ha tomado  $M^{(3)} = 4j$ , que es el número total de estados fermiónicos, justamente el doble del número de lugares disponibles.

Al igual que en el caso  $SU(1,1)$ , los estados fundamentales de ambos hamiltonianos de  $SU(2)$  cambian repentinamente su naturaleza conforme el parámetro de acoplamiento  $\lambda$  aumenta por encima de un cierto valor crítico. Esta transición posee un carácter crítico en el límite termodinámico,  $M^{(2)}, M^{(3)} \rightarrow \infty$ .

Para el hamiltoniano  $H^{(2)}$  de la ecuación (5.13) se asume que  $\omega > \omega_0$  y se identifica su estado fundamental para  $\lambda = 0$  con un vacío de fotones,  $N_b = 0$ , combinado con un estado donde todos los átomos están excitados:  $J_0 = \frac{1}{2}M^{(2)} - j$ . En los cálculos que se realizan se tomará  $M^{(2)} = 4j$  por lo que  $J_0 = +j$  cuando  $\lambda = 0$ . Esta estructura cambia eventualmente a un estado con  $\langle N_b \rangle > 0$  cuando se alcanza el acoplamiento crítico, en el cual parte de la energía se transfiere desde los átomos al campo de fotones. Merece la pena mencionar que, tal y como trabajamos con este modelo, no lo hacemos de la manera estándar que se puede encontrar en otras referencias, ya que nosotros únicamente contemplamos un conjunto finito de estados con un único valor de  $M^{(2)}$  fijo.

Por otra parte, para el hamiltoniano  $H^{(3)}$  de la ecuación (5.14) se asume que  $\omega_0 = \omega$ , lo cual corresponde a la condición de resonancia de absorción y emisión de fotones por parte de los átomos. El estado fundamental para  $\lambda = 0$  es  $|N_b = 0\rangle \otimes |j, -j\rangle$ , que describe un vacío de fotones y una fila de átomos desexcitados (se recuerda que para el modelo de Dicke  $N_b + J_0$  no se conserva). Para este modelo también existe una transición de fase para el estado fundamental, donde para una interacción lo suficientemente fuerte entre los átomos y la radiación, el estado fundamental cambia a un estado con  $\langle \hat{J}_0 \rangle > -j$  y  $\langle \hat{N}_b \rangle > 0$ , manifestando una excitación macroscópica de ambos subsistemas [120, 121]. En el modelo de Dicke, las fases se denominan fase normal si  $\lambda < \lambda_{c0}$  o fase superradiante si  $\lambda > \lambda_{c0}$ , siendo  $\lambda_{c0}$  el parámetro de acoplamiento crítico que determina el punto donde se produce la transición de fase para el estado fundamental.

En la referencia [121] se puede encontrar un estudio completo de la transición de fase cuántica para el estado fundamental en el modelo de Dicke y su conexión con el caos cuántico. El presente trabajo complementa la referencia anterior en el sentido de que se estudia la existencia de una transición de fase cuántica en estados excitados y cómo se ve afectada por el comportamiento caótico del sistema.

Hasta el momento se han introducido los tres modelos, con sus estructuras algebraicas, para los que se estudiarán las transiciones de fase:

1. Un modelo integrable descrito por un álgebra  $SU(1, 1)$ , adecuado para describir disociación de moléculas compuestas de dos átomos idénticos.
2. Otro modelo integrable descrito por un álgebra  $SU(2)$ , conocido como modelo de Jaynes-Cummings y el cual es útil para describir sistemas de interés en óptica cuántica de interacción radiación-materia.
3. Un modelo no integrable descrito por un álgebra  $SU(2)$ , conocido como modelo de Dicke y el cual también es nuevamente útil en óptica cuántica para describir sistemas de interacción radiación-materia.

Estos tres sencillos modelos nos permitirán explorar transiciones de fase cuánticas en sistemas integrables y no integrables. Para ello, es necesario definir una base apropiada en la que se puedan diagonalizar los hamiltonianos correspondientes.

## 5.2. Solución numérica de los modelos $SU(1, 1)$ y $SU(2)$

Los hamiltonianos de los modelos que vienen dados por las ecuaciones (5.10), (5.13) y (5.14) se pueden diagonalizar numéricamente en una base apropiada. Lo más natural es elegir una base de la forma  $|N_b\rangle \otimes |k, n\rangle$  para el modelo  $SU(1, 1)$  y  $|N_b\rangle \otimes |j, m\rangle$  para los modelos basados en el álgebra  $SU(2)$  debido a la estructura del producto tensorial del espacio de Hilbert. El estado  $|N_b\rangle \in \mathbb{H}^{(i)}$  representa un estado con un número dado de bosones  $b$ , mientras que  $|k, n\rangle, |j, m\rangle \in \mathbb{H}^{(ii)}$  son vectores de la base de las representaciones irreducibles de  $SU(1, 1)$  y  $SU(2)$  respectivamente. Recordemos que en el caso de  $SU(1, 1)$ , se puede establecer una relación entre los estados  $|k, n\rangle$  y los estados  $|N_a\rangle$ , es decir, estados que cuentan el número de bosones  $a$ , por medio de la identificación  $k = \frac{1}{4}$  ó  $\frac{3}{4}$  para las representaciones irreducibles par o impares de  $N_a$  respectivamente, y  $n = \frac{1}{2}(N_a - \frac{4k-1}{2})$ . Los elementos de matriz de los hamiltonianos correspondientes se calculan fácilmente en estas bases ya que se conoce cómo actúan los operadores  $b^\dagger$  y  $b$  sobre los

estados  $|N_b\rangle$  y se conoce también la acción de los operadores  $\{\hat{K}_+, \hat{K}_-, \hat{K}_0\}$  ó  $\{\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_0\}$  sobre los estados  $|k, n\rangle$  ó  $|j, m\rangle$ .

Para los modelos integrables  $SU(1, 1)$  y  $SU(2)$ , las bases están compuestas por un conjunto finito de vectores. Éstos están determinados por la elección de los parámetros de tamaño  $M^{(1)}$  ó  $M^{(2)}$ , los cuales permiten a su vez únicamente un número finito de combinaciones de  $(N_b, n)$  ó  $(N_b, m)$  que satisfagan las ecuaciones (5.11) y (5.15) respectivamente. De este modo, las correspondientes matrices de los hamiltonianos son de dimensión finita y su diagonalización se reduce así a un problema de cálculo numérico.

Por otra parte, el modelo de Dicke no posee ninguna restricción en la conservación del número de partículas, lo que se traduce en que la base del sistema está constituida por un número infinito de estados. Esta base es, por consiguiente, infinita y se debe truncar para  $N_b < N_{\text{trunc}}$ . Esto hace que el problema de la convergencia de los cálculos numéricos sea un tema importante a tener en cuenta. Hablando cualitativamente, el truncamiento en un número fijado de bosones  $b$ ,  $N_{\text{trunc}}$ , se puede realizar sin cometer demasiado error únicamente en los cálculos que involucran los estados de más baja energía para parámetros de interacción pequeños entre los bosones  $b$  (fotones) y los átomos. De hecho, el hamiltoniano de Dicke es diagonal en la base  $|N_b\rangle \otimes |j, m\rangle$  para  $\lambda = 0$  y los distintos estados con un número creciente de bosones  $N_b$  se asocian con un aumento de excitaciones. Por consiguiente, para valores moderados de  $\lambda$  los estados con un número elevado de fotones se mezclan débilmente con los autoestados del sistema de más baja energía. Ahora bien, el parámetro de cutoff,  $N_{\text{trunc}}$ , se debe aumentar consistentemente conforme se aumenta  $\lambda$  con el objetivo de reproducir adecuadamente la zona del espectro que interesa analizar. Obviamente se ha comprobado que todos los resultados que se presentan a continuación son estables frente a cambios en  $N_{\text{trunc}}$ , es decir, hay convergencia en los resultados numéricos presentados. En la práctica, esto se lleva a cabo de la siguiente manera: se fija un número de fotones y se realiza el cálculo correspondiente, posteriormente se aumenta el número de fotones y se vuelve a realizar el mismo cálculo. Si el resultado no cambia o cambia dentro de un error fijado (pongamos de  $10^{-4}$ ) como consecuencia de aumentar el número de fotones, entonces podemos dar por

convergiendo el cálculo en la zona que estemos mirando y ya tenemos el valor de  $N_b$ . Si por el contrario cambia por encima del error fijado, se establece como truncación el nuevo valor de  $N_b$  y se vuelve a repetir el cálculo hasta que converja.

### 5.3. Caracterización de las QPTs en los modelos $SU(1, 1)$ y $SU(2)$

En esta sección se estudiará el límite clásico de los hamiltonianos presentados en la sección anterior. Mediante un análisis semiclásico se determinará la superficie de potencial que determina cada uno de los diferentes hamiltonianos y su estudio proporcionará información acerca de las transiciones de fase que se observan en estos modelos. Por último se verá que  $\langle \hat{J}_z \rangle$  y  $\langle \hat{N}_a \rangle$  son parámetros de orden para los modelos  $SU(1, 1)$  y  $SU(2)$  respectivamente, y se calcularán sus exponentes críticos.

Los hamiltonianos que se estudian en el presente capítulo son ejemplos de una clase de sistemas mucho más generales, a saber, aquellos que se describen por medio de modelos algebraicos finitos [122]. Para estos modelos, los observables relevantes se construyen en términos de un conjunto finito de generadores  $\hat{G}_i$  que cierran bajo un álgebra dinámica,  $[\hat{G}_i, \hat{G}_j] = \sum_k c_{ijk} \hat{G}_k$ , con unas constantes de estructura  $c_{ijk}$ . Los sistemas correspondientes poseen un número finito de grados de libertad y su límite termodinámico (en la práctica quiere decir que el tamaño del sistema tiende a infinito) coincide con el límite clásico  $\hbar \rightarrow 0$ . Con el objetivo de probar esto último, recordemos que el límite termodinámico se alcanza generalmente para valores asintóticos de un parámetro apropiado ligado al tamaño del sistema  $\aleph$  tal que las fluctuaciones térmicas del hamiltoniano escalado  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}/\aleph$  se anulan cuando  $\aleph \rightarrow \infty$ . En los sistemas algebraicos es necesario introducir este parámetro a nivel de cada generador individual mediante generadores escalados  $\hat{\mathcal{G}}_i \equiv \hat{G}_i/\aleph^\kappa$ , con  $\kappa > 0$ , cuya sustitución en el hamiltoniano  $H(\hat{G}_i)$  debe ser consistente con la definición de  $\hat{\mathcal{H}}$ , de este modo  $H(\hat{G}_i/\aleph^\kappa) = \hat{H}(\hat{G}_i)/\aleph$ . De hecho, este es el motivo por el cual el parámetro de tamaño del sistema

$\aleph \equiv M^{(n)}$  se incluyó en el parámetro de acoplamiento efectivo  $\lambda/\sqrt{\aleph}$  de los distintos hamiltonianos  $\hat{H}^{(n)}$  ( $n = 1, 2, 3$ ). Además, las familiares relaciones de conmutación para los generadores originales (sin escalar)  $\hat{G}_i$  garantizan que los conmutadores de los generadores escalados  $\hat{\mathcal{G}}_i$  sean nulos en el límite  $\aleph \rightarrow \infty$ , es decir  $[\hat{\mathcal{G}}_i, \hat{\mathcal{G}}_j] \rightarrow 0$ , lo cual refleja el comportamiento clásico de observables correctamente escalados.

Por los capítulos anteriores, ya se sabe que existe un método general para obtener el límite clásico en modelos algebraicos finitos, el cual se basa en el uso de estados coherentes [123, 124]. Estos estados, para los sistemas que se describen en el presente capítulo, se construyen como un producto tensorial  $|\zeta\rangle \otimes |\xi\rangle$ , donde  $|\zeta\rangle \propto e^{\zeta b^\dagger}|0\rangle$  con  $\zeta \in \mathbb{C}$ , es el estado coherente de  $HW(1)$  para el subsistema (1) y  $|\xi\rangle$  es un estado coherente de  $SU(1,1)$  o  $SU(2)$  aún no especificado para el subsistema (2) [125, 126]. Los estados  $|\xi\rangle$  se pueden construir de diferentes formas dependiendo de la realización concreta que se adopte de las dos álgebras. Así por ejemplo, una de las posibles opciones es definirlos como  $|\xi\rangle \propto e^{\xi \hat{K}_+}|k, 0\rangle$  ó  $|\xi\rangle \propto e^{\xi \hat{J}_+}|j, -j\rangle$  con  $\xi \in \mathbb{C}$  y asociar el límite clásico con  $j \rightarrow \infty$  ó  $k \rightarrow \infty$ . El correspondiente espacio de las fases del subsistema (2) se identifica entonces con una superficie  $2D$  de curvatura positiva o negativa: que es una esfera  $j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = 1$  en el caso  $SU(2)$  ( $j_i = \hat{J}_i/j$ ) o un hiperboloide de dos hojas  $k_x^2 + k_y^2 - k_z^2 = -1$  en el caso  $SU(1,1)$  ( $k_i = \hat{K}_i/k$ ).

Sin embargo, para obtener el límite clásico de los diversos modelos no se seguirá directamente este camino debido a que el valor del invariante de  $SU(1,1)$  se fija a  $k = \frac{1}{4}$  o  $\frac{3}{4}$ , de tal modo que no se podría mantener un paralelismo en el tratamiento de los sistemas integrables  $SU(2)$  y  $SU(1,1)$  como es nuestra intención. En su lugar, se aplica a las mencionadas álgebras una transformación de Holstein-Primakoff estableciendo una aplicación entre los operadores definidos en  $SU(1,1)$  y  $SU(2)$  y un nuevo campo bosónico  $c^\dagger, c$ . Así se tiene que

$$\begin{aligned}
 \hat{K}_+ &= c^\dagger \sqrt{2k + c^\dagger c}, \\
 \hat{K}_- &= \sqrt{2k + c^\dagger c} c, \\
 \hat{K}_0 &= c^\dagger c + k,
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

para el caso  $SU(1,1)$ , con  $c^\dagger c \equiv N_c \geq 0$  número de bosones  $c$  y

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_+ &= c^\dagger \sqrt{2j - c^\dagger c}, \\
 \hat{J}_- &= \sqrt{2j - c^\dagger c} c, \\
 \hat{J}_0 &= c^\dagger c - j,
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

para el caso  $SU(2)$ , con  $0 \leq N_c \leq 2j$ . De esta manera se obtiene una aplicación entre el álgebra original  $HW(1) \otimes SU(\bullet)$  y un nuevo álgebra asociado con los bosones tipo  $b$  y tipo  $c$ , el cual se puede estudiar haciendo uso de los estados bosónicos coherentes  $|\zeta, \xi\rangle \propto e^{\zeta b^\dagger + \xi c^\dagger} |0\rangle$ . El  $|0\rangle$  denota al estado de vacío que es común para los dos tipos de bosones  $b$  y  $c$ .

Para ser más específicos, este nuevo álgebra se puede identificar con el álgebra  $U(2) \equiv \{b^\dagger b, c^\dagger c, b^\dagger c, c^\dagger b\}$  en los hamiltonianos (5.10) y (5.13), ya que en ambos casos el número total de bosones  $N = N_b + N_c$  se conserva. Señalar también que con esta transformación los parámetros de tamaño  $M^{(1)}$  y  $M^{(2)}$  que se introdujeron previamente son iguales a  $2N$ . Por otra parte, en lo que respecta al hamiltoniano no integrable (5.14), el nuevo álgebra definido se puede identificar con  $HW(2)$ , esto es el álgebra de Heisenberg-Weyl de bosones  $b$  y  $c$ . Para este sistema el número total de bosones no se conserva y por consiguiente, el único parámetro de tamaño razonable es el valor  $j$  (por motivos de consistencia se ha escogido  $M^{(3)} = 4j$ ), el cual da idea del tamaño del subsistema (2).

Una vez introducido el nuevo álgebra bosónico y haciendo uso del formalismo de los estados coherentes se puede obtener directamente la superficie de energía  $\langle \zeta, \xi | \hat{H}^{(n)} | \zeta, \xi \rangle / M^{(n)}$  para cada uno de los hamiltonianos  $\hat{H}^{(n)}$ ,

con  $n = 1, 2, 3$ . El mismo resultado se obtiene directamente mediante la sustitución de

$$\frac{c}{\sqrt{M^{(n)}}} = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}, \quad \frac{b}{\sqrt{M^{(n)}}} = \frac{\hat{y} + i\hat{q}}{\sqrt{2}}, \quad (5.18)$$

y las respectivas expresiones hermíticas conjugadas para  $c^\dagger$  y  $b^\dagger$  en el hamiltoniano escalado  $\hat{\mathcal{H}}^{(n)} = \hat{H}^{(n)}/M^{(n)}$ . Merece la pena observar que en las ecuaciones (5.18) se han definido coordenadas  $(x, y)$  y sus correspondientes momentos asociados  $(p, q)$  respectivamente, los cuales satisfacen las relaciones de conmutación canónicas  $[\hat{x}, \hat{p}] = [\hat{y}, \hat{q}] = i/M^{(n)}$ , en donde  $1/M^{(n)}$  desempeñaría el papel de constante de Planck.

Está claro que en el límite termodinámico,  $M^{(n)} \rightarrow \infty$ , los operadores coordenadas y momentos se pueden tratar como variables clásicas que conmutan. Una vez que se realiza esta aproximación los hamiltonianos adoptan la forma general

$$\mathcal{H}^{(n)} = \mathcal{H}_0^{(n)} + \lambda \mathcal{H}'^{(n)} \quad (5.19)$$

para los hamiltonianos clásicos debidamente escalados. El primer término,

$$\mathcal{H}_0^{(n)} = -\frac{R^{(n)}\omega_0}{2} + \frac{\omega_0}{2}(p^2 + x^2) + \frac{\omega}{2}(q^2 + y^2), \quad (5.20)$$

describe el sistema cuando  $\lambda = 0$  y es común a los tres modelos  $n = 1, 2, 3$ , donde la constante aditiva  $R^{(n)}$  viene dada en cada caso por  $R^{(1)} = 2k/M^{(1)}$ ,  $R^{(2)} = 2j/M^{(2)}$  y  $R^{(3)} = 2j/M^{(3)} = 0,5$ . El segundo término se corresponde con el término de interacción y depende del modelo empleado, adoptando en cada caso la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'^{(1)} &= \frac{\sqrt{2R^{(1)} + (p^2 + x^2)}(xy + pq)}{\sqrt{2}}, \\ \mathcal{H}'^{(2)} &= \frac{\sqrt{2R^{(2)} - (p^2 + x^2)}(xy + pq)}{\sqrt{2}}, \\ \mathcal{H}'^{(3)} &= \sqrt{2R^{(3)} - (p^2 + x^2)}\sqrt{2}xy. \end{aligned} \quad (5.21)$$



Las restricciones (5.11) y (5.15) sobre la conservación de  $M^{(1)}$  y  $M^{(2)}$  proporcionan la ecuación

$$p^2 + q^2 + x^2 + y^2 = 1, \quad (5.22)$$

que hace posible eliminar un grado de libertad en ambos modelos integrables. Para tal propósito se fija uno de los momentos a cero, en este caso se tomará  $q = 0$ , y se hace uso de la ecuación (5.22) para fijar la correspondiente coordenada:  $y = \pm\sqrt{1 - p^2 - x^2}$ . En lo que respecta a los estados coherentes, la elección  $q = 0$  se consigue considerando únicamente una fase relativa entre los bosones  $b$  y  $c$ . Obsérvese que esta elección es dinámicamente consistente puesto que la eliminación de la coordenada  $y$  asegura que  $\dot{q} = \partial\mathcal{H}/\partial y = 0$ .

Una vez que se ha realizado la aproximación semiclásica y se ha obtenido la correspondiente superficie de energía en cada modelo, se pueden explorar las transiciones de fase cuánticas en dichos modelos minimizando sus respectivas superficies de energía.

### 5.3.1. Transición de fase en el estado fundamental de los modelos $SU(2)$ y $SU(1,1)$

Con el objetivo de analizar las propiedades del estado fundamental de los modelos  $SU(2)$  y  $SU(1,1)$  en el límite  $\aleph \rightarrow \infty$ , se fijan los momentos  $p$  y  $q$  de las ecuaciones (5.20) y (5.21) a cero, obteniéndose así un potencial  $\mathcal{V}^{(n)} = \mathcal{H}^{(n)}|_{p=q=0}$  ( $n = 1, 2, 3$ ). De hecho, cualquier incremento de  $p$  o  $q$  lleva al sistema lejos del mínimo del hamiltoniano  $\mathcal{H}^{(n)}(p, q, x, y)$  y por consiguiente se correspondería con una excitación del sistema sobre el estado fundamental. La energía que se obtiene mediante la minimización del potencial  $\mathcal{V}^{(n)}(x, y)$  representa una energía estimada del estado fundamental escalado  $\mathcal{E}_0 = E_0/\aleph$ .

En el caso de los sistemas integrables todo se simplifica mucho más. En efecto, para los hamiltonianos  $\hat{H}^{(1)}$  y  $\hat{H}^{(2)}$ , la imposición de que  $p = q = 0$  en la ecuación (5.22) restringe la solución del estado fundamental al círculo unidad  $x^2 + y^2 = 1$ . En particular, para el caso  $SU(1,1)$  ( $n = 1$ ) con  $\omega_0 > \omega$ ,

con un cambio de coordenadas

$$x = \operatorname{sen} \vartheta, \quad y = \operatorname{cos} \vartheta, \quad (5.23)$$

se tiene que el potencial es

$$\mathcal{V}^{(1)} = \mathcal{V}_0^{(1)} + \frac{\Delta\omega}{2} \operatorname{sen}^2 \vartheta + \frac{\lambda}{\sqrt{2^3}} \operatorname{sen}(2\vartheta) \sqrt{2R^{(1)} + \operatorname{sen}^2 \vartheta}. \quad (5.24)$$

Para el modelo integrable  $SU(2)$  ( $n = 2$ ) con  $\omega > \omega_0$ , se redefine el ángulo  $\vartheta$  de tal modo que

$$x = \operatorname{cos} \vartheta, \quad y = \operatorname{sen} \vartheta, \quad (5.25)$$

obteniéndose

$$\mathcal{V}^{(2)} = \mathcal{V}_0^{(2)} + \frac{\Delta\omega}{2} \operatorname{sen}^2 \vartheta + \frac{\lambda}{\sqrt{2^3}} \operatorname{sen}(2\vartheta) \sqrt{2R^{(2)} - \operatorname{cos}^2 \vartheta}. \quad (5.26)$$

En ambos casos es  $\Delta\omega \equiv |\omega_0 - \omega| > 0$ , mientras que  $\mathcal{V}_0^{(1)} = (\omega + R^{(1)}\omega_0)/2$  y  $\mathcal{V}_0^{(2)} = (1 - R^{(2)})\omega_0/2$ .

En el caso del modelo de Dicke, es decir el hamiltoniano no integrable  $SU(2)$ ,  $\hat{H}^{(3)}$ , la restricción (5.22) no se puede aplicar porque el número total de partículas no se conserva. Usando de nuevo coordenadas polares

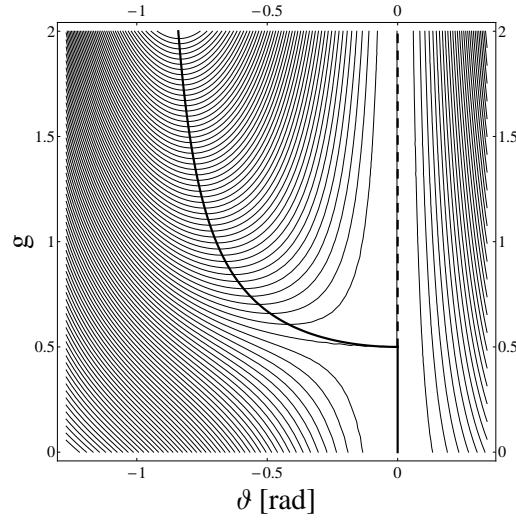
$$x = r \operatorname{cos} \vartheta, \quad y = r \operatorname{sen} \vartheta, \quad (5.27)$$

se llega a que

$$\mathcal{V}^{(3)} = \mathcal{V}_0^{(3)} + \frac{\omega}{2} r^2 + \frac{\lambda}{\sqrt{2}} r^3 \operatorname{sen}(2\vartheta) \sqrt{2R^{(3)} - \operatorname{cos}^2 \vartheta}, \quad (5.28)$$

con  $\mathcal{V}_0^{(3)} = -R^{(3)}\omega/2$ .

Obsérvese que en el límite  $M^{(1)} \rightarrow \infty$  del modelo  $SU(1,1)$  con  $k = \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$  se tiene que  $R^{(1)} \rightarrow 0$ . Por otra parte, en la versión integrable del modelo



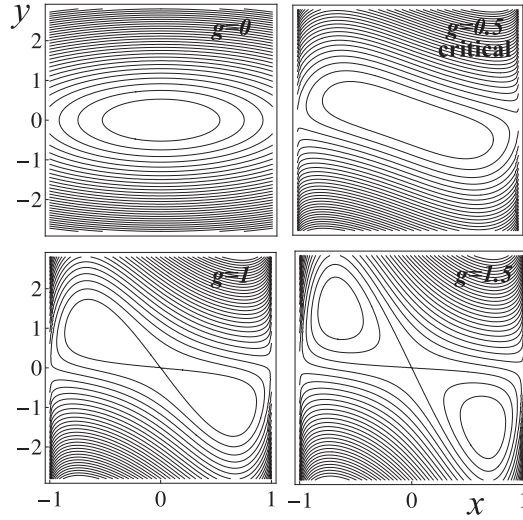
**Figura 5.2:** La energía potencial  $\mathcal{V}^{(1)}(\vartheta)$  y  $\mathcal{V}^{(2)}(\vartheta)$  de los modelos integrables  $SU(1,1)$  y  $SU(2)$  en función de un parámetro de acoplamiento reescalado  $g = \lambda/(\sqrt{2}\Delta\omega)$ . La línea gruesa continua establece la trayectoria que sigue el mínimo del potencial, la línea discontinua indica la posición del punto de silla.

$SU(2)$ , tomando  $M^{(2)} = 4j$  se tiene que  $R^{(2)} = 0,5$ . De hecho, con esta elección, el número total de bosones  $N$  se puede partir en  $N_b$  y  $N_c$  arbitrarios, incluyendo el caso extremo  $(N_b, N_c) = (0, N)$  que corresponde a un vacío de fotones combinado con todos los átomos completamente excitados. Con estos ajustes, las expresiones (5.24) y (5.26) son idénticas salvo constantes aditivas. En la figura 5.2 se pueden observar las superficies de energía potencial  $\mathcal{V}^{(1)}$  y  $\mathcal{V}^{(2)}$ , que son esencialmente una misma superficie de potencial.

El mínimo de los potenciales  $\mathcal{V}^{(1)}$  y  $\mathcal{V}^{(2)}$  para  $\lambda = 0$  se da en  $\vartheta = \vartheta_0(0) = 0$ . De manera equivalente se puede escoger  $\vartheta_0 = \pi$ , lo cual no tiene influencia alguna en las conclusiones que se derivan en lo que sigue. Posteriormente, conforme se aumenta el valor del parámetro de acoplamiento  $\lambda$ , el mínimo  $\vartheta_0(\lambda)$  sigue encontrándose en la misma posición hasta que se alcanza un cierto valor crítico de  $\lambda$ ,

$$\lambda_{c0}^{(1)} = \lambda_{c0}^{(2)} = \frac{\Delta\omega}{\sqrt{2}}. \quad (5.29)$$

Ahora  $\vartheta = 0$  es un punto de silla y el mínimo  $\vartheta_0(\lambda)$  se da para valores negativos, siguiendo la trayectoria



**Figura 5.3:** La superficie de energía potencial  $\mathcal{V}^{(3)}(x, y)$  del modelo de Dicke siendo  $\omega_0 = \omega$ . Los valores del parámetro de acoplamiento reescalado  $g \equiv \lambda/(\sqrt{2}\omega)$  se proporcionan en cada panel (del panel izquierdo superior al panel derecho inferior): 0, 0,5 (valor crítico), 1, y 1,5.

$$\begin{aligned} \sin^2 \vartheta_0 &= \frac{12g^2 - 1 - \sqrt{12g^2 + 1}}{18g^2}, \\ g &\equiv \frac{\lambda}{\sqrt{2}\Delta\omega} \geq \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Esta evolución no analítica representa una transición de fase cuántica de segundo orden. De la ecuación (5.30) para  $g > g_{c0} = 0,5$  se obtiene que  $\vartheta_0(g) \sim \sqrt{g - g_{c0}}$ , lo que significa que el exponente crítico para el parámetro de orden  $\vartheta_0$  (o equivalentemente  $x_0 = \sin \vartheta_0$ ) es igual a  $\frac{1}{2}$ .

Por el contrario, para el hamiltoniano de Dicke  $H^{(3)}$ , la dimensión del sistema no se reduce, así que las propiedades del potencial (5.28) se deben analizar en el plano  $(r, \vartheta) \equiv (x, y)$ . No obstante, la física del modelo es similar a la descrita anteriormente. En efecto, el potencial posee un mínimo en el punto  $(x, y) = (0, 0)$  para  $\lambda$  entre 0 y un valor crítico

$$\lambda_{c0}^{(3)} = \sqrt{\frac{\omega\omega_0}{2}} \quad (5.31)$$

	SU(1,1)		SU(2)	
	$n = 1$		$n = 2$	$n = 3$
	$N_a$ par	$N_a$ impar	Jayn.-Cumm.	Dicke
$\omega, \omega_0$	$\omega_0 - \omega = 1 = \omega$		$\omega - \omega_0 = 1 = \omega_0$	$\omega = 1 = \omega_0$
$M^{(n)}$	$2N_b + N_a$	$2N_b + N_a - 1$	$4j$	$4j$
$R^{(n)}$	$\frac{1}{2M^{(1)}}$	$\frac{3}{2M^{(1)}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$\lambda_{c0}^{(n)}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$		$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$\mathcal{E}_c^{(n)}$	$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$

**Tabla 5.1:** Resumen de los parámetros usados en los tres modelos que se analizan: las frecuencias  $\omega, \omega_0$ , el parámetro de tamaño  $M^{(n)}$ , el parámetro  $R^{(n)}$  de la energía potencial, el acoplamiento crítico de la QPT  $\lambda_{c0}^{(n)}$ , la energía escalada crítica de la ESQPT  $\mathcal{E}_c^{(n)}$ .

( $\lambda_{c0}^{(3)} = \omega/\sqrt{2}$  si  $\omega_0 = \omega$ ), lo que corresponde a un estado de átomos desexcitados y el campo fotónico vacío. En el punto crítico (5.31), el determinante de la matriz Hessiana (matriz constituida por la segundas derivadas de  $\mathcal{V}^{(3)}$  con respecto a sus dos variables) evaluada en el mínimo se hace negativo. Esto significa que el punto  $(x, y) = (0, 0)$  pasa a ser un punto de silla del potencial. En dicho punto, conforme se va aumentando el parámetro de control  $\lambda$ , se observa que aparecen dos mínimos simétricos con  $xy < 0$  (para  $\lambda > 0$ ). Estos mínimos se corresponden con (casi) dobletes de paridad degenerados de las soluciones del estado fundamental que involucran excitaciones tanto del subsistema atómico como fotónico. La distancia  $r_0$  del mínimo al origen aumenta con  $g \equiv \lambda/\sqrt{2\omega\omega_0}$  como  $\sqrt{g - g_{c0}}$  por encima del punto crítico  $g_{c0} = 0,5$ , por lo que se tiene nuevamente una QPT de segundo orden con un parámetro de orden  $r_0$  caracterizado con un exponente crítico de  $\frac{1}{2}$ . La evolución descrita para la superficie de potencial en el modelo de Dicke se puede observar en la figura 5.3. En concreto se representan varias fases de la evolución del potencial  $\mathcal{V}^{(3)}$  para distintos valores de  $g$ .

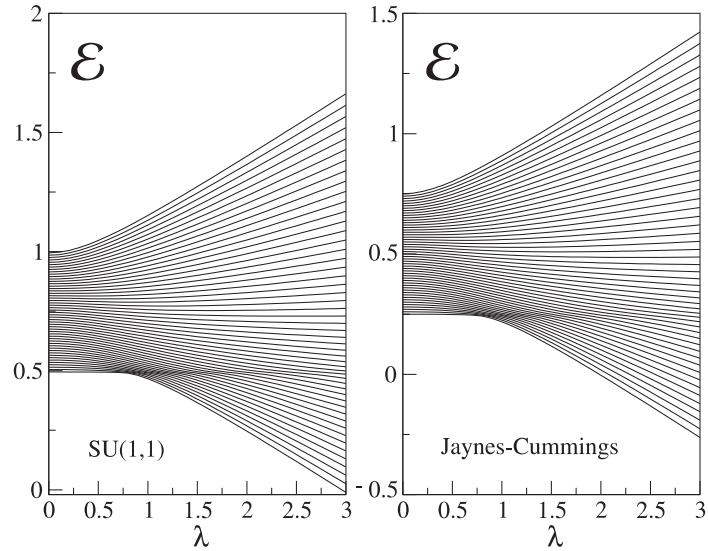
Por último, mencionar que los parámetros usados en los cálculos vienen recogidos en la tabla 5.1, además de otros valores específicos de los modelos usados.

### 5.3.2. Transición de fase de estados excitados en los modelos $SU(2)$ y $SU(1, 1)$

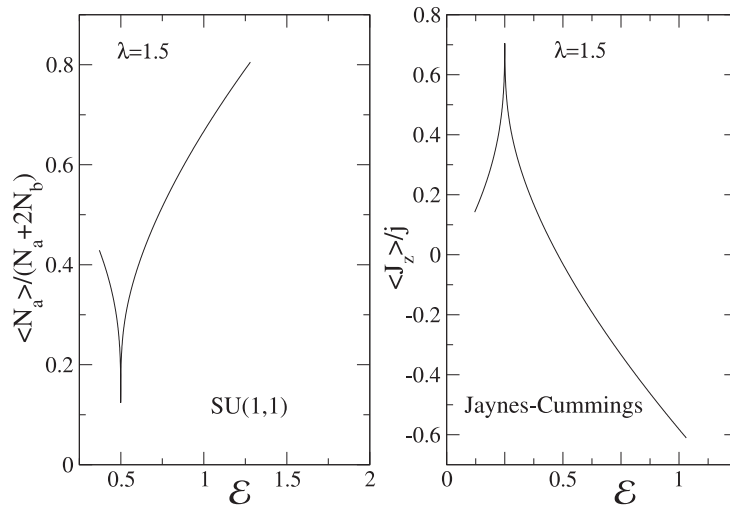
En los tres modelos que se vienen explorando se pueden observar los efectos de la ESQPT. En efecto, ya se vió en la subsección 5.3.1 que las QPTs del estado fundamental se producen cuando se alcanzan los puntos críticos  $\lambda_{c0}^{(n)}$  de las ecuaciones (5.29) y (5.31). Resulta que para  $\lambda > \lambda_{c0}^{(n)}$  la singularidad se propaga a estados excitados tal y como se puede visualizar en las figuras 5.4 y 5.5, aumentando localmente la densidad de estados. En primer lugar centraremos el análisis en los modelos integrables  $\hat{H}^{(1)}$  y  $\hat{H}^{(2)}$ . Finalmente se analizará la ESQPT para el caso no integrable (modelo de Dicke).

Ya se vió que cuando se alcanza el punto crítico en los hamiltonianos integrables  $\hat{H}^{(1)}$  y  $\hat{H}^{(2)}$ , el mínimo global de los potenciales  $\mathcal{V}^{(1)}$  ó  $\mathcal{V}^{(2)}$  pasan a ser punto de silla. Después, para todos los valores  $\lambda > \lambda_{0c}^{(1)}$  ó  $\lambda_{0c}^{(2)}$ , ya no vuelve a cambiar su naturaleza. El punto de silla representa una singularidad de  $\Omega(\mathcal{E}, \lambda)$ , lo que motiva una ESQPT de un carácter más fuerte que viene determinada por un pico infinito en la densidad de niveles semiclásica. Para entender esto, recordemos que la integral en (4.17) para sistemas con  $f = 1$  es igual al período  $\tau$  de la única órbita clásica a la energía  $\mathcal{E}$ , por consiguiente  $\Omega(\mathcal{E}, \lambda) = \tau(\mathcal{E}, \lambda)$ . Si  $\mathcal{E}$  coincide con la energía del punto de silla  $x = 0$  ( $\vartheta = 0$ ), entonces el período se hace infinito porque  $x = p = 0$  es un punto estacionario ( $\dot{x} = \dot{p} = 0$ ) de los hamiltonianos  $\mathcal{H}^{(1)}(p, x)$  y  $\mathcal{H}^{(2)}(p, x)$ . Merece la pena señalar que el mismo tipo de ESQPT se observa en sistemas con un único grado de libertad cuántico que presentan un máximo local en el potencial, como por ejemplo el modelo de Lipkin [8, 113, 127–129] analizado en el capítulo anterior y muchos otros [13, 20].

En la figura 5.4 se muestra un aumento local en la densidad de niveles a la energía crítica  $\mathcal{E}_c^{(n)} = \mathcal{V}_0^{(n)}$  correspondiente al punto de silla de los modelos integrables  $SU(1, 1)$  y modelo de Jaynes-Cummings (modelo integrable  $SU(2)$ ) respectivamente. Los dos paneles representan la evolución del espectro para los citados modelos conforme va aumentando el parámetro de interacción  $\lambda$ , mostrándose claramente la QPT y su extensión a una ESQPT para valores



**Figura 5.4:** Cálculo numérico del espectro de niveles para el modelo  $SU(1,1)$  (panel izquierdo) y para el modelo integrable  $SU(2)$  (panel derecho) siendo  $M^{(1)} = M^{(2)} = 100$  y  $\Delta\omega = 1$ . Las energías escaladas se han obtenido diagonalizando exactamente los hamiltonianos. La ESQPT por encima del punto crítico  $\lambda_{c0} = 0,707$  de la transición del estado fundamental aparece en el colapso de niveles alrededor de las energías críticas  $\mathcal{E}_c^{(1)} = 0,5$  y  $\mathcal{E}_c^{(2)} = 0,25$ , respectivamente.



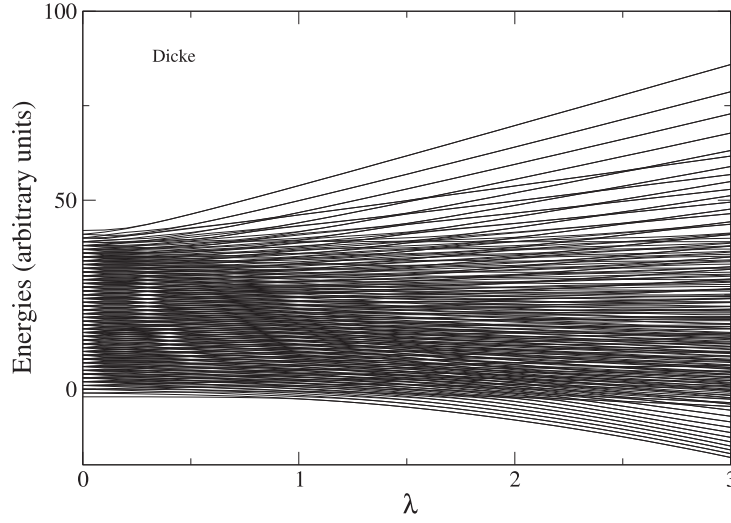
**Figura 5.5:** Cálculo numérico de los valores esperados de  $N_a$  (panel izquierdo) y  $J_z$  (panel derecho) para distintos estados del espectro. Se ha fijado  $\lambda = 1,5$ . Los paneles izquierdo y derecho, respectivamente, se corresponden con el modelo  $SU(1,1)$  y el modelo integrable  $SU(2)$  con  $M^{(1)} = M^{(2)} = 2000$ . La ESQPT se manifiesta por la singularidad localizada a las energías críticas correspondientes.

$\lambda > \lambda_{0c}^{(1)}$  y  $\lambda_{0c}^{(2)}$ . En particular, para  $\Delta\omega = 1$  se tiene que  $\lambda_{c0}^{(1)} = \lambda_{c0}^{(2)} = 0,707$ . Aunque el cálculo se ha realizado para un tamaño finito del sistema, se muestran claramente precursores del comportamiento de la transición de fase.

En la figura 5.5 se visualizan muestras adicionales de la aparición de una ESQPT en los hamiltonianos  $\hat{H}^{(1)}$  y  $\hat{H}^{(2)}$ . En particular se representan los valores esperados de los operadores proporcionales a  $\hat{K}_0 = N_c + k$  y  $\hat{J}_0 = N_c - j$  en estados excitados como función de la energía escalada  $\mathcal{E}$  para un valor fijado de  $\lambda = 1,5$ . En concreto, se considera el operador  $\hat{N}_a/M^{(1)} = (2\hat{K}_0 - \frac{1}{2})/M^{(1)}$  para el modelo  $SU(1,1)$  y  $\hat{J}_0/j$  para el modelo Jaynes-Cummings. Estos dos observables actúan como parámetros de orden de las QPTs en cada modelo: los valores esperados en su estado fundamental pasan de  $\langle \hat{N}_a \rangle_0 = 0$  a  $\langle \hat{N}_a \rangle_0 > 0$  y de  $\langle \hat{J}_0 \rangle_0 = j$  a  $\langle \hat{J}_0 \rangle_0 < j$  cuando  $\lambda$  cruza el punto crítico  $\lambda_{c0}$ . En los dos paneles de la figura 5.5, los respectivos sistemas están por encima del punto crítico de la QPT. La dependencia en energía de los valores esperados de  $\langle \hat{N}_a \rangle_{\mathcal{E}}$  y  $\langle \hat{J}_0 \rangle_{\mathcal{E}}$  es de tipo lambda con una singularidad localizada a la energía  $\mathcal{E}_c^{(n)}$ . Las dos gráficas son análogas salvo una diferencia: mientras que el valor esperado cae abruptamente hasta un cierto mínimo localizado en la energía mínima para el modelo  $SU(1,1)$ , en el modelo  $SU(2)$  se obtiene un máximo. Esto está conectado con una localización singular de la función de onda semiclassical para  $\mathcal{E}_c^{(n)}$  en el punto de silla del potencial, esto es, el punto  $x = 0$  para el modelo  $SU(1,1)$  y  $x = 1$  para el modelo  $SU(2)$  (en ambos casos  $\vartheta = 0$ ). Esto implica que  $\langle \hat{N}_c \rangle_{\mathcal{E}_c} = 0$  para el caso  $SU(1,1)$  (es decir,  $\langle \hat{N}_a \rangle_{\mathcal{E}_c} = 0$  ó  $1$  para sistemas con un número par o impar de átomos respectivamente) y  $\langle \hat{N}_c \rangle_{\mathcal{E}_c} = \frac{1}{2}M^{(2)}$  para el caso  $SU(2)$  ( $\langle \hat{J}_0 \rangle_{\mathcal{E}_c} = \frac{1}{2}M^{(2)} - j$ ). Un efecto similar, explicado por los tiempos de espera infinita de una partícula clásica en un punto estacionario, se conoce de los sistemas unidimensionales con un máximo local en el potencial [107]. Finalmente decir que la energía crítica  $\mathcal{E}_c^{(1)}$  y  $\mathcal{E}_c^{(2)}$  de la ESQPT se corresponde con la energía del estado fundamental cuando  $\lambda$  disminuye hasta los valores críticos  $\lambda_{c0}^{(1)}$  y  $\lambda_{c0}^{(2)}$ . Por tanto, las dos singularidades que se aprecian en la figura 5.5. desaparecen, para valores de  $\lambda$  por debajo de los valores críticos correspondientes.

Para el modelo de Dicke (modelo no integrable) con el hamiltoniano  $\hat{H}^{(3)}$ , la superficie de potencial (5.28) presenta un punto de silla en  $(x, y) = (0, 0)$ .





**Figura 5.6:** Cálculo numérico del espectro de niveles para el modelo no integrable  $SU(2)$ ,  $H^{(3)}$ , con  $j = 2$ . Las energías se han obtenido diagonalizando exactamente el hamiltoniano con  $N_{\text{trunc}} \approx 40$ . Se muestran las energías absolutas en unidades de  $\omega = \omega_0$ . El aumento en la densidad en la energía  $E = -2$  [correspondiente con el punto de silla del potencial (5.28)] indica una ESQPT continua en el límite termodinámico.

Esto está relacionado con una dependencia no analítica del volumen del espacio de las fases (y la densidad de niveles) con la energía escalada, aunque la ESQPT es de un tipo más suave que los vistos en los otros modelos. Esto es consecuencia directa de que el espacio de fases es, dimensionalmente hablando, mayor para el modelo de Dicke. En concreto, para  $\lambda > \lambda_{c0}^{(3)}$  la densidad de niveles exhibe un crecimiento anómalo con una derivada infinita en el punto  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c^{(3)}$ , que coincide con la energía del punto de silla del potencial  $\mathcal{V}_c^{(3)}$  [20]. La ESQPT que se obtiene en este modelo es continua (pero no se puede clasificar según el criterio de Erhenfest), a pesar de que sus precursores de tamaño finito se parecen mucho a los de una transición de fase de primer orden (la densidad de niveles se parece a una función tipo escalón).

El aumento de la densidad de niveles en el modelo de Dicke se puede observar en la figura 5.6, en la que se muestra el espectro del sistema con  $j = 2$  conforme se varía el parámetro de acoplamiento  $\lambda$ . Ya se observa un precursor del efecto de la ESQPT en la energía  $E_c^{(3)} = M^{(3)}\mathcal{E}_c^{(3)} = -1$  incluso para un valor del momento angular tan pequeño. De hecho, es bien visible

en el espectro por encima de  $\lambda_{c0}^{(3)} = 0,707$  (para  $\omega = \omega_0 = 1$ ). Puesto que en principio el espacio de Hilbert de los estados del modelo de Dicke es infinito, ya sabemos que hay que establecer una truncación, un cut-off en el número de fotones. Señalar entonces que los efectos de este truncamiento sobre el espacio de Hilbert es relevante únicamente para la zona de alta energía del espectro. De hecho, los niveles de energía más altos de la figura 5.6 no están convergidos.

### 5.3.3. Estudio de los exponentes críticos de $\langle \hat{J}_z \rangle$ para el modelo $SU(2)$

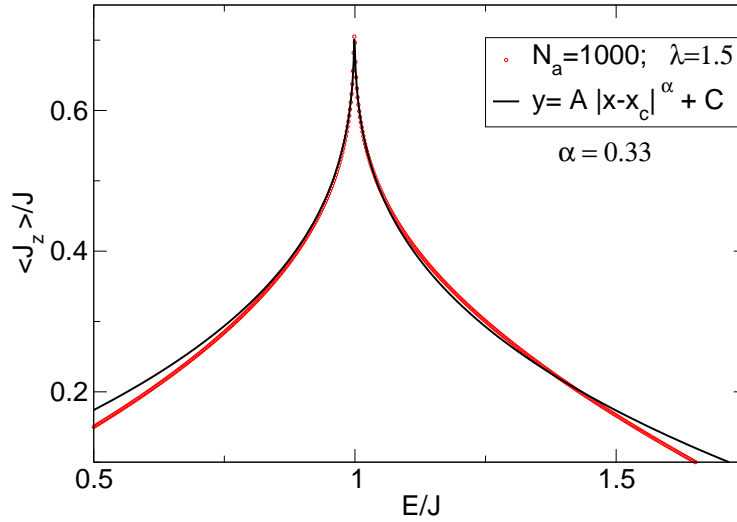
Lo que nos interesa ahora es demostrar la dependencia singular del parámetro de orden con respecto a la energía alrededor del valor crítico  $E_c$  (energía sin escalar). Aquí centramos el estudio únicamente para el modelo de Dicke y de Jaynes-Cummings. En ambos casos, la dependencia del parámetro de orden con respecto a la energía del sistema cerca del punto crítico viene dado por

$$\langle \hat{J}_z \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle_c + A |E - E_c|^\alpha, \quad (5.32)$$

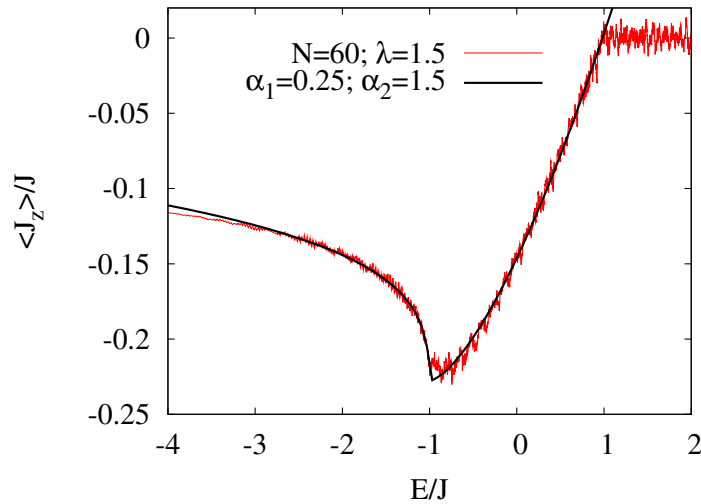
el cual está caracterizado, aparte de los valores de  $E = E_c$ ,  $\langle \hat{J}_z \rangle_c$  y un coeficiente  $A$ , por el exponente crítico  $\alpha$ .

En la figura 5.7 se muestran los resultados para el modelo de Jaynes-Cummings con 1000 átomos, siendo  $\lambda = 1,5$ . Los puntos rojos son los resultados numéricos, mientras que la línea negra continua muestra el mejor ajuste con la ecuación (5.32) a dichos puntos numéricos. Se obtiene un exponente crítico de  $\alpha = 0,33$ .

Un resultado similar se obtiene para el modelo de Dicke, el cual puede verse en la figura 5.8. Para ello se ha considerado un sistema con 60 átomos para  $\lambda = 1,5$ . De nuevo, los puntos son los resultados numéricos y la línea continua el ajuste con la ecuación (5.32). El número total de átomos es mucho más pequeño que el usado en el cálculo del modelo de Jaynes-Cummings debido a que se necesita un valor elevado de  $N_{\text{trunc}}$  para conseguir



**Figura 5.7:**  $\langle \hat{J}_z \rangle$  en función de la energía para el modelo de Jaynes-Cummings. Los cálculos se han realizado para  $\omega_0 = 1$ ,  $\omega = 2$ ,  $\lambda = 1,5$ , and  $J = 500$ . La línea negra continua representa el mejor ajuste de los datos numéricos (puntos rojos) según la ecuación (5.32).



**Figura 5.8:**  $\langle J_z \rangle$  en función de la energía para el modelo de Dicke. Los cálculos se han realizado para  $\omega_0 = \omega = 1$ ,  $\lambda = 1,5$ ,  $J = 30$  y los resultados numéricos se han suavizado. En rojo se tienen los datos numéricos y en negro el mejor ajuste a la ecuación (5.32).

la convergencia en los cálculos por encima de la energía crítica. En particular, los resultados para  $E/J > 1$  (la zona plana de dependencia numérica en la figura 5.8) *no* están convergidos.

Si se comparan las figuras 5.7 y 5.8 se puede apreciar que los resultados para el modelo de Dicke están más difusos que los que se obtienen para el modelo de Jaynes-Cummings. Los primeros exhiben unas fluctuaciones considerables alrededor de una dependencia suave a pesar de que los datos originales fueron sometidos a un proceso de suavizado por el método de las medias móviles: cada valor de  $\langle \hat{J}_z \rangle / J$  que se muestra en la figura 5.8 es el valor medio para 20 niveles de energía consecutivos centrados en la energía dada. Otra particularidad del modelo de Dicke es que el parámetro de orden viene descrito por *dos* exponentes críticos  $\alpha_1 = 0,25$  para  $E < E_c$  y  $\alpha_2 = 1,5$  para  $E > E_c$ . A pesar de estas diferencias, la figura 5.8 muestra una dependencia cualitativa similar a la de la figura 5.7, demostrando de este modo la existencia de una singularidad en el modelo de Dicke en la energía crítica  $E_c/J = -1$ . Se concluye por tanto que para  $\lambda > \lambda_c$  ambos modelos presentan una ESQPT a la energía crítica  $E_c = E_0^{\text{norm}}$ . Dicha energía crítica acaba con el dominio de la fase superradiante a bajas temperaturas [120].

## 5.4. Dinámica del *quench*

En esta sección se introduce el fenómeno conocido como *quantum quench* como herramienta básica para detectar la existencia de una transición de fase para estados excitados (ESQPT). En particular, se estudia el proceso de relajación que experimenta un sistema cuando se le somete a un *quantum quench*. Nuestro objetivo será analizar qué efectos induce la presencia de una ESQPT en el sistema sobre el mismo proceso de relajación. Como se verá a continuación, la expresión matemática que describe dicho proceso de relajación es formalmente análoga a la del factor de decoherencia que se introdujo en el capítulo precedente. De modo que la conjetura que se realizó en el capítulo anterior podrá ser comprobada para modelos no integrables, como es el caso del modelo de Dicke.

Un *quantum quench* (QQ) es un cambio abrupto, *diabático*, en el tiempo de uno de los parámetros de control del sistema, pasando éste de un valor inicial  $\lambda_1$  a otro final  $\lambda_2$  de un modo casi instantáneo. Este cambio súbito en el parámetro de control del sistema  $\lambda$  viene acompañado de un proceso cuántico de relajación dependiente del sistema específico analizado. En un sistema cerrado, este proceso se corresponde con la preparación del sistema en el estado fundamental  $|0\rangle_{\lambda_1}$  del hamiltoniano inicial  $\hat{\mathcal{H}}[\lambda_1]$ , al cual se le permite evolucionar en el tiempo de acuerdo a un hamiltoniano final  $\hat{\mathcal{H}}[\lambda_2]$ . Este proceso es particularmente interesante si aparece algún cambio cualitativo en el estado del sistema entre  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ . Este es el caso en la referencia [130], en donde se hace que un gas de átomos bosónicos cruce un punto crítico de la región superfluida a la región aislante Mott del diagrama de fases. Trabajos teóricos pioneros en este campo aparecieron a finales de los años 60 [131], pero a principio de este siglo ha habido un creciente interés en estos temas debido a estudios experimentales [132, 133]. Para una lista completa de referencias relacionadas con el QQ véase la referencia [134].

Además, los efectos de la QPT y del QQ se pueden relacionar. En efecto, si se parte de un estado inicial antes del *quench* que coincida con un estado arbitrario del sistema próximo a una QPT, la dinámica después del *quench* depende sustancialmente de si el cambio en el parámetro de control lleva al sistema a otra fase cuántica o, eventualmente, lo sitúa en la región crítica entre las dos fases [134–137]. Experimentalmente, lo más cómodo es tomar como estado inicial el estado fundamental del sistema, realizar el QQ y dejarlo relajarse.

#### 5.4.1. Probabilidad de supervivencia y distribución de energía

Los hamiltonianos que se han introducido en la sección 5.1 poseen la estructura común de la ecuación (5.19), que es  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{\mathcal{H}}'$  siempre y cuando se omita el superíndice  $n$  que hace referencia a cada modelo en concreto. Recordemos que  $\hat{\mathcal{H}}_0$  y  $\hat{\mathcal{H}}'$  representan respectivamente el término libre y el de interacción en el modelo, y  $\lambda$  es un parámetro de control

adimensional. Hay que recalcar que se está trabajando con el hamiltoniano escalado  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}/\aleph$ , pero que en general  $[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}'] \neq 0$  puesto que los sistemas son de tamaño finito, es decir  $\aleph$  finito. Por otra parte, a los hamiltonianos mencionados se les pueden aplicar técnicas perturbativas con la misma perturbación  $\hat{\mathcal{H}}'$  para todos los puntos iniciales  $\lambda_1$ , tal y como se desprende de la expresión  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda_2) = \hat{\mathcal{H}}(\lambda_1) + \Delta \hat{\mathcal{H}}'$  siendo  $\Delta = \lambda_2 - \lambda_1$ .

Supongamos que el sistema se encuentra inicialmente en uno de los autoestados  $|\psi_i(\lambda_1)\rangle \equiv |\psi_1\rangle$  de  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda_1) \equiv \hat{\mathcal{H}}_1$  con energía  $E_1(\lambda_1)/\aleph \equiv \mathcal{E}_1$ . A efectos prácticos se considerará más adelante que el estado inicial  $|\psi_1\rangle$  coincide con el estado fundamental  $|\psi_0(\lambda_1)\rangle$ , pero el formalismo se extiende fácilmente para el caso general. Para el instante  $t = 0$ , el valor del parámetro de acoplamiento cambia repentinamente de  $\lambda_1$  a  $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta$ . Ahora el estado  $|\psi_1\rangle$  no es autoestado del nuevo hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda_2) \equiv \hat{\mathcal{H}}_2$  y comienza a evolucionar.

La evolución después de este cambio repentino en  $\lambda$  (*quench*) se puede analizar por medio de la probabilidad de supervivencia  $p_1(t) = |a_1(t)|^2$ , donde

$$a_1(t) = \langle \psi_1 | e^{-i\hat{\mathcal{H}}_2 t} | \psi_1 \rangle = \int \underbrace{|\langle \mathcal{E}_2 | \psi_1 \rangle|^2}_{\omega_1(\mathcal{E}_2)} e^{-i\mathcal{E}_2 t} d\mathcal{E}_2 \quad (5.33)$$

es una amplitud que describe el decaimiento y reaparición del estado inicial  $|\psi_1\rangle$  para  $t > 0$ . Esta expresión capta, en general, todo el proceso de decaimiento y ha sido estudiada en multitud de contextos, como por ejemplo en análisis de la fidelidad o Eco de Loschmidt [138]. De hecho, se debe observar que la expresión formal de  $a_1(t)$  es análoga a la del factor de decoherencia introducida en el capítulo anterior. También, es importante señalar que el uso de un hamiltoniano escalado  $\hat{\mathcal{H}}_2$  en la ecuación (5.33) es equivalente a realizar la transformación en tiempo  $t \rightarrow t/\aleph$  en la expresión con un hamiltoniano  $\hat{H}_2$  que no esté escalado. Con el objetivo de analizar  $a_1(t)$ , lo más natural es desarrollar el estado inicial  $|\psi_1\rangle$  en términos de los autoestados  $|\mathcal{E}_i\rangle \equiv |\mathcal{E}_i(\lambda_2)\rangle$  del hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}_2$  (con  $i = 1, 2, \dots$  enumerando los

autovalores discretos  $\mathcal{E}_{2i}$ ),

$$|\psi_1\rangle = \sum_i \underbrace{\langle \mathcal{E}_{2i} | \psi_1 \rangle}_{c_i} |\mathcal{E}_{2i}\rangle, \quad (5.34)$$

la probabilidad de supervivencia adopta entonces la forma

$$p_1(t) = \sum_i |c_i|^4 + 2 \sum_{i>j} |c_i|^2 |c_j|^2 \cos[(\mathcal{E}_{2i} - \mathcal{E}_{2j})t]. \quad (5.35)$$

Tal y como se indicó en la ecuación (5.33), la amplitud de supervivencia  $a_1(t)$  también se puede escribir como la transformada de Fourier de la distribución de energía  $\omega_1(\mathcal{E}_2) \equiv |\langle \mathcal{E}_2 | \psi_1 \rangle|^2$  del estado inicial en la base de autoestados de  $\hat{\mathcal{H}}_2$ . La expresión de dicha distribución en energía viene dada por

$$\omega_1(\mathcal{E}_2) \equiv \sum_i |c_i|^2 \delta(\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_{2i}). \quad (5.36)$$

Las funciones  $p_1(t)$  en la ecuación (5.35) y  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$  en la ecuación (5.36) proporcionan una información equivalente sobre el proceso de relajación que induce el *quench*, puesto que se expresan en términos de energías discretas  $\mathcal{E}_{2i}$  y de las correspondientes probabilidades de ocupación  $|c_i|^2$ .

A nivel de cálculo, es más conveniente aproximar la expresión discreta (5.36) de la distribución de energía  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$  por una forma suavizada  $\bar{\omega}_1(\mathcal{E}_2)$ . Ésta se obtiene reemplazando las funciones  $\delta$  por perfiles Gaussianos centrados en las autoenergías  $\mathcal{E}_{2i}$ , con lo que se obtiene la expresión

$$\bar{\omega}_1(\mathcal{E}_2) = \sum_i |c_i|^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} \exp\left[-\frac{(\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_{2i})^2}{2\sigma_i^2}\right], \quad (5.37)$$

en donde las anchuras  $\sigma_i$  se eligen convenientemente teniendo en cuenta la densidad local de estados en la correspondiente zona del espectro del hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}_2$ . El objetivo que se persigue con este proceso de suavizado es superar el carácter discreto de  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$  pero de tal manera que se pierda la mínima información posible acerca de su comportamiento local. Por consiguiente se establece como anchura para cada perfil Gaussiano el espaciado entre los

niveles  $(i + 1)$ -ésimo e  $i$ -ésimo, así  $\sigma_i = \mathcal{E}_{2(i+1)} - \mathcal{E}_{2i}$ .

Aunque tanto la forma discreta (5.36) como la suavizada (5.37) contienen básicamente la misma información, ambas proporcionan dos métodos de visualización de la distribución de energía. En el primer caso, basado en la forma discreta de  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$ , los valores de  $|c_i|^2$  se representan frente  $\mathcal{E}_{2i}$  en forma de un gráfico de puntos (puntos individuales que vienen enumerados por el índice del autovalor  $i$ ). El otro método, muestra la distribución suavizada  $\bar{\omega}_1(\mathcal{E}_2)$  como una función continua de la energía  $\mathcal{E}_2$ . Mientras que en el primer método se muestra esencialmente el promedio de  $|c_i|^2$  en un intervalo de energía dado de manera independiente del número de estados, equivalentemente densidad de estados, presentes en dicho intervalo, el segundo método contiene de manera intrínseca un peso dependiente de la densidad de estados. En lo que sigue se usarán ambos métodos y se compararán los resultados proporcionados por ambos con la evolución temporal de la probabilidad de supervivencia  $p_1(t)$ , calculada de manera exacta por medio de la ecuación (5.35).

### 5.4.2. Análisis del *quench* crítico

En capítulo 4 ya se sugirió que si el sistema experimenta una transición de fase de estado excitado para  $N \rightarrow \infty$  se puede esperar un comportamiento anómalo para la distribución de energía, pero no se mostró ninguna figura al respecto. Puesto que la influencia que tiene acoplar un qubit a un baño bosónico es análogo a inducir una QQ sobre el mismo baño, aquí completamos ese aspecto mostrando formas específicas de la distribución de energía  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$  y  $\bar{\omega}_1(\mathcal{E}_2)$ . De hecho, en el capítulo precedente ya se vió que cuando se cruza una ESQPT, es decir, se cruza la energía crítica a la que se produce la ESQPT, se obtiene un comportamiento anómalo para el factor de decoherencia. El mismo fenómeno se esperará observar por tanto para la probabilidad de supervivencia una vez que se realice el QQ.

Es relativamente sencillo estimar cual es el cambio en el parámetro de acoplamiento  $\lambda$ ,  $\Delta = \lambda_2 - \lambda_1$ , para que tal proceso de relajación anómala se produzca. Para ello, recordemos que el valor medio  $\bar{\mathcal{E}}_2$  de la distribución de



energía  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$  y de  $\bar{\omega}_1(\mathcal{E}_2)$  (ambas expresiones dan el mismo resultado) viene dado por  $\bar{\mathcal{E}}_2 = \langle \psi_1 | \mathcal{H}_2 | \psi_1 \rangle$  y que los hamiltonianos se pueden expresar como

$$\hat{\mathcal{H}}(\lambda_2) = \hat{\mathcal{H}}(\lambda_1) + \Delta \hat{\mathcal{H}}', \quad (5.38)$$

de modo que

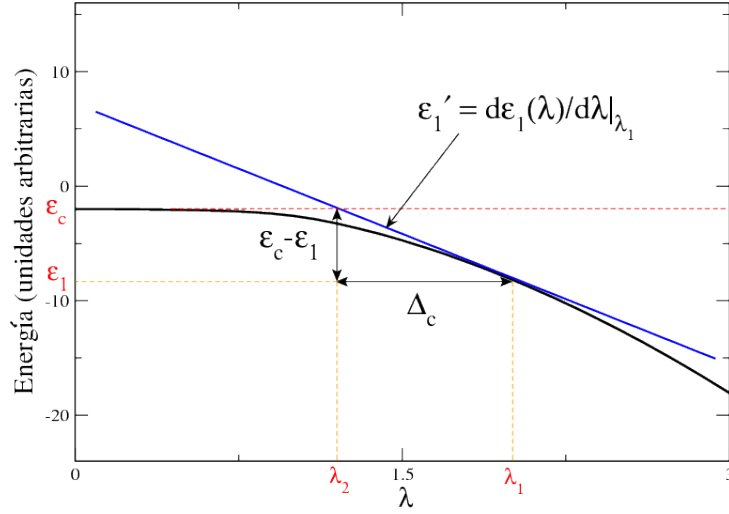
$$\bar{\mathcal{E}}_2 = \mathcal{E}_1 + \Delta \underbrace{\langle \psi_1 | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_1 \rangle}_{\mathcal{E}'_1}. \quad (5.39)$$

El *quench crítico*  $\Delta_c$  para un estado inicial es aquel para el que el promedio de energía  $\bar{\mathcal{E}}_2$  coincide con el valor crítico  $\mathcal{E}_c(\lambda_2)$ , por tanto

$$\Delta_c = \frac{\mathcal{E}_c(\lambda_1 + \Delta_c) - \mathcal{E}_1}{\mathcal{E}'_1}. \quad (5.40)$$

Merece la pena recordar que el alcance real de la influencia de la ESQPT sobre el *quench* cubre un intervalo más amplio que el de los valores de  $\Delta$  alrededor de  $\Delta_c$ , dependiendo de la anchura de la distribución  $\omega_1(\mathcal{E}_2)$  o  $\bar{\omega}_1(\mathcal{E}_2)$  y también de los efectos de la presencia de la transición de fase debidos al valor finito del tamaño del sistema  $\aleph$ . Sin embargo, la expresión anterior (5.40) proporciona una buena estimación del punto central del intervalo, donde la dinámica del *quench* se espera que presente fuertes precursores de la ESQPT.

Finalmente, mencionar que de la aplicación del teorema de Hellman-Feynman a la ecuación (5.39) resulta que  $\langle \psi_1 | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_1 \rangle \equiv \mathcal{E}'_1 = d\mathcal{E}_i(\lambda)/d\lambda|_{\lambda=\lambda_1}$ . Esto proporciona una interpretación gráfica de la ecuación (5.40) que se muestra de manera esquemática en la figura 5.9. El cambio en el parámetro de acoplamiento,  $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$ , se asocia con el *quench crítico* si la tangente en el nivel inicial de energía  $\mathcal{E}_i(\lambda)$  en  $\lambda = \lambda_1$  cruza la curva crítica  $\mathcal{E}_c(\lambda)$  en  $\lambda = \lambda_2$ . Obsérvese que el valor final en el parámetro de acoplamiento correspondiente con el *quench crítico*  $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta_c$ , difiere en general del valor crítico  $\lambda_{c0}$  de la transición de fase del estado fundamental.



**Figura 5.9:** Determinación gráfica del *quench* crítico  $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$  para un estado inicial de partida: el valor de  $\Delta_c$  viene dado por la intersección de la tangente  $\mathcal{E}'_1$  con la “curva” crítica  $\mathcal{E}_c$ .

## 5.5. Resultados de la dinámica del *quench*

En la sección 5.4 se analizó la dinámica del *quench* y se estableció su conexión con la presencia de una ESQPT en los sistemas. En esta sección se presentan los resultados numéricos de dicho análisis en los diferentes modelos estudiados, tanto para los modelos integrables como para el modelo no integrable.

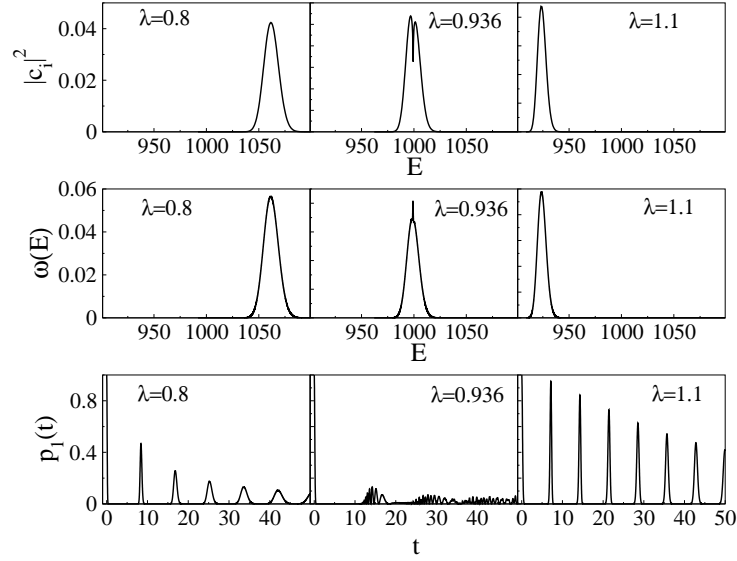
A continuación se discuten los resultados para las distribuciones en energía (5.36) y (5.37) y la correspondiente probabilidad de supervivencia basada en la ecuación (5.33). Señalar que los cálculos se han realizado para la energía  $E = M^{(n)}\mathcal{E}$ , donde  $\mathcal{E}$  es la energía escalada.

### 5.5.1. Resultados para los modelos integrables $SU(1, 1)$ y Jaynes-Cummings

En la figura 5.10 se muestran los resultados para tres *quenches* en el modelo  $SU(1, 1)$  con  $2N_b + N_a = 2000$  (así  $N_a$  es par). El estado inicial se identifica con el estado fundamental del sistema con  $\lambda = \lambda_1 = 1,5$  y el

parámetro final respectivo ( $\lambda_2$ ) aparece separadamente en cada panel. En los paneles de la primera fila (fila superior) se representa  $|c_i|^2$  como función de los autovalores  $E_{2i}$  y en los paneles de la fila central se tiene  $\omega_1(E_2)$  como función de los mismos autovalores. Ambos paneles son complementarios, tal y como se discutió en la sección anterior. Obsérvese que debido a la densidad de estados en el sistema, la gráfica de  $|c_i|^2$  da la sensación de ser una curva continua pero en realidad es una nube de puntos. Los paneles de izquierda a derecha se corresponden con un *quench* por encima de la energía crítica, en la energía crítica y por debajo de la energía crítica respectivamente. Para el presente caso, y según los parámetros establecidos, esta energía crítica coincide con  $E_c = 1000$ . Es destacable que la distribución de  $|c_i|^2$  para los *quenches* que no sitúan al sistema en la energía crítica  $E_c$  (paneles de la izquierda y de la derecha) exhiben sólo un pico centrado en la energía  $\bar{E}_2$  que depende del valor de  $\lambda_2$ , mientras que para el *quench* crítico, el valor de  $\lambda_2 = 0,936$  (panel medio) induce un comportamiento más complejo. En este caso se observan dos picos en la figura de  $|c_i|^2$ , estando el mínimo que separa a los dos picos localizado exactamente en la energía a la que se produce la ESQPT.

El efecto crítico del *quench* cuando  $\lambda_2 = 0,936$  se puede visualizar también en las otras filas de los paneles de la figura 5.10. En la segunda fila se presenta la distribución suavizada de  $\bar{\omega}_1(E_2)$  dada por la ecuación (5.37). Existe una diferencia clara con respecto a la primera fila: en el panel medio, donde la primera fila muestra un mínimo en la energía crítica, en la segunda fila se observa un máximo muy picudo en la misma energía. Esto es como consecuencia de la distinción entre los dos métodos de visualizado, basados en las distribuciones de energía  $\omega_1(E_2)$  y  $\bar{\omega}_1(E_2)$  ya discutidas en la sección 5.4.1. También se sabe de la sección 5.3.2 que existe un incremento local en la densidad de niveles alrededor de la energía crítica  $E \approx E_c$  (véase la figura 5.4) relacionada con la divergencia en los períodos de la trayectoria clásica cuando se pasa al punto de silla. Esto lleva a un incremento considerable en la distribución  $\bar{\omega}_1(E_2)$  a pesar del hecho de que los valores individuales de  $|c_i|^2$  son más pequeños en la región crítica, tal y como se puede apreciar en la fila superior de la figura 5.10.



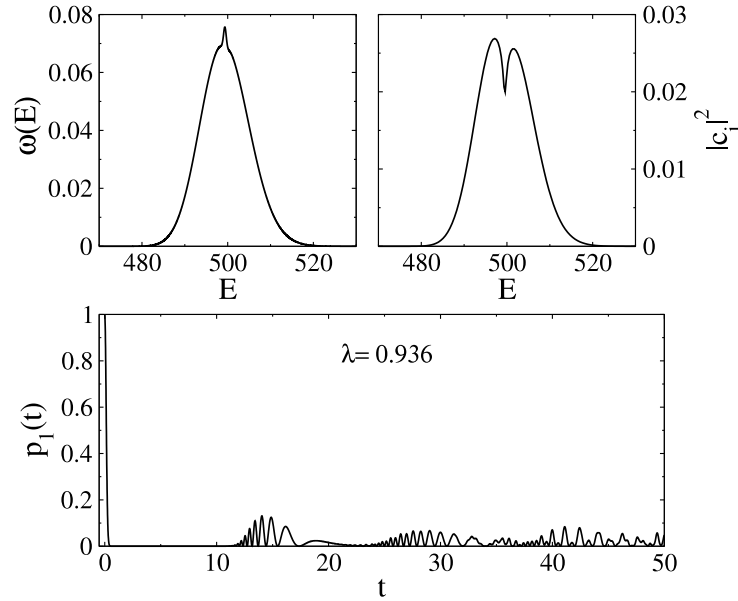
**Figura 5.10:** Distribuciones de energía y probabilidades de supervivencia para tres *quantum quenches* en el modelo  $SU(1, 1)$  ( $M^{(1)} = 2000$ ). El estado inicial es el estado fundamental para  $\lambda_1 = 1,5$  y el valor final del parámetro de acoplamiento  $\lambda_2$  viene especificado en cada panel. Los paneles de la izquierda y los de la derecha en cada fila se corresponden con *quenches* por encima y por debajo de la energía crítica, respectivamente, mientras que los paneles centrales representan un *quench* en la región crítica. La fila superior: la distribución de energía de las probabilidades  $|c_i|^2$ , ver la ecuación (5.36). Fila central: La distribución de energía suavizada según la ecuación (5.37). Fila inferior: la probabilidad de supervivencia dada por la ecuación (5.33).

En los paneles de la última fila de la figura 5.10 se muestra la probabilidad de supervivencia  $p_1(t)$  en función del tiempo para los tres *quenches* discutidos previamente. De nuevo se observan unos patrones similares a los ya observados en los paneles anteriores para los *quenches* no críticos (paneles de la izquierda y de la derecha). La probabilidad de supervivencia viene dada por unas oscilaciones regulares amortiguadas para estos casos. El tiempo característico  $\tau$  del decaimiento de la envolvente está relacionado con la anchura total  $\Delta E$  del pico asociado en la energía de distribución por medio del principio de incertidumbre de Heisenberg  $\tau \propto 1/\Delta E$ , mientras que la frecuencia y la forma particular de las oscilaciones dependen de la energía media y la estructura de la distribución en energía. Para el *quench* crítico (panel medio), la probabilidad de supervivencia se comporta de un modo completamente diferente a los casos no críticos. Hay un decaimiento

inicial muy abrupto seguido por pequeñas oscilaciones alrededor de la región  $p_1(t) \approx 0$ , evitándose las recurrencias amortiguadas que se observan en los otros paneles. Este tipo de dinámica se relaciona con la forma modificada de la distribución de energía que se muestra en los paneles superiores de la figura 5.10. Además, este fenómeno ya es familiar desde que apareció en el capítulo anterior cuando se analizaba la decoherencia que inducía un entorno bosónico sobre un qubit. A partir de estos resultados, se interpreta que la diferencia observada en el carácter de la relajación que induce el *quench* sobre el sistema es una consecuencia dinámica importante de la ESQPT.

Resultados análogos se obtienen para el modelo integrable  $SU(2)$  o Jaynes-Cummings. En la figura 5.11 se muestran las mismas magnitudes que en la figura anterior, pero esta vez sólo se muestran los cálculos en el *quench* crítico. El cálculo se ha realizado con  $j = 500$  ( $M^{(2)} = 2000$ ), así que la energía crítica de la ESQPT es  $E_c = 500$ . Una vez más, el estado inicial coincide con el estado fundamental para  $\lambda_1 = 1,5$  y el valor del parámetro de acoplamiento final es  $\lambda_2 = 0,936$ . Dicho valor se corresponde con el caso crítico y todos los cálculos se han realizado para ese valor de  $\lambda$ . La distribución de energía  $\omega_1(E_2)$  (panel izquierdo) y los valores para  $|c_i|^2$  (panel derecho) se presentan en los paneles superiores de la figura 5.11. En el panel de abajo se tiene la probabilidad de supervivencia  $p_1(t)$ . Esencialmente se observa el mismo comportamiento que en las columnas centrales de la figura 5.10. Este hecho no es sorprendente en absoluto porque ambos modelos presentan una estructura similar.

En resumen, es evidente que la presencia que una transición de fase para estados excitados en el espectro de los dos modelos integrables analizados tiene un importante impacto sobre el proceso de relajación que induce el *quench* sobre el sistema. Se observa que la probabilidad de supervivencia decae y no aparecen recurrencias en una escala temporal media para los *quantum quenches* que inducen al sistema a la energía crítica de la ESQPT. Este comportamiento proporciona un fuerte respaldo a la conjetura que se propuso en conexión con el modelo de Lipkin en el capítulo anterior [113, 129].



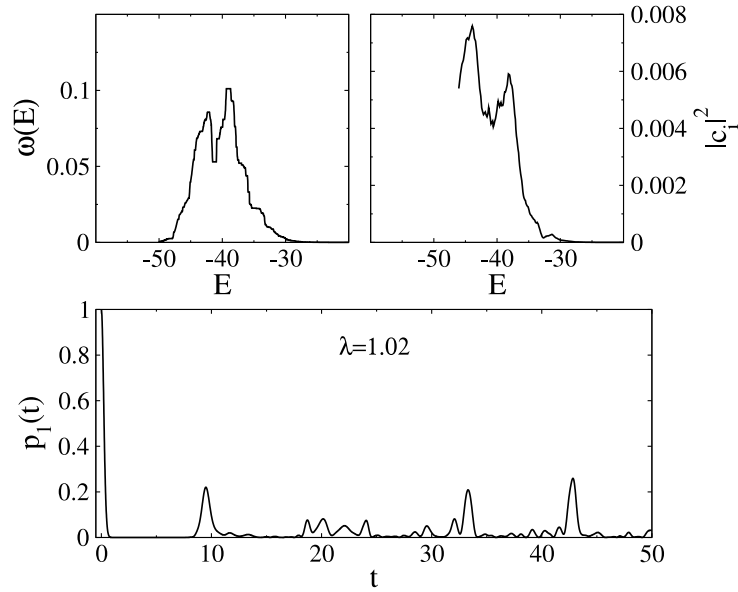
**Figura 5.11:** Las mismas magnitudes que en la figura 5.10, pero únicamente se muestra el “quench” crítico para el modelo de Jaynes-Cummings con  $M^{(2)} = 2000$ .

### 5.5.2. Resultados para el modelo de Dicke

El modelo de Dicke, que como sabemos es un modelo no integrable, presenta un comportamiento más complejo que los modelos integrables discutidos hasta ahora. Además, desde el punto de vista numérico también presenta más dificultades.

En la figura 5.12 se muestran los resultados para el *quench* crítico en este modelo. El sistema viene dado por  $j = 40$ , es decir un sistema de 80 átomos, y por la condición de resonancia  $\omega_0 = \omega = 1$ . En este caso particular, la energía absoluta que se asocia a la ESQPT es  $E_c = -40$ . Al igual que en los casos anteriores, el estado inicial antes de realizar el *quench* es el estado fundamental del sistema para  $\lambda_1 = 1,5$ , mientras que el valor final del parámetro de acoplamiento correspondiente con el *quench* crítico es  $\lambda_2 = 1,02$ . Para facilitar la comparación con el modelo de Jaynes-Cummings, la estructura de la figura 5.12 es la misma que la de la figura 5.11.

Los cálculos para el modelo de Dicke siempre son más problemáticos, porque recordemos que como consecuencia de la dimensión infinita del espacio



**Figura 5.12:** Las mismas magnitudes que en la figura 5.11, pero para el modelo no integrable de Dicke con  $j = 40$ . La curva en el panel superior derecho aparece cortada en la zona de bajas energías como consecuencia del proceso adicional de suavizado al que se han sometido los datos.

de Hilbert en el modelo de Dicke, es necesario prestar una atención especial a la convergencia en los cálculos numéricos. En nuestro caso, la estabilidad de los resultados frente a la truncación del espacio de Hilbert se ha comprobado variando el parámetro de cutoff  $N_{\text{trunc}}$  para el número de bosones  $b$  (fotones) hasta que la convergencia se alcanza para la magnitud deseada. Está claro que el valor óptimo del parámetro de cutoff que satisfaga un cierto criterio de convergencia dependerá de las magnitudes que se estén estudiando y en particular del rango de energía relevante para cada situación. En los cálculos que se presentan en la figura 5.12 se han incluido todos los estados del campo de fotones hasta  $N_b = N_{\text{trunc}} = 220$ . Las dimensiones que manejamos con tan alto número de partículas están en el límite de nuestras capacidades de computación.

El comportamiento que se observa en la figura 5.12 es parcialmente diferente al observado para las mismas magnitudes en la figura 5.11 como consecuencia de la no integrabilidad del modelo de Dicke. En particular, la distribución de energía de los coeficientes  $|c_i|^2$  y la distribución suavizada

$\omega_1(E_2)$  exhiben unas fluctuaciones mucho más acusadas que en los modelos integrables. Por esta razón es necesario realizar un proceso de suavizado adicional, diferente al descrito en la sección 5.4.1, basado en el método de las medias móviles (moving averages) sobre los resultados de los cálculos. Las distribuciones de energía suavizada se presentan en los paneles superiores de la figura 5.12. En el panel superior izquierdo se puede ver que el máximo local de  $\omega_1(E_2)$ , que se localizaría en la energía crítica para los modelos integrables, en este modelo desaparece. Sin embargo, lo más importante es que en ambas distribuciones de energía se observan dos picos separados alrededor de la energía crítica de la ESQPT.

En lo que respecta a la probabilidad de supervivencia después del *quench* crítico, visualizado en el panel inferior de la figura 5.12, ésta se comporta de manera análoga a como lo hace en los modelos integrables. Es importante mencionar sin embargo que, aunque la probabilidad de supervivencia para los modelos integrables proporciona su característica “forma crítica” (sin recurrencias) únicamente para un intervalo muy pequeño alrededor del valor  $\lambda_2$  que define el *quench* crítico, para el modelo de Dicke se obtiene un intervalo mucho más amplio de comportamiento crítico. Sólomente para valores de  $\lambda_2$  suficientemente lejos del valor del *quench* crítico (mucho más pequeño o más grande), las distribuciones de  $|c_i|^2$  y  $\omega_1(E_2)$  presentan un único pico y la probabilidad de supervivencia  $p_1(t)$  presenta una estructura oscilatoria con amortiguación.

Podemos extraer, a modo de conclusión, que la ESQPT en el modelo de Dicke afecta a la dinámica del *quench* cualitativamente de manera análoga a como lo hacía en los modelos integrables, aunque sus marcas en varios observables relacionados con el *quantum quench* se ven más difuminadas que las discutidas en la sección 5.5.1. Las diferencias observadas se deben parcialmente al hecho de que la ESQPT en el modelo de Dicke es de un tipo más suave que las que se observan en los modelos  $SU(1,1)$  y Jaynes-Cummings. Otra razón adicional para el suavizado se encuentra en la naturaleza caótica de la dinámica en el modelo de Dicke [121], que en general posee una tendencia a oscurecer las señales de la ESQPT [20].

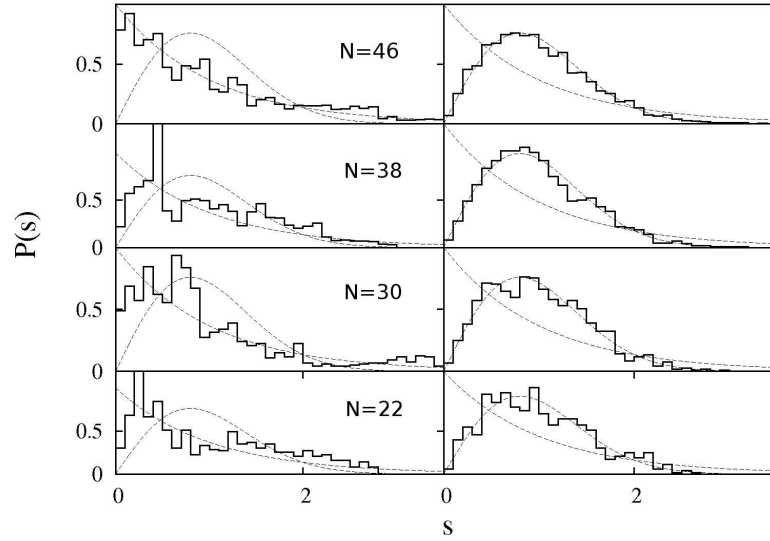


## 5.6. ESQPT y origen del caos en los modelos de Dicke y de Jaynes-Cummings

En esta sección se estudia el comportamiento crítico de la ESQPT en relación al orden y el caos en los modelos de Dicke y de Jaynes-Cummings. Ya se ha visto que ambos modelos exhiben una cadena de transiciones de fase cuánticas para estados excitados. Además, ya se insinuó en la sección anterior que las señales de la ESQPT en el modelo de Dicke se ven difuminadas debido al caos cuántico presente en dicho modelo. Nuestro objetivo será entonces mostrar que la aparición del caos cuántico está ligado a los precursores de las ESQPTs. Sería interesante también entender cómo el colapso de los niveles de energía que se produce en una ESQPT afecta a la repulsión de niveles, algo inherente al caos cuántico.

Se conoce que el modelo de Dicke no es integrable y es parcialmente caótico. La transición de fase del estado fundamental ha sido estudiada en [121] y allí se ha mostrado que está correlacionada con un cambio en el comportamiento de ordenado a caótico. Cabría entonces preguntarse si el caos cuántico está relacionado de algún modo con el comportamiento crítico de los estados excitados. Desde un primer momento se podría anticipar que las propiedades caóticas del espectro introducen grandes fluctuaciones que parcialmente ocultan la dependencia singular en el punto crítico en la figura 5.8. No obstante, caos y ESQPTs poseen algunas propiedades que son difíciles de conciliar. Por un lado, uno de los rasgos más distintivos del caos cuántico es la repulsión de niveles energéticos, lo cual induce una probabilidad nula de encontrar dos niveles a la misma energía [139]. Por otro lado, una ESQPT vista como una rápida reestructuración de los estados excitados, suele estar relacionada con un acercamiento de niveles (numerosos niveles en una pequeña región que evitan cruzarse), a menudo dando lugar a una acumulación singular de niveles a la energía  $E = E_c$  [11, 13, 20, 113, 129]. Por tanto, la relación entre la repulsión de niveles y la aparición de indicios de una ESQPT en el espectro constituye un desafío teórico interesante.

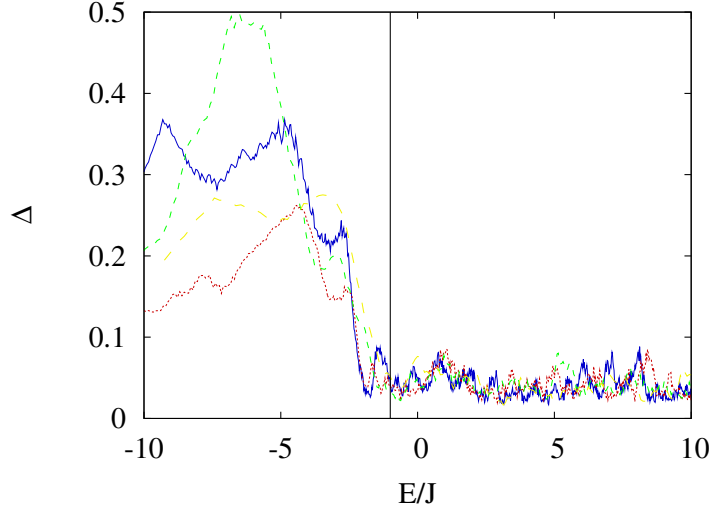
Centremos la atención entonces en el modelo de Dicke y fijemos un valor



**Figura 5.13:** Distribución de espaciamiento entre niveles vecinos más cercanos  $P(s)$  para el modelo de Dicke con  $\lambda = 3$ . La columna izquierda muestra el histograma para  $E < E_c$ , la columna derecha para  $E > E_c$ . Las filas, de abajo hacia arriba, se corresponden con  $N_a = 22, 30, 38$ , y  $46$ , respectivamente

del parámetro de acoplamiento  $\lambda$  por encima del  $\lambda_{c0}$ , donde el sistema es parcialmente caótico [121, 140, 141]. Para analizar cómo el caos y la ESQPT pueden coexistir juntos, se calcula la distribución de espaciamiento  $P(s)$ , en donde  $s$  es una distancia normalizada ( $\bar{s} = 1$ ) entre dos niveles vecinos, a ambos lados de la energía crítica  $E_c$ . Se sabe que esta distribución interpola entre una función de distribución de Poisson y una de Wigner,  $P^P = e^{-s}$  y  $P^W = \frac{\pi}{2} s e^{-\pi s^2/4}$ , respectivamente, conforme el sistema pasa de un régimen regular u ordenado a uno caótico [139]. Con el objetivo de poseer un gran número de niveles de energía por debajo de la energía crítica, los cálculos se realizan para  $\lambda = 3$ . Diferentes elecciones de  $\lambda$  conducen a resultados análogos.

En la figura 5.13 se presentan las distribuciones  $P(s)$  calculadas para las zonas subcríticas ( $E < E_c$ ) y supercríticas ( $E > E_c$ ) del espectro y para varios números de átomos (ver pie de figura para mayor información). En todos los casos se ha usado el mismo número de niveles para la construcción de los histogramas a ambos lados de la energía crítica. Para  $E > E_c$ , la estadística espectral sigue una distribución tipo Wigner. Sin embargo, para



**Figura 5.14:** Origen del caos en el modelo de Dicke con  $\lambda = 3$  medido por la distancia (5.41) entre la estadística real y la distribución de Wigner. La distancia se dibuja como función de la energía media escalada asociada con la fracción relevante del espectro. La línea vertical únicamente indica la localización de la energía crítica. El cálculo se ha realizado para varios números de átomos:  $N_a = 22$  (línea amarilla), 30 (línea verde), 38 (línea roja), y 46 (línea azul).

$E < E_c$  la forma de los histogramas no queda clara: mientras que para el caso con  $N_a = 46$  (número de átomos) se acerca bastante a una distribución de Poisson, para un número de átomos más pequeño no es ni Wigner ni Poisson. Lo más relevante es que por debajo de  $E_c$  se observa que  $P(s = 0) > 0$ , mientras que por encima de  $E_c$  se obtiene que  $P(s = 0) \approx 0$ . En otras palabras, los niveles de energía comienzan a repelerse unos con respecto a otros cuando se cruza la energía crítica de la ESQPT.

A continuación se analiza cómo cambia la estadística espectral conforme se va subiendo en el espectro con el objetivo de obtener una descripción más cuantitativa. Para aumentar la exactitud del procedimiento, nos basamos en la distribución de espaciado acumulada  $F(s) = \int_0^s dx P(x)$ . Dada una secuencia numérica de espaciados  $\{s_i\}$ , se mide su “distancia” a la distribución Wigner por medio de la siguiente magnitud

$$\Delta = \frac{\sum_i [F^W(s_i) - F(s_i)]^2}{\sum_i [F^W(s_i) - F^P(s_i)]^2}, \quad (5.41)$$

donde  $F^W$  y  $F^P$  son distribuciones acumuladas obtenidas de  $P^W$  y  $P^P$ , respectivamente. Lo que se intenta medir es cuánto se aleja la distribución obtenida numéricamente de una distribución Wigner. Por consiguiente, si  $\Delta = 0$  entonces la secuencia numérica sigue una distribución tipo Wigner, mientras que si la secuencia es Poissoniana entonces  $\Delta = 1$ . Se ha construido secuencias de 200 espaciados consecutivos y, usando la ecuación (5.41), se ha calculado la distancia  $\Delta$  de cada secuencia a la estadística Wigner. Estas distancias se visualizan en la figura 5.14 en función de la energía media de la respectiva secuencia. Se observa que aparece una transición un tanto abrupta desde valores no nulos de  $\Delta$  a  $\Delta \sim 0$  justamente por debajo de la energía crítica  $E_c$ . Aunque el rango de valores cubiertos de  $N_a$  no es suficientemente grande para acercarnos al límite termodinámico, sí es suficiente para conjeturar que el comportamiento crítico en el parámetro de orden viene acompañado por un cambio en la estadística espectral. Además, puesto que este cambio sucede muy abruptamente, postulamos que viene motivado por los precursores de la ESQPT.

Estamos en condiciones de ir más allá de la hipótesis planteada en [121, 140, 141], según la cual el espectro del modelo de Dicke con  $\lambda > \lambda_c$  es regular a bajas energías. Nuestros resultados numéricos sugieren que la transición al régimen caótico se produce alrededor de la energía crítica  $E_c$ . Se puede establecer una imagen representativa de la dinámica implícita en el modelo de Dicke del siguiente modo: se comienza en  $\lambda = 0$  con un estado fundamental en el que  $N_b = N_\uparrow = 0$  ( $N_\uparrow$  son el número de átomos excitados). Conforme se aumenta  $\lambda$ , el estado fundamental sigue siendo el mismo hasta que se cruza el punto crítico  $\lambda_{c0}$  entrando en la fase superradiante, donde los valores esperados  $\langle \hat{N}_b \rangle$  y  $\langle \hat{N}_\uparrow \rangle$  comienzan a aumentar. Para cualquier valor de  $\lambda > \lambda_c$ , existe una región por encima del estado fundamental en la que no hay repulsión de niveles,  $P(s = 0) > 0$ . Esto parece ser un fenómeno común en casi toda la fase superradiante en el diagrama de fases  $\lambda \times E$ . Si la energía se incrementa hasta valores próximos, pero por debajo de la energía crítica  $E_c = -J\omega_0$ , en donde  $\langle \hat{N}_\uparrow \rangle$  cae abruptamente, empieza a aparecer repulsión de niveles, con lo que el espectro adopta una estadística del tipo Wigner. Por encima de  $E_c$ , el sistema pasa a ser completamente caótico.

## 5.7. Resumen y conclusiones

En el presente capítulo se ha estudiado el diagrama de fases y la dinámica de no equilibrio de tres modelos que describen la interacción de un único modo bosónico con un subsistema algebraico basado en el álgebra  $SU(1, 1)$  o bien en el  $SU(2)$ , analizándose además su estructura algebraica. Se ha visto que la existencia de una transición de fase para estados excitados en los modelos integrables  $SU(1, 1)$  y  $SU(2)$  se muestra como un pico local en la densidad de niveles, que en el límite termodinámico constituye una singularidad. En el modelo no integrable de  $SU(2)$ , la ESQPT induce un incremento tipo escalón de la densidad de niveles, que lo limita a una dependencia con una derivada infinita. La ESQPT se manifiesta por sí misma también en los valores esperados de los observables que presentan singularidades en la energía crítica. Estas señales de la presencia de una ESQPT abre la posibilidad de usar el concepto de parámetro de orden y usar la teoría de Landau para caracterizarlas además de clasificarlas.

También se han investigado las consecuencias que posee una ESQPT sobre la dinámica de relajación del sistema después de producirse un *quantum quench*. Para ello se han analizado varias magnitudes relacionadas con el proceso de relajación. Un efecto particular se ha observado en la probabilidad de supervivencia cuando el *quantum quench* lleva al sistema a la energía crítica de la ESQPT. En particular, los efectos del *quantum quench* quedan más difusos en el modelo no integrable  $SU(2)$  que en los modelos integrables de  $SU(1, 1)$  y de  $SU(2)$  como consecuencia de que la ESQPT para el primero es de un carácter más suave que para los otros dos.

Finalmente, se han estudiado los exponentes críticos para los parámetros de orden en el modelo integrable  $SU(2)$  y en su respectivo modelo no integrable. Con lo que demostramos que realmente existe una ESQPT para el modelo no integrable, pero que sus señales se ven más difusas debido al origen del comportamiento caótico en el sistema alrededor de la energía crítica. Se ha relacionado, de este modo, ESQPT y caos cuántico, identificándose en qué zonas del diagrama de fases el sistema se comporta de manera regular o de manera caótica. Éste es un estudio que complementa así al iniciado en las

referencias [121, 140, 141].

# Capítulo 6

## Síntesis y conclusiones

En este último capítulo se expone un breve resumen del trabajo desarrollado así como las conclusiones más relevantes a las que se ha llegado.

A lo largo del presente trabajo se han desarrollado los siguientes temas:

- Se ha definido el concepto de transición de fase cuántica, tanto para el estado fundamental (QPT) de un sistema cuántico como para estados excitados (ESQPT).
- Se ha hecho una breve revisión de la aproximación de Campo Medio tanto para un sistema de fermiones (aproximación de Hartree-Fock) como para un sistema de bosones (aproximación de Hartree-Bose). Hablar de dichas aproximaciones es importante ya que nos permite considerar a las partículas de nuestro sistema como partículas independientes inmersas en un potencial promedio. Dicho potencial es creado a su vez por todas las partículas del sistema.
- Se ha introducido la aproximación de Tamm-Dancoff como técnica para obtener estados excitados sobre el estado fundamental de un sistema en el marco de Campo Medio. Esta técnica nos ha sido especialmente útil para estudiar de una forma analítica el proceso de la decoherencia en el capítulo 4.
- Se ha estudiado el problema de la medida en mecánica cuántica y cómo

el introducir el medio como parte del sistema cuántico, junto con el concepto de decoherencia, facilita la resolución de dicho problema.

- Se ha presentado la matriz densidad como herramienta fundamental para trabajar con la decoherencia, así como la interpretación que se hace de la misma.
- Se ha profundizado en el estudio de sistemas de dos niveles, en concreto los sistemas tratados son el modelo vibrónico  $U(4)$ , el límite  $2D$  del modelo vibrónico  $U(3)$ , el modelo de Lipkin, el modelo de Dicke, el modelo de Jaynes-Cummings y un modelo bosónico basado en el álgebra  $SU(1, 1)$ .
- Se ha introducido un enfoque algebraico, basado en el concepto de álgebra generadora de espectros, para estudiar transiciones de fase cuánticas en los diversos sistemas estudiados a lo largo del presente trabajo. En particular, se ha hecho una breve revisión de las propiedades algebraicas del modelo vibrónico  $U(4)$  y  $U(3)$  respectivamente, con el objetivo de estudiar sus simetrías dinámicas.
- Se ha introducido el formalismo Q-consistente para el modelo vibrónico. Dicho formalismo había sido propuesto dentro del modelo de bosones interaccionantes (IBM) para el estudio de núcleos atómicos.
- Se ha realizado un estudio de Campo Medio, tanto para el modelo vibrónico  $U(4)$  como  $U(3)$ , haciendo uso del formalismo de los estados intrínsecos del sistema.
- Se han introducido unas técnicas que nos han permitido ir más allá de la aproximación de Campo Medio. Estas técnicas son el uso de la transformación de Holstein-Primakoff, la transformación de Bogoliubov y la transformación de desplazamiento (Shift). Con esto se ha conseguido diagonalizar de forma aproximada en sucesivos órdenes de  $N$  el hamiltoniano correspondiente al modelo vibrónico  $U(4)$  y  $U(3)$  y así obtener soluciones analíticas para diferentes observables espectroscópicos.



- 
- Se ha realizado una comparación entre los resultados obtenidos analíticamente en el modelo vibrónico  $U(4)$  y  $U(3)$  con los que se obtienen de resolver exactamente el hamiltoniano en una base adecuada. Dicha comparación muestra la bondad de nuestros cálculos.
  - Se ha realizado un escalado con el tamaño finito del sistema de la energía por partícula del estado fundamental, el gap del primer estado excitado y el número medio de bosones  $\hat{n}_p$  en el estado fundamental para el modelo vibrónico  $U(4)$ . De manera análoga se ha procedido con el modelo vibrónico  $U(3)$  pero adicionalmente se ha realizado el estudio del escalado por tamaño finito del sistema de la probabilidad de transición entre el estado fundamental y el primer estado excitado.
  - Se ha revisado el modelo de Lipkin y se ha estudiado también la decoherencia inducida sobre un qubit por la interacción con un ambiente bosónico descrito por dicho modelo, el cual presenta una QPT y una ESQPT. Para este propósito, se ha analizado el factor decoherencia  $|r(t)|$ , que mide cómo los elementos no diagonales de la matriz densidad reducida del sistema decaen con el tiempo. Para ello se han desarrollado tres métodos que proporcionan resultados analíticos; a saber, usando las técnicas más allá de Campo Medio que se vieron en el capítulo 3, usando la aproximación TDA y por último la TDA a segundo orden.
  - Los resultados analíticos que se obtienen para la decoherencia usando TDA a segundo orden se han comparado con los resultados numéricos que se obtienen de resolver exactamente el problema.
  - Se ha estudiado el diagrama de fases y la dinámica de no equilibrio de tres modelos que describen la interacción de un campo bosónico de un sólo modo con un subsistema algebraico basado en las álgebras  $SU(1, 1)$  ó  $SU(2)$ .
  - Se ha introducido el concepto de *quantum quench* y se han investigado las consecuencias de una ESQPT sobre la dinámica de relajación después de producirse un *quantum quench*. Esto se ha investigado para

los modelos integrables y para el modelo no integrable de Dicke, en donde se ha tenido especial cuidado en la convergencia de los cálculos numéricos.

- Se han analizado varias magnitudes relacionadas con el proceso de relajación después del *quantum quench*. En particular, se ha analizado la probabilidad de supervivencia del estado inicial después del *quench*, la cual está relacionada con la distribución de energía del estado inicial en la base de autoestados del nuevo hamiltoniano.
- Se ha demostrado la existencia de una ESQPT tanto en el modelo de Jaynes-Cummings como en el modelo de Dicke.
- Se ha analizado la relación entre una ESQPT en el modelo de Dicke y la aparición del caos en dicho modelo. Para ello se han realizado una estadística espectral con la que se ha podido delimitar las zonas donde el modelo de Dicke es regular y donde es caótico.

A partir de estos estudios concluimos que:

- La solución analítica que se obtiene al resolver el modelo vibrónico  $U(4)$  y  $U(3)$  mediante una transformación de Holstein-Primakoff, una transformación de desplazamiento (shift) y una transformación de Bogoliubov, nos permite ir más allá de la solución de Campo Medio. Dicha solución está de acuerdo con la solución que se obtiene de resolver el problema exactamente en todo el dominio del parámetro de control  $\alpha$  salvo en las cercanías del punto crítico.
- Se ha obtenido que el escalado de la energía por partícula del estado fundamental, el gap del primer estado excitado y el número medio de bosones  $\hat{n}$  del nivel superior en el estado fundamental y la probabilidad de transición entre el primer estado excitado y el estado fundamental siguen una ley de potencias del tipo  $AN^\gamma$ , calculándose para cada caso el correspondiente exponente crítico.

- 
- El modelo de Lipkin presenta una transición de fase en el punto crítico  $\alpha = 4/5$ , que puede ser de primer orden ( $\omega \neq 0$ ) o de segundo orden ( $\omega = 0$ ). En la fase no simétrica, el modelo de Lipkin presenta también una ESQPT: de segundo orden a la energía crítica  $E_c^{(2)} = 0$  para cualquier valor de  $\omega$  y de primer orden a la energía  $E_c^{(1)} < 0$  para  $\omega \neq 0$ .
  - La aproximación TDA y las técnicas empleadas para ir más allá del Campo Medio en el modelo de Lipkin son insuficientes para describir adecuadamente el fenómeno de la decoherencia, ya que no se obtiene decaimiento alguno.
  - Realizando un cálculo con la aproximación TDA hasta segundo orden somos capaces de reproducir correctamente el factor  $|r(t)|$  para cualquier valor de  $\lambda$  salvo una pequeña región donde aparece una transición de fase para estados excitados.
  - Se ha encontrado que la decoherencia es máxima cuando el acoplamiento entre el sistema y el entorno fuerza una ESQPT de segundo orden en el ambiente. De modo que la decoherencia puede ser un claro marcador para ESQPT. En consecuencia, en la fabricación de un ordenador cuántico se deben evitar situaciones en las que el ambiente que interacciona con el qubit experimente una ESQPT.
  - Una ESQPT de primer orden no afecta al proceso de la decoherencia.
  - Se ha calculado  $r_{max}(\lambda)$ , es decir, el valor del segundo máximo local de  $|r(t)|$  y se ha obtenido que se acerca a cero para  $\lambda \rightarrow \lambda_c^{(2)}$  en el límite termodinámico y además se obtiene un escalado del tamaño finito del sistema que viene dado por  $r_{max}(\lambda_c^{(2)}) \propto N^{-\gamma}$ .
  - El tratamiento de Campo Medio ha proporcionado una buena descripción del factor decoherencia  $|r(t)|$ , excepto en las regiones alrededor del punto crítico. Por tanto, se necesitan aproximaciones más sofisticadas para obtener una descripción analítica del comportamiento de  $|r(t)|$ , y en particular, para estimar el exponente crítico  $\gamma$ .

- La existencia de una ESQPT en los modelos integrables  $SU(2)$  y  $SU(1,1)$  se manifiesta en sistemas finitos como un pico local en la densidad de niveles, que en el límite termodinámico se convierte en una singularidad.
- En el modelo  $SU(2)$  no integrable (modelo de Dicke), la ESQPT conlleva un incremento en la densidad de niveles del tipo escalón, lo que limita a una dependencia con una derivada infinita.
- Las ESQPTs también se manifiestan en los valores esperados de los observables cuánticos que presentan singularidades a la energía escalada crítica. Estos signos de la presencia de una ESQPT abren la posibilidad de usar el concepto de parámetro de orden y recurrir a la teoría de Landau tanto para caracterizarlo como para clasificarlo.
- Se ha observado un efecto similar al visto con el factor de la decoherencia en la probabilidad de supervivencia para un *quantum quench*. En concreto, en los dos sistemas integrables, cuando no se alcanza la energía crítica, el *quantum quench* induce un comportamiento típico de colapsos y resurgimientos en la probabilidad de supervivencia con un decaimiento suave, lo cual es consecuencia del único pico que aparece en las respectivas distribuciones de energía. Por contraposición, un *quench* crítico produce una repentina destrucción de la probabilidad de supervivencia seguida de oscilaciones aleatorias de pequeña amplitud. Esta última respuesta más específica está relacionada con una forma más compleja en la distribución de energía, donde se muestra una separación a la energía a la que se produce la ESQPT.
- En el modelo de Dicke se observa un fenómeno similar. Sin embargo, como consecuencia de la repulsión de niveles, la región crítica es algo más amplia que en los modelos integrables.
- A pesar de las diferencias observadas en los casos integrable y no integrable, pensamos que el proceso de relajación ofrece una señal clara de una ESQPT en modelos del tipo de Dicke.

- Las señales de la ESQPT en el modelo de Dicke se ven oscurecidas como consecuencia del origen del comportamiento caótico en el espectro.
- Los resultados numéricos realizados en el modelo de Dicke muestran que el cruce de un régimen donde no hay repulsión de niveles a otro con una estadística de niveles del tipo Wigner se produce alrededor de la energía crítica.
- Nuestros resultados son compatibles con la hipótesis de que la abrupta aparición de la repulsión en los niveles energéticos se debe a los precursores de la ESQPT, de un modo similar al discutido en las referencias [121, 140, 141].
- Anticipamos la existencia de un comportamiento cualitativo semejante en otros sistemas no integrables que presentan ESQPTs. Además, se espera que otros efectos dinámicos de la ESQPT, como un comportamiento análogo en el factor de supervivencia o factor de decoherencia, se produzcan de una forma más difusa en sistemas que presenten caos cuántico.



# Capítulo 7

## Summary and conclusions

This final chapter provides a brief summary of the work done and the most relevant conclusions which have been reached.

Throughout this memory we have developed the following topics:

- The concept of quantum phase transition in quantum systems, both for the ground state (QPT) and for excited states (ESQPT), has been introduced.
- A brief review of the mean field approximations for both fermions (Hartree-Fock approximation) and bosons (Bose-Hartree approximation) has been presented. These approaches are important since they allow to treat the system as independent particles immersed in an average potential. This potential is created in turn by all particles in the system.
- The Tamm-Dancoff approximation, as a tool for studying approximately excited states of a system within the mean field approach, has been introduced. This approximation has shown to be especially useful for the analytical study of the decoherence process presented in Chapter 4.
- The problem of measurement in Quantum Mechanics has been revised. We have discussed briefly how the introduction of the environment as

part of the quantum system, along with the concept of decoherence, clarifies the reinterpretation of the problem.

- The density matrix, as a fundamental tool for working with decoherence, has been introduced. The concept of reduced density matrix has been reviewed.
- Phase transitions in several two-level quantum systems of interest in different Physics branches have been studied. All the studied systems are based in algebraic models and the concept of spectrum generating algebras. In particular, the Vibron model ( $U(4)$  structure) and its  $2D$  limit ( $U(3)$  structure) have been studied in chapter 3. The Lipkin model ( $U(2)$  structure) is studied in chapter 4. The Dicke model, the Jaynes-Cummings model (two versions of the  $U(2)$  structure) and a model based in a bosonic algebra  $SU(1,1)$  are worked out in chapter 5.
- A brief review of the algebraic properties of the Vibron Model ( $U(4)$ ) and its  $2D$  version ( $U(3)$ ) have been presented.
- The Q-consistent formalism for the Vibron Model has been introduced. This formalism was proposed originally within the interacting boson model (IBM) for the study of atomic nuclei.
- A mean field study for both the Vibron Model ( $U(4)$ ) and its  $2D$  version ( $U(3)$ ) has been performed using the formalism of the intrinsic or coherent states.
- Beyond mean field techniques have been introduced. In particular, the Holstein-Primakoff, the Bogoliubov and the shift transformations have been discussed. These transformations have allowed us to diagonalize approximately the Vibron Model ( $U(4)$ ) and the  $U(3)$  hamiltonians in successive orders of  $N$  so as to obtain analytical values for various spectroscopic observables of interest.
- For the Vibron Model and the  $U(3)$  hamiltonians, a comparison between the analytical results obtained with the techniques mentioned in



---

the preceding point, and exact results obtained by diagonalizing the corresponding hamiltonians in a suitable basis has been shown. This comparison shows the goodness of our analytical calculations.

- A finite size scaling of the ground state energy per particle, the gap of the first excited state and the expectation value of the boson number  $\hat{n}_p$  in the upper level has been performed. This last observable can be considered as the quantal order parameter for the transition in  $U(4)$ . Similar studies have been done for the  $U(3)$  model. In this case, also the finite size scaling exponent for the transition probability between the ground and the first excited states has been calculated.
- The Lipkin model has been revised, it is known that it presents both QPT and ESQPT. Our interest was the study of the decoherence induced on a single qubit due to its interaction with a bosonic environment described by the Lipkin model. For this purpose, the decoherence factor  $|r(t)|$ , which measures how the non-diagonal elements of the system reduced density matrix decays with time, has been studied. Both, exact results obtained by diagonalizing the Lipkin hamiltonian in an appropriate basis and approximate analytical results based on a second order TDA, are discussed.
- The phase diagrams and non-equilibrium dynamics of three models which describe the interaction of a single mode boson field with an algebraic subsystem, based either on the  $SU(1,1)$  or on the  $SU(2)$  dynamical algebra, have been studied.
- Our study has demonstrated the existence of an ESQPT both in the Jaynes-Cummings (also in the  $SU(1,1)$  model) and in the Dicke models.
- The concept of quantum quench has been introduced. The consequences of the presence of a ESQPT on the relaxation dynamics after a quantum quench have been investigated in integrable (Jaynes-Cummings and  $SU(1,1)$ ) models and in the non-integrable Dicke model. In this last case, special care has been taken when testing the numerical calculation convergence.

- Several magnitudes related to the relaxation process after the quantum quench have been analyzed. In particular, the survival probability of the initial state after the quench, which is closely related to the energy distribution of the initial state in the eigenbasis of the new Hamiltonian, has been thoroughly studied.
- The relationship between the existence of a ESQPT in the Dicke model and the onset of chaos in the excitation spectra has been studied. A spectral statistics of the Dicke hamiltonian has been performed and has allowed us to identify the regions where the Dicke model spectrum presents a regular behaviour and those where it is chaotic.

From this study we conclude that:

- The beyond mean field techniques used (Holstein-Primakoff expansion, shift and a Bogoliubov transformations) provide with accurate approximate analytical expressions for different observables of interest for the models  $U(4)$  (Vibron model) and  $U(3)$ . These expressions compare very well with the exact results in the whole domain of the control parameter except in a close region around the critical point.
- The finite-N scaling exponents for different observables (ground state energy per particle, gap, number bosons  $\hat{n}_p$  in the upper level and the transition probability between the first excited state and the ground state) have been calculated. All of them follow a power law,  $AN^\gamma$ , and the corresponding critical exponents have been extracted.
- The Lipkin model, as formulated in this work, presents a quantum phase transition from symmetric to nonsymmetric phases at around  $\alpha = 4/5$ . This can be first order ( $\omega \neq 0$ ) or second order ( $\omega = 0$ ) depending on the value of one control parameter  $\omega$ . In the nonsymmetric phase, the Lipkin hamiltonian also presents ESQPT's. One appears at  $E_c^{(2)} = 0$  and is second-order for any  $\omega$  value, the other appears only for  $\omega \neq 0$  at an energy  $E_c^{(1)} < 0$  and is first-order.

- 
- The TDA approach and other techniques used to go beyond mean field in the Lipkin model in order to describe properly the phenomenon of decoherence are shown to be inadequate, since they are unable to produce any decay in the decoherence factor. However, a second order TDA calculation is shown to correctly reproduce the decoherence factor,  $|r(t)|$ , for any value of  $\lambda$  (parameter controlling the intensity of the single qubit-boson environment coupling) except for the small region where a ESQPT appears.
  - It has been found that the decoherence in the qubit is maximal when the coupling between the system and the environment forces a second-order ESQPT in the environment. It has been proposed that the decoherence factor can be a clear mark for a second order ESQPT. Consequently, in making a quantum computer one must avoid situations in which the environment interacting with the qubit undergoes a continuous ESQPT. In contrast to this, the calculations performed in this work demonstrate that the presence of a first-order ESQPT does not affect the process of decoherence.
  - In this work we have defined the magnitude  $r_{max}(\lambda)$  which is the value of the second local maximum of  $|r(t)|$  (the first one is always 1) as a function of the time. The behaviour of this magnitude has been studied for different parameter selections and different system sizes. In all cases, it is obtained that it goes to zero for  $\lambda \rightarrow \lambda_c^{(2)}$  (it is the critical value of  $\lambda$  that takes the system to the second-order ESQPT) in the thermodynamic limit. A finite size scaling study of the system gives a power law for  $r_{max}$  at the critical point:  $r_{max}(\lambda_c^{(2)}) \propto N^{-\gamma}$ .
  - The mean-field treatment of the decoherence factor  $|r(t)|$  provides a good description of it, except in the regions close to the critical points. Therefore, more sophisticated approximations are needed to obtain analytical descriptions of the critical behaviour of  $|r(t)|$ , and, particularly, to estimate the critical exponent  $\gamma$ .
  - The existence of an ESQPT in the integrable models  $SU(2)$  and

$SU(1,1)$ , discussed in chapter 5, is manifested in finite systems as a local peak in the level density, which becomes a singularity in the thermodynamic limit. In the non integrable  $SU(2)$  model (Dicke model), the ESQPT leads to an increase in the level density as a step-like function.

- Precursors of the ESQPTs can also be observed in the expected values of quantum observables which show singularities at the critical energy. These signs of the presence of an ESQPT open the possibility of using the concept of order parameter and the Landau theory to characterize and classify them.
- The decoherence factor, studied in chapter 4 for the Lipkin model, and the survival probability, discussed for different models in chapter 5, produce similar behaviours. In particular, the survival probability in the two integrable systems subjected to normal (noncritical) quenches displays the typical pattern of collapses and revivals with a smooth decaying envelope. This follows from the single-peak forms of the respective energy distributions. In contrast, the critical quench produces a sudden destruction of the survival probability followed by small random oscillations. This specific response is connected to a more complex shape of the energy distribution, showing a kind of splitting right at the ESQPT energy.
- A similar phenomenon is also observed in the non-integrable Dicke model. However, due to level repulsion the survival probability is reduced in amplitude and the critical region is much broader. Away from the critical region, the survival probability and the energy distribution behave in a similar way as in the integrable models.
- In spite of the differences observed in integrable and non-integrable cases, we believe that the relaxation dynamics offers clear signals of an ESQPT in the Dicke type of models although they are somehow blurred by the onset of quantum chaos.

- Our numerical calculations show that a crossover from the regime with no level repulsion to the one with the Wigner level statistics takes place precisely around the critical energy. These results are compatible with the hypothesis that the abrupt emergence of level repulsion is caused by the precursors of the ESQPTs, in a similar way as discussed in references [121, 140, 141].
- We anticipate the existence of a similar qualitative behaviour in other non-integrable systems with ESQPTs. Also, other dynamical effects of ESQPTs, as for instance anomalous decoherence factors, are expected to take place in a fuzzier manner in quantum chaotic systems.



# Bibliografía

- [1] F. Iachello y N. V. Zamfir, Phys. Rev. Lett. **92**, 212501 (2004)
- [2] R. Gilmore y D. H. Feng, Nucl. Phys. A **301**, 189 (1978)
- [3] D. H. Feng, R. Gilmore y S. R. Deans, Phys. Rev. C **23**, 1254 (1981)
- [4] M. Vojta, Rep. Prog. Phys. **66**, 2069 (2003)
- [5] R. P. Feynman, Phys. Rev. **56**, 340 (1939)
- [6] W. D. Heiss y M. Müller, Phys. Rev. E **66**, 016217 (2002)
- [7] W. D. Heiss, F. G. Scholtz y H. B. Geyer, J. Phys. A **38**, 1843 (2005)
- [8] F. Leyvraz y W. D. Heiss, Phys. Rev. Lett. **95**, 050402 (2005)
- [9] S. Heinze, P. Cejnar, J. Jolie y M. Macek, Phys. Rev. C **73**, 014309 (2006)
- [10] M. Macek, P. Cejnar, J. Jolie y S. Heinze, Phys. Rev. C **73**, 014307 (2006)
- [11] P. Cejnar, M. Macek, S. Heinze, J. Jolie y J. Dobes, J. Phys. A **39**, L515 (2006)
- [12] W. D. Heiss, J. Phys. A **39**, 10081 (2006)
- [13] M. A. Caprio, P. Cejnar y F. Iachello, Ann. Phys. **323**, 1106 (2008)
- [14] W. H. Zurek, Rev. Mod. Phys. **75**, 715 (2003)

- 
- [15] J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos y J. Vidal, *Phys. Rev. C* **75**, 014301 (2007)
- [16] I. Tikhonenkov, E. Pazy, Y. B. Band y A. Vardi, *Phys. Rev. A* **77**, 063624 (2008)
- [17] E. T. Jaynes y F. W. Cummings, *Proc. IEEE* **51**, 81 (1963)
- [18] M. E. Fisher y M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972)
- [19] P. Cejnar, S. Heinze y M. Macek, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 100601 (2007)
- [20] P. Cejnar y P. Stránský, *Phys. Rev. E* **78**, 031130 (2008)
- [21] M. Nielsen y I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000)
- [22] F. Iachello y R. D. Levine, *Algebraic Theory of Molecules* (Oxford University Press, Oxford, 1995)
- [23] F. Pérez-Bernal y F. Iachello, *Phys. Rev. A* **77**, 032115 (2008)
- [24] H. J. Lipkin, N. Meshkov y A. J. Glick, *Nucl. Phys.* **62**, 188 (1965)
- [25] N. Meshkov, A. J. Glick y H. J. Lipkin, *Nucl. Phys.* **62**, 199 (1965)
- [26] A. J. Glick, H. J. Lipkin y N. Meshkov, *Nucl. Phys.* **62**, 211 (1965)
- [27] R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954)
- [28] P. Ring y P. Shuck, *The nuclear many-body problem* (Springer-Verlag, 1980)
- [29] M. Tavis y E. T. Jaynes, *Phys. Rev.* **170**, 379 (1968)
- [30] M. A. Preston y R. K. Bhaduri, *Structure of the nucleus* (Addison-Wesley, 1975)
- [31] A. Ferrer Soria, *Física nuclear y de partículas* (Universitat de València, 2006)



- 
- [32] A. Klein y E. R. Marshalek, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 375 (1991)
- [33] W. Greiner y J. A. Maruhn, *Nuclear models* (Springer-Verlag, 1996)
- [34] D. R. Hartree, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **24**, 111 (1928)
- [35] V. A. Fock, *Z. Phys.* **61**, 126 (1930)
- [36] J. P. Blaizot y G. Ripka, *Quantum theory of finite systems* (The MIT Press, 1986)
- [37] P. Quentin y H. Flocard, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **28**, 523 (1978)
- [38] J. Dukelsky, G. G. Dussuel, R. P. J. Perazzo, S. L. Reich y H. M. Sofia, *Nucl. Phys.* **425**, 93 (1984)
- [39] A. Relaño, *Caracterización del caos cuántico mediante series temporales*, Ph.D. thesis, Universidad Complutense de Madrid, España (2004)
- [40] J. M. G. Gómez, K. Kar, V. K. B. Kota, R. A. Molina, A. Relaño y J. Retamosa, *Phys. Rep.* **499**, 103 (2011)
- [41] H. Everett, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 454 (1957)
- [42] C. Kiefer y E. Joos, arXiv:quant-ph/9803052v1(1998)
- [43] M. Schlosshauer, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1267 (2004)
- [44] W. H. Zurek, *Phys. Rev. D* **24**, 1516 (1981)
- [45] P. M. Pearle, *Int. J. Theor. Phys.* **48**, 489 (1979)
- [46] N. Gisin, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1657 (1984)
- [47] G. C. Ghirardi, A. Rimini y T. Weber, *Phys. Rev. D* **34**, 470 (1986)
- [48] E. P. Wigner, *Am. J. Phys.* **31**, 6 (1963)
- [49] J. L. Basdevant y J. Dalibard, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, 2005)

- 
- [50] F. Schwabl, *Quantum Mechanics* (Springer, Berlin)
- [51] W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. **90**, 120404 (2003)
- [52] A. Elby y J. Bub, Phys. Rev. A **49**, 4213 (1994)
- [53] F. Iachello y A. Arima, *The Interacting Boson Model* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987)
- [54] M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **65**, 923 (1990)
- [55] F. Iachello, Rev. Mod. Phys. **65**, 569 (1993)
- [56] F. Iachello, *Lie Algebras and Applications (Lecture Notes in Physics)*, Vol. 708 (Springer, Berlin, 2006)
- [57] A. Frank y P. van Isacker, *Algebraic Methods in Molecular and Nuclear Structure Physics* (John Wiley and Sons, New York, 1994)
- [58] R. Gilmore, J. Math. Phys. **20**, 891 (1979)
- [59] D. D. Warner y R. F. Casten, Phys. Rev. Lett. **48**, 1385 (1982)
- [60] R. Gilmore y D. Feng, Nucl. Phys. **A25**, 189 (1978)
- [61] A. E. L. Dieperink, O. Scholten y F. Iachello, Phys. Rev. Lett. **44**, 1747 (1980)
- [62] J. N. Ginocchio y M. W. Kirson, Phys. Rev. Lett. **44**, 1744 (1980)
- [63] A. E. L. Dieperink y O. Scholten, Nucl. Phys. **A356**, 125 (1980)
- [64] A. Bohr y B. R. Mottelson, Phys. Scr. **22**, 468 (1980)
- [65] O. S. van Roosmalen, R. D. Levine y A. E. L. Dieperink, Chem. Phys. Lett. **101**, 512 (1983)
- [66] E. López-Moreno y O. Castaños, Phys. Rev. C **54**, 2374 (1996)
- [67] T. Holstein y H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940)

- 
- [68] J. E. García-Ramos, J. Dukelsky y J. M. Arias, *Phys. Rev. C* **72**, 037301 (2005)
- [69] S. Dusuel, J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. C* **72**, 064332 (2005)
- [70] J. L. Cardy, *Finite Size Scaling* (North Holland, Amsterdam, 1988)
- [71] S. Dusuel, J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. C* **72**, 011301(R) (2005)
- [72] D. J. Rowe, P. S. Turner y G. Rosensteel, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 232502 (2004)
- [73] F. Iachello, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3580 (2000)
- [74] F. Iachello, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 052502 (2001)
- [75] R. F. Casten y N. V. Zamfir, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3584 (2000)
- [76] R. F. Casten y N. V. Zamfir, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 052503 (2001)
- [77] S. Dusuel y J. Vidal, *Phys. Rev. A* **71**, 060304(R) (2005)
- [78] S. Dusuel y J. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 237204 (2004)
- [79] S. Dusuel y J. Vidal, *Phys. Rev. B* **71**, 224420 (2005)
- [80] Y. Zhang, Z. feng Hou, H. Chen, H. Wei y Y. xin Liu, *Phys. Rev. C* **78**, 024314 (2008)
- [81] F. Iachello, *Chem. Phys. Lett.* **78**, 581 (1981)
- [82] F. Iachello y R. D. Levine, *J. Chem. Phys.* **77**, 3046 (1982)
- [83] O. S. V. Roosmalen, F. Iachello, R. D. Levine y A. E. L. Dieperink, *J. Chem. Phys.* **79**, 2515 (1983)
- [84] O. S. V. Roosmalen, A. E. L. Dieperink y F. Iachello, *Chem. Phys. Lett.* **85**, 32 (1982)

- 
- [85] O. S. van Roosmalen, I. Benjamin y R. D. Levine, *J. Chem. Phys.* **81**, 5986 (1984)
- [86] F. Iachello y S. Oss, *J. Chem. Phys.* **104**, 6956 (1996)
- [87] F. Iachello, F. Pérez-Bernal y P. H. Vaccaro, *Chem. Phys. Lett.* **375**, 309 (2003)
- [88] F. Pérez-Bernal, L. F. Santos, P. H. Vaccaro y F. Iachello, *Chem. Phys. Lett.* **414**, 398 (2005)
- [89] F. Pérez-Bernal y O. Álvarez-Bajo, *Phys. Rev. A* **81**, 050101(R) (2010)
- [90] R. N. Dixon, *Trans. Far. Soc.* **60**, 1363 (1964)
- [91] A. Leviatan, *Ann. Phys. (NY)* **179**, 201 (1987)
- [92] M. A. Caprio, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 6385 (2005)
- [93] O. S. van Roosmalen, *Algebraic Description of Nuclear and Molecular Rotation-Vibration Spectra*, Ph.D. thesis, University of Groningen, The Netherlands (1982)
- [94] J. Vidal y S. Dusuel, *Europhys. Lett.* **74**, 817 (2006)
- [95] R. Botet, R. Jullien y P. Pfenty, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 478 (1982)
- [96] J. I. Cirac, M. Lewenstein, K. Mollmer y P. Zoller, *Phys. Rev. A* **57**, 1208 (1998)
- [97] J. Vidal, G. Palacios y R. Mosseri, *Phys. Rev. A* **69**, 022107 (2004)
- [98] J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. C* **73**, 054305 (2006)
- [99] H. T. Quan, Z. Song, X. F. Liu, P. Zanardi y C. P. Sun, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 140604 (2006)
- [100] F. M. Cucchietti, S. Fernandez-Vidal y J. P. Paz, *Phys. Rev. A* **75**, 032337 (2007)

- 
- [101] C. Cormick y J. P. Paz, Phys. Rev. A **77**, 022317 (2008)
- [102] P. Cejnar y J. Jolie, Prog. Part. Nucl. Phys. **62**, 210 (2009)
- [103] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **12**, 343 (1971)
- [104] R. Balian y C. Bloch, Ann. Phys. (NY) **69**, 76 (1972)
- [105] M. V. Berry y M. Tabor, Proc. R. Soc. London Ser. A **349**, 101 (1976)
- [106] M. Reis, M. O. Terra Cunha, A. C. Oliviera y M. C. Nemes, Phys. Lett. A **344**, 164 (2005)
- [107] J. R. Cary y P. Rusu, Phys. Rev. A **47**, 2496 (1993)
- [108] O. Babelon, L. Cantini y B. Douçot, J. Stat. Mech., P07011(2009)
- [109] D. Rossini, T. Calarco, V. Giovannetti, S. Montangero y R. Fazio, Phys. Rev. A **75**, 032333 (2007)
- [110] A. Relaño, J. Dukelsky y R. A. Molina, Phys. Rev. E **76**, 046223 (2007)
- [111] J. E. García-Ramos, C. E. Alonso, J. M. Arias, J. Dukelsky, P. Van Isacker y A. Vitturi, Nucl. Phys. A **637**, 529 (1998)
- [112] J. E. García-Ramos, J. M. Arias, J. Dukelsky, E. Moya de Guerra y P. Van Isacker, Phys. Rev. C **57**, R476 (1998)
- [113] A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos y P. Pérez-Fernández, Phys. Rev. A **78**, 060102(R) (2008)
- [114] F. T. Arrechi, E. Courtens, R. Gilmore y H. Thomas, Phys. Rev. A **6**, 2211 (1972)
- [115] X. Wang y K. Mollmer, Eur. Phys. J. D **18**, 385 (2002)
- [116] J. H. Eberly, N. B. Narozhny y J. J. Sanchez-Mondragon, Phys. Rev. Lett. **44**, 1323 (1980)
- [117] V. V. Dodonov y V. I. Man'ko, *Theory of Nonclassical States of Light* (London: Taylor and Francis, 2003)

- 
- [118] B. W. Shore y P. L. Knight, *J. Mod. Opt.* **40**, 1195 (1993)
- [119] M. Brune, S. Haroche, J. M. Raimond, L. Davidovich y N. Zagury, *Phys. Rev. A* **45**, 5193 (1992)
- [120] K. Hep y E. H. Lieb, *Ann. Phys. (NY)* **76**, 360 (1973)
- [121] C. Emary y T. Brandes, *Phys. Rev. E* **67**, 066203 (2003)
- [122] A. Barut, A. Bohm y Y. Neéman, *Dynamical Groups and Spectrum Generating Algebras* (World Scientific, Singapore, 1988)
- [123] A. Perelemov, *Generalised Coherent States and their Applications* (Springer, Berlin, 1986)
- [124] W. M. Zhang, D. H. Feng y R. Gilmore, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 867 (1990)
- [125] J. Kurchan, P. Leboeuf y M. Saraceno, *Phys. Rev. A* **40**, 6800 (1989)
- [126] O. Castaños, R. López-Peña, E. Nahmad-Achar, J. G. Hirsch y E. López-Moreno, *Phys. Scr.* **79**, 065405 (2009)
- [127] P. Ribeiro, J. Vidal y R. Mosseri, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 050402 (2007)
- [128] P. Ribeiro y T. Paul, *Phys. Rev. A* **79**, 032107 (2009)
- [129] P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. A* **80**, 032111 (2009)
- [130] T. Kinoshita, T. Wenger y D. S. Weiss, *Nature (London)* **440**, 900 (2006)
- [131] E. Barouch y M. Dresden, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 114 (1969)
- [132] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch y I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002)
- [133] M. Greiner, O. Mandel, T. Hänsch y I. Bloch, *Nature* **419**, 51 (2002)

- 
- [134] F. N. C. Paraan y A. Silva, Phys. Rev. E **80**, 061130 (2009)
- [135] K. Sengupta, S. Powell y S. Sachdev, Phys. Rev. A **69**, 053616 (2004)
- [136] A. Silva, Phys. Rev. Lett. **101**, 120603 (2008)
- [137] L. Campos Venuti y P. Zanardi, Phys. Rev. A **81**, 032113 (2010)
- [138] T. Gorin, T. Prosen, T. H. Seligman y M. Žnidarič, Phys. Rep. **435**, 33 (2006)
- [139] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos: An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999)
- [140] C. Emary y T. Brandes, Phys. Rev. Lett. **90**, 044101 (2003)
- [141] N. Lambert, C. Emary y T. Brandes, Phys. Rev. Lett. **92**, 073602 (2004)