



Facultad de Física  
Departamento de FAMN

# **Análisis de un quantum quench en el modelo de Lipkin anharmónico**

Juan Gamito Gómez

Tutores:

D. José Miguel Arias Carrasco

D. Pedro Pérez Fernández

Sevilla, Diciembre de 2019



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. El modelo de Lipkin . . . . .	3
1.2. Transiciones de fase . . . . .	5
1.3. Quantum quench . . . . .	7
<b>2. Modelo simplificado de Lipkin</b>	<b>9</b>
2.1. Estudio exacto del modelo . . . . .	10
2.1.1. Modelo con $\alpha = 0$ . . . . .	12
2.1.2. Modelo con $\alpha = 1$ . . . . .	18
2.2. Aproximación de campo medio . . . . .	19
<b>3. Estructura y dinámica del sistema</b>	<b>28</b>
3.1. Estructura de los autoestados . . . . .	28
3.1.1. Cociente de participación inverso (IPR) . . . . .	29
3.1.2. Distribución de Husimi . . . . .	33

---

3.2. Dinámica del <i>quench</i> . . . . .	35
3.2.1. Eco de Loschmidt . . . . .	35
3.2.2. Correlación de operadores a través del tiempo (OTOC) . . . . .	40
<b>4. Resumen y conclusiones</b>	<b>44</b>
<b>A. Resolución algebraica de la ecuación de Schrödinger</b>	<b>46</b>
<b>B. Estados coherentes</b>	<b>49</b>
<b>C. Programa de Matlab</b>	<b>53</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>59</b>

# Capítulo 1

## Introducción

El uso de modelos exactamente solubles está muy extendido en Física [1]. Estos modelos, que suelen ser lo suficientemente sencillos para poder ser resueltos de manera exacta pero aun así no son triviales, se utilizan para comprobar la validez de distintos formalismos y aproximaciones desarrollados para tratar sistemas físicos de mayor complejidad. Comparando en estos modelos las soluciones exactas con las aproximadas, podemos hacernos una idea de la validez de las aproximaciones, e incluso ayudan a comprender más profundamente las aproximaciones hechas.

En el caso de la Física Nuclear, los modelos exactamente solubles se usan de manera recurrente y han servido en el desarrollo del modelo de capas o en un mejor entendimiento de las propiedades de pairing, entre muchas otras aportaciones. Una manera de construir este tipo de modelos es incorporando alguna simetría en el sistema de manera que aparezcan nuevas integrales de movimiento y, por lo tanto, se reduzcan de manera notable las dimensiones de la matriz Hamiltoniana a diagonalizar. Algunos ejemplos de estos modelos son el modelo rotacional de Elliot [2], el modelo de bosones en interacción (IBM) [3], el modelo de Dicke [4] o el modelo de Lipkin [5].

En este trabajo vamos a utilizar el modelo de Lipkin para estudiar el concepto de transición de fase cuántica en un sistema de dos niveles [6]. Vamos a obtener las soluciones exactas (numéricas) del sistema a partir de la diagonalización del Hamiltoniano, y discutiremos de qué manera podemos identificar en ellas la presencia de estas transiciones. Analizaremos el espectro de energía, las derivadas de la energía con respecto al parámetro de control del Hamiltoniano, los valores esperados de algún operador, etc. y

veremos cómo en todos ellos existen singularidades que nos llevan a la conclusión de la existencia de transiciones de fase en el sistema no solo en el estado fundamental, sino también en estados excitados. Además, vamos a introducir un término anharmónico en el Hamiltoniano de Lipkin original para estudiar qué efectos tiene este término en las transiciones de fase que presenta el sistema.

Como hemos dicho, la utilidad de los modelos exactamente solubles es que permiten resolver el sistema de manera exacta para luego comparar estas soluciones con distintas aproximaciones. En este trabajo se va a realizar una aproximación de campo medio a partir de estados coherentes de espín para obtener una solución analítica del sistema. Veremos que en esta aproximación también aparecen transiciones de fase y que los resultados exactos tienden a los analíticos en el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ).

Para terminar, se va a realizar un estudio del efecto que tienen las transiciones de fase en la estructura de los autoestados así como en la evolución dinámica del sistema. Por estructura de los autoestados entendemos la manera en que los elementos de la base forman el autoestado, e introduciremos varias magnitudes relacionadas con esta estructura como son el cociente de participación inverso (IPR, del inglés *inverse participation ratio*) y la distribución de Husimi [7]. Veremos cómo en la zona de transición los estados se encuentran muy localizados, lo que quiere decir que muy pocos elementos de la base contribuyen a formarlos. Para estudiar la dinámica, se someterá al sistema a un *quantum quench*, que se puede definir como un cambio abrupto en uno de los parámetros del Hamiltoniano, y se analizará la relajación del sistema por medio de una magnitud conocida como eco de Loschmidt [8]. Veremos que en presencia de una transición de fase la evolución del sistema presenta un comportamiento anómalo. Relacionado con el eco de Loschmidt, estudiaremos también el comportamiento de la correlación de dos operadores a través del tiempo (OTOC, del inglés *out-of-time-order correlator*) [9], magnitud relacionada con la propagación de la información de un sistema cuántico. Veremos cómo el OTOC también se ve afectado por la presencia de transiciones de fase en el sistema.

Como parte adicional del trabajo, se va a desarrollar un programa en Matlab que permita la resolución numérica del sistema así como realizar todos los cálculos y representaciones gráficas relacionados.

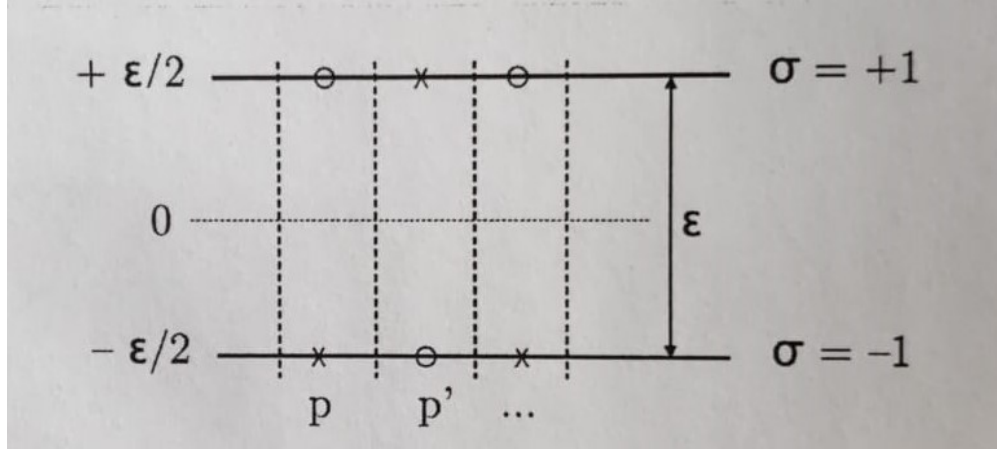


Figura 1.1: Esquema del modelo de Lipkin.

## 1.1. El modelo de Lipkin

El modelo de Lipkin se describe como un sistema de  $N$  fermiones distribuidos en dos niveles separados por una cierta energía  $\epsilon$ , cada uno con  $N$  huecos. Cada estado se describe por un número  $\sigma$  que vale  $\pm 1$  según sea la capa superior o inferior, y por un número  $p$  que describe el estado degenerado dentro de la misma capa. Por tanto, para cada valor de  $p$  hay dos estados correspondientes, uno en la capa superior y otro en la inferior. En la figura 1.1 se muestra un esquema del modelo. Se asume que hay una interacción fermión-fermión que dispersa pares de partículas entre los dos niveles sin cambiar el valor de  $p$ . El Hamiltoniano que describe un sistema así puede escribirse en términos de operaciones de creación y destrucción de la siguiente forma:

$$H = \frac{1}{2}\epsilon \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma} + \frac{1}{2}V \sum_{pp'\sigma} a_{p\sigma}^\dagger a_{p'\sigma}^\dagger a_{p'-\sigma} a_{p-\sigma} + \frac{1}{2}W \sum_{pp'\sigma} a_{p\sigma}^\dagger a_{p'-\sigma}^\dagger a_{p'\sigma} a_{p-\sigma}, \quad (1.1)$$

donde  $a_{p\sigma}^\dagger$  es el operación de creación de una partícula en el estado  $p$  de la capa  $\sigma$ , y tanto  $V$  como  $W$  son parámetros que especifican la intensidad de la interacción. El término de  $V$  dispersa un par de partículas del mismo nivel al otro nivel, mientras que el término de  $W$  manda una partícula al nivel superior mientras que baja una al inferior, tal y como se ilustra en la figura 1.2. En el estado fundamental, con  $W = V = 0$ , todas las partículas se encuentran en el nivel inferior y cada una de ellas tiene un valor diferente de  $p$ . La interacción no cambia el valor de  $p$ , y solo mezcla el estado fundamental con aquellos en los que las partículas se pueden encontrar en el nivel de arriba o abajo. Por tanto, tenemos a priori un sistema con  $2^N$  estados posibles, sin embargo, las simetrías del sistema van a permitir reducir considerablemente las dimensiones de la matriz a diagonalizar.

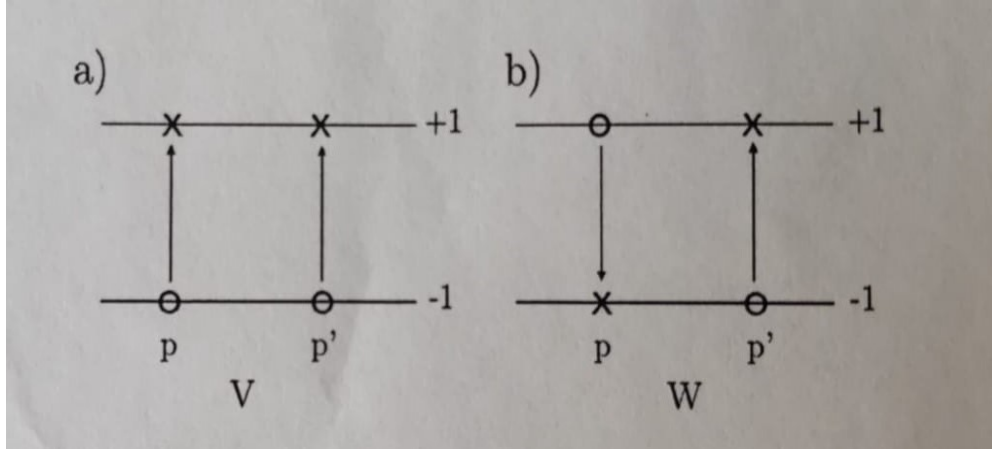


Figura 1.2: Actuación esquemática de los términos  $V$  y  $W$  del Hamiltoniano de la ecuación (1.1).

El hecho de que cada partícula tenga solo dos estados posibles conduce a usar la formulación de quasi-espín, donde los estados de las partículas y las transiciones de un estado a otro se expresan por medio de los espinores y las matrices de Pauli, respectivamente. Los operadores de quasi-espín se definen por las relaciones siguientes:

$$S_+ = \sum_p a_{p+1}^\dagger a_{p-1}, \quad S_- = \sum_p a_{p-1}^\dagger a_{p+1}, \quad S_z = \frac{1}{2} \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma}.$$

En esta formulación, el Hamiltoniano (1.1) se escribe:

$$H = \epsilon S_z + \frac{1}{2} V (S_+^2 + S_-^2) + \frac{1}{2} W (S_+ S_- + S_- S_+), \quad (1.2)$$

donde  $S_\pm = S_x \pm i S_y$  son los operadores escalera, que suben o bajan partículas de una capa a otra. Estos operadores junto con  $S_z$  definen el álgebra de Lie  $\mathfrak{su}(2)$  en el que viene descrito el Hamiltoniano, ya que obedecen las relaciones de conmutación usuales

$$[S_z, S_\pm] = \pm S_\pm, \quad [S_+, S_-] = 2S_z. \quad (1.3)$$

En todo el trabajo se van a utilizar unidades naturales  $\hbar = 1$ . Con la introducción de estos operadores, pasamos de un sistema descrito por  $N$  partículas interactuantes de espín  $1/2$  a un sistema de una única partícula de espín  $N/2$ . Como el Hamiltoniano conmuta con  $S^2$ , se puede dividir en submatrices asociadas a cada valor de  $s$  y de orden  $2s + 1$ . El operador  $S_z$  es la mitad de la diferencia entre el número de partículas en la capa superior e inferior, de modo que el máximo valor de  $S_z$ , y por tanto de  $s$ , es  $\frac{N}{2}$ . Esta simetría reduce por tanto las dimensiones de las matrices a diagonalizar de  $2^N$



a  $N + 1$ . El hecho de que en este trabajo estemos interesados en las propiedades del estado fundamental, aquél con  $S_z = -N/2$ , nos lleva a trabajar con la submatriz que contiene dicho estado, que es aquella con valor máximo de  $s$ .

Una característica derivada de la interacción del modelo, que sólo puede excitar o desexcitar pares de partículas, es que los estados que contienen un número par de partículas excitadas no se mezclan nunca con aquellos que tienen un número impar de partículas excitadas. En la formulación de quasi-espín, decimos que la interacción sólo puede cambiar el valor de  $S_z$  en dos unidades, de esta forma, para valores enteros de  $s$  (sistemas con número par de partículas), los estados con valores pares de  $S_z$  no se mezclan con los impares. En sistemas con espín semientero (número impar de partículas), los estados con  $S_z = \dots - 3/2, 1/2, 5/2 \dots$  no se mezclan con aquellos que tienen  $S_z = \dots - 5/2, -1/2, 3/2 \dots$

## 1.2. Transiciones de fase

El término transición de fase se suele utilizar para describir el cambio de estado de un sistema, como por ejemplo, las transiciones entre los estados sólido, líquido y gaseoso de la materia. Una transición de fase se produce cuando los parámetros de control del sistema alcanzan un valor concreto, en el que las variables físicas del sistema cambian cualitativamente, a menudo de manera discontinua. En ese valor concreto de los parámetros, se dice que el sistema se encuentra en un punto crítico. Estos parámetros de control son parámetros externos que varían de forma continua y definen las fases del sistema. El comportamiento macroscópico del sistema puede diferir dramáticamente de una fase a otra. Algunos ejemplos clásicos de parámetros de control, fácilmente manipulables en el laboratorio, pueden ser: la temperatura  $T$ , el campo eléctrico  $\vec{E}$ , o el campo magnético  $\vec{B}$ .

De manera más rigurosa, una transición de fase tiene lugar cuando la energía libre de Gibbs,  $G$ , no es analítica, de modo que alguna de sus derivadas presenta una discontinuidad [10]. Ehrenfest clasifica las transiciones de fase según el orden más bajo de la derivada de  $G$  con respecto a alguna variable termodinámica en la que existe una discontinuidad. De este modo, una transición de primer orden exhibe una discontinuidad en la primera derivada, una de segundo orden en la segunda derivada, etc.

Las transiciones de fase cuánticas (QPTs), a diferencia de las transiciones termodinámicas, ocurren a temperatura cero como función de un parámetro de control presente en el Hamiltoniano del sistema [11]. Aunque las QPTs se definen en el límite termodinámico, esto es, en sistemas muy grandes, se ha demostrado que se pueden observar trazas de QPTs en sistemas mesoscópicos [12]. Estas QPTs se manifiestan en una evolución no analítica del estado fundamental del sistema conforme se varía el parámetro de control del sistema, y se han estudiado ampliamente [13, 14, 15]. Los Hamiltonianos con los que se estudian las QPTs son generalmente de la forma

$$\hat{H}(\lambda) = \lambda\hat{H}_1 + (1 - \lambda)\hat{H}_2, \quad (1.4)$$

donde  $\hat{H}_1$  y  $\hat{H}_2$  son términos con distinta simetría (fase) y  $\lambda \in [0, 1]$  es el parámetro de control que lleva el sistema de una a otra. Conforme vamos variando el parámetro de control, se llega a un punto crítico  $\lambda = \lambda_c$  en el cual se produce la QPT. En este punto se observa que:

- La energía del estado fundamental  $E_0$  presenta un comportamiento no analítico como función del parámetro de control.
- 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  $\langle \hat{H}_2 \rangle_0$  presentan también comportamientos no analíticos.
- La diferencia de energía  $\Delta$  entre el estado fundamental y el primer estado excitado se hace cero cuando la transición de fase es continua.

El orden de la transición de fase está relacionado con el orden más bajo de la derivada de la energía del estado fundamental con respecto a  $\lambda$  en el que existe una discontinuidad. Las transiciones de segundo orden también se conocen como transiciones continuas.

Hasta ahora sólo hemos definido las transiciones de fase cuánticas en el estado fundamental, pero este concepto puede extenderse a estados excitados. Estas transiciones de fase cuánticas de estados excitados (ESQPTs), se definen como una evolución no analítica de los estados excitados del sistema conforme subimos en energía. Se distinguen dos tipos de ESQPTs en el límite termodinámico, una transición de primer orden presentará un cruce de niveles, mientras que una de segundo orden o continua presentará un aumento en la densidad de niveles pero sin llegar a cruzarse. Este aumento de densidad no se concentra únicamente alrededor del estado fundamental, sino que la

energía a la que se encuentra este comportamiento varía con el parámetro de control a partir de  $\lambda_c$  [16].

En este trabajo vamos a comprobar cómo el Hamiltoniano del modelo de Lipkin presenta una QPT de segundo orden en un valor crítico de  $\lambda$ , así como una ESQPT continua en  $E/N = 0$  que se propaga hacia estados excitados para  $\lambda < \lambda_c$ .

### 1.3. Quantum quench

Un *quantum quench* es un cambio abrupto en el tiempo de uno de los parámetros de control del sistema [6, 17]. Tras este cambio, se produce un proceso de relajación del sistema. En este trabajo vamos a relacionar los efectos del *quantum quench* con la presencia de una QPT en el sistema estudiando la relajación del sistema tras el *quench*. Para ello vamos a utilizar la expresión del eco de Loschmidt [8]

$$r(t) = \left| \frac{\langle \Psi_0 | e^{iH_2 t} e^{-iH_1 t} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \right|^2, \quad (1.5)$$

que, como vemos, es el solapamiento en el instante  $t$  de la evolución de  $|\Psi_0\rangle$  bajo la acción de los Hamiltonianos  $H_1$  y  $H_2$ . Estos dos Hamiltonianos son los mismos pero con distinto valor del parámetro de control  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ . El eco de Loschmidt puede entenderse como la probabilidad de que el sistema vuelva a su estado inicial al cabo de un tiempo  $t$ , y da información de cuán sensible es el sistema a perturbaciones.

Vamos a relacionar también el efecto del *quantum quench* con la presencia de transiciones de fase utilizando la correlación de dos operadores a través del tiempo, magnitud conocida como OTOC (*out-of-time-order correlator*). El OTOC está relacionado con la propagación de la información en sistemas cuánticos de muchos cuerpos y podemos definirlo a través del siguiente experimento mental: dado un Hamiltoniano  $H$  y un estado inicial  $|\Psi\rangle$ , elegimos dos operadores Hermíticos  $W$  y  $V$  y comparamos dos estados del sistema que difieren sólo en el orden temporal de las operaciones utilizadas para crearlos. Partiendo de  $|\Psi\rangle$ , un estado se obtiene aplicando  $V$ , evolucionando el sistema un tiempo  $t$ , aplicando  $W$  y finalmente evolucionando un tiempo  $-t$  para producir  $e^{iHt} W e^{-iHt} V |\Psi\rangle$ . El otro estado se obtiene evolucionando un tiempo  $t$ , aplicando  $W$ , evolucionando un tiempo  $-t$  y, por último, aplicando  $V$  resultando  $V e^{iHt} W e^{-iHt} |\Psi\rangle$ .

El solapamiento entre estos dos estados es lo que define como OTOC [9]:

$$F(t) = \langle \Psi | e^{iHt} W e^{-iHt} V e^{iHt} W e^{-iHt} V | \Psi \rangle. \quad (1.6)$$

La estructura del trabajo va a ser la siguiente: en el capítulo 2 se introduce el Hamiltoniano del modelo simplificado de Lipkin y se resolverá el sistema tanto numérica (cálculo exacto) como analíticamente haciendo uso de una aproximación de campo medio. Se analiza el espectro de energía, las derivadas de la energía frente al parámetro de control, algún parámetro de orden, etc. para identificar y clasificar las transiciones de fase que presenta el sistema. En el capítulo 3 comprobaremos el efecto que tienen las transiciones de fase en la estructura de los autoestados por medio del estudio del IPR y la distribución de Husimi así como en la evolución dinámica del sistema aplicando un *quantum quench* y estudiando el eco de Loschmidt y el OTOC. Por último, en el capítulo 4 se hará una breve recapitulación de los resultados obtenidos y se comentarán las conclusiones del trabajo.

## Capítulo 2

# Modelo simplificado de Lipkin

De acuerdo a lo explicado en la sección 1.1, el modelo de Lipkin describe un sistema compuesto de  $N$  fermiones repartidos en dos niveles separados por una cierta energía, cada uno de ellos con  $N$  espacios, en el que hay presente una interacción fermión-fermión. Un modelo de este estilo se puede emplear para describir un conjunto de  $N$  partículas de espín  $1/2$  que interactúan mutuamente en el plano  $x - y$  inmersos en un campo magnético que apunte en la dirección del eje  $z$ . El Hamiltoniano que vamos a usar para describir este sistema será parecido al descrito por la ecuación (1.2) pero con  $V = W = (\lambda - 1)$  y  $\epsilon = \lambda$

$$H = \lambda \left( S_z + \frac{N}{2} \right) + \frac{\alpha}{N} \left( \left( \frac{N}{2} \right)^2 - S_z^2 \right) - \frac{(1 - \lambda)}{N} (S_+ + S_-)^2, \quad (2.1)$$

donde  $S_z$  es la componente  $z$  de espín y  $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$  son los operadores escalera.  $\lambda \in [0, 1]$  es un parámetro de control que llevará el sistema de una fase a otra,  $N$  el número de partículas y  $\alpha$  es otro parámetro de control que puede tomar valores positivos y negativos y gobierna el comportamiento del término anharmónico. Se utilizan unidades naturales  $\hbar = 1$ . El prefactor  $1/N$  únicamente hace que la energía escale correctamente en el límite termodinámico. Durante todo el trabajo, analizaremos cómo influye el término anharmónico en los resultados que obtenemos estudiando primero el modelo con  $\alpha = 0$  y luego dándole valores a  $\alpha$ .

En este capítulo vamos a hacer primero un estudio numérico del modelo, a cuyos resultados denominaremos resultados exactos. A partir del análisis de estos resultados podremos obtener información de la transición de fase que presenta el modelo: de qué

orden es, para qué valor del parámetro de control se produce, etc. Posteriormente, vamos a realizar una aproximación de campo medio en la que introduciremos una base de estados coherentes de espín y obtendremos una solución analítica del modelo en el límite termodinámico con  $N \rightarrow \infty$ . Compararemos lo obtenido analíticamente con los resultados exactos previos para ver si conforme aumentamos el número de partículas, los resultados exactos tienden a los analíticos.

## 2.1. Estudio exacto del modelo

Lo primero que debemos hacer para resolver el problema, según se detalla en el apéndice A, es encontrar una base adecuada para diagonalizar el Hamiltoniano. Tal como vimos en la sección 1.1, la matriz hamiltoniana se divide en  $s$  submatrices de dimensión  $2s+1$ . Como estamos interesados en las propiedades del estado fundamental, nos vamos a quedar únicamente con la submatriz que lo contiene, esto es, la de espín máximo  $s = N/2$ . Una base adecuada será, por tanto, la base de espín definida por

$$|s, m_s\rangle \quad s = N/2; m_s = -N/2, \dots, 0, \dots, N/2. \quad (2.2)$$

Para obtener los elementos de matriz  $\langle s, m'_s | H | s, m_s \rangle$ , utilizamos las ecuaciones de autovalores de los operadores de espín sobre la base  $|s, m_s\rangle$ :

$$\begin{aligned} S_z |s, m_s\rangle &= m_s |s, m_s\rangle, \\ S_+ |s, m_s\rangle &= \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} |s, m_s+1\rangle, \\ S_- |s, m_s\rangle &= \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)} |s, m_s-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Vemos cómo  $S_+$  sube una unidad la proyección de espín sobre el eje  $z$  mientras que  $S_-$  baja una unidad. Con las ecuaciones (2.3), la propiedad de ortonormalidad de los elementos de la base  $\langle s, m'_s | s, m_s \rangle = \delta_{m'_s, m_s}$  y el Hamiltoniano de la ecuación (2.1), podemos construir todos los elementos de la matriz hamiltoniana:

$$\langle s, m'_s | H | s, m_s \rangle = \left( \lambda m_s + \frac{\lambda N}{2} + \frac{\alpha N}{4} - \frac{\alpha}{N} m_s^2 - \frac{1-\lambda}{N} \left( N \left( \frac{N}{2} + 1 \right) - 2m_s^2 \right) \right) \delta_{m'_s, m_s} -$$

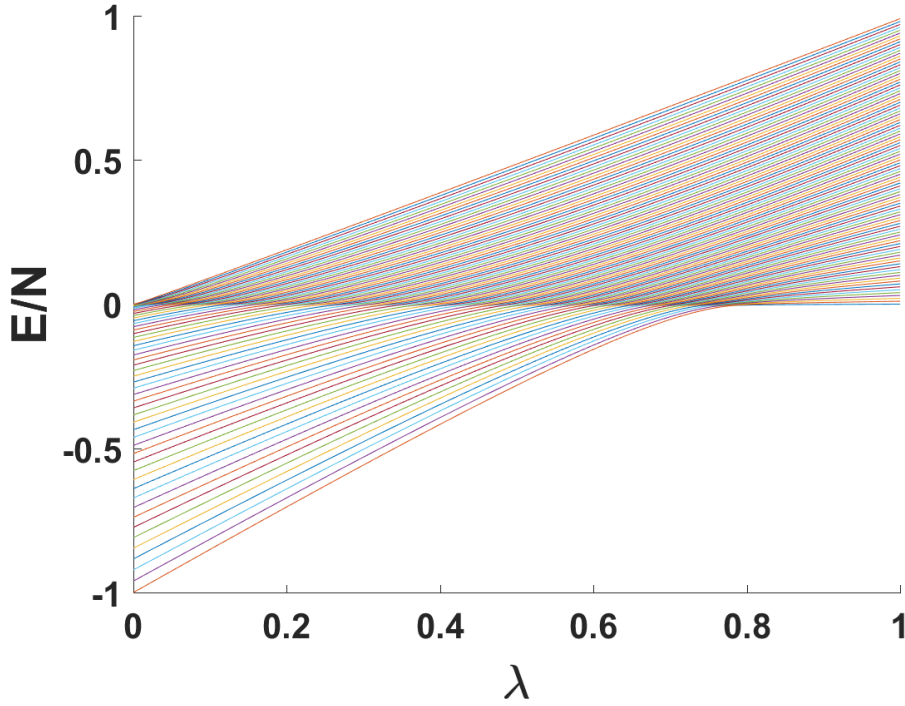


Figura 2.1: *Espectro de energía por partícula como función del parámetro  $\lambda$  para  $\alpha = 0$  y  $N = 100$ .*

$$\begin{aligned}
 & - \left( \frac{1-\lambda}{N} \sqrt{\frac{N}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right) - m_s (m_s + 1)} \sqrt{\frac{N}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right) - (m_s + 1) (m_s + 2)} \right) \delta_{m'_s, m_{s+2}} - \\
 & - \left( \frac{1-\lambda}{N} \sqrt{\frac{N}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right) - m_s (m_s - 1)} \sqrt{\frac{N}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right) - (m_s - 1) (m_s - 2)} \right) \delta_{m'_s, m_{s-2}}.
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Con los elementos de la ecuación (2.4) formamos una matriz cuadrada tridiagonal de dimensión  $N + 1$ . Tal y como se introduce en la sección 1.1, el Hamiltoniano de la ecuación (2.1) conserva la paridad, luego la matriz se divide en dos bloques, uno de dimensión  $D_{par} = N/2 + 1$  con paridad par y otro de dimensión  $D_{impar} = N/2$  con paridad impar. Haciendo uso del programa de Matlab que aparece en el apéndice C, diagonalizamos la matriz y obtenemos los autovalores de la energía y los autovectores según lo explicado en el apéndice A. Éstos resultados dependen del valor de los parámetros del Hamiltoniano  $\lambda$  y  $\alpha$  así como del número de partículas  $N$  del sistema. Vamos a estudiar primero los resultados obtenidos para  $\alpha = 0$  y después veremos qué ocurre para otros valores de  $\alpha$ .

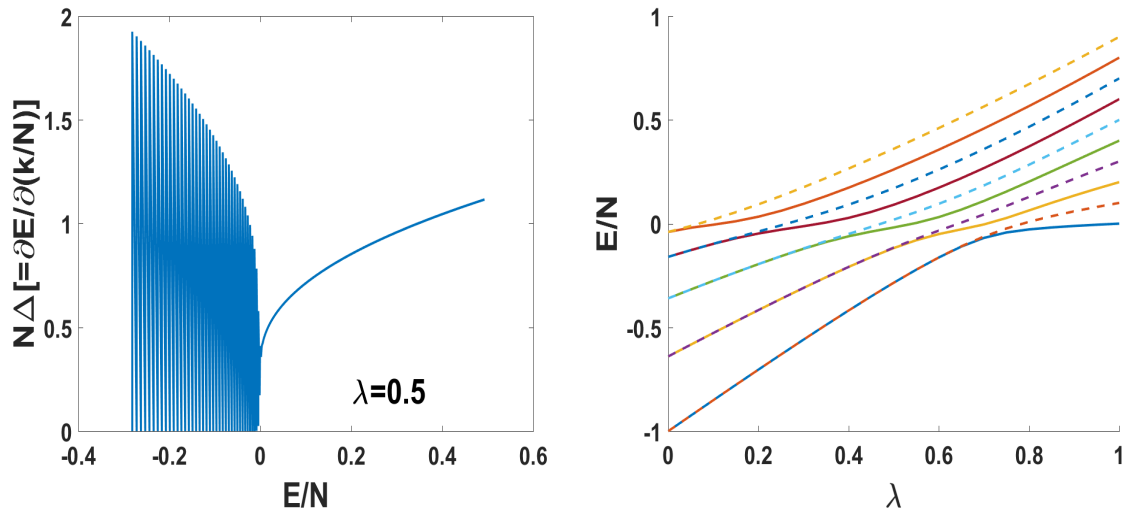


Figura 2.2: Izquierda: salto escalado entre niveles de energía consecutivos frente a la energía por partícula para  $\lambda = 0.5$  y  $N = 200$ . Derecha: Espectro de energía por partícula frente a  $\lambda$  para  $N = 10$ . Las líneas continuas representan estados pares y las discontinuas estados impares.

### 2.1.1. Modelo con $\alpha = 0$

En la figura 2.1 se representa la energía por partícula frente a  $\lambda$  y observamos que en el caso de  $\alpha = 0$  el espectro se divide en dos regiones: una para  $E/N < 0$  y otra con  $E/N > 0$ . En la región de energía negativa los resultados indican que tenemos una degeneración doble de niveles de energía, dicha degeneración no existe en  $E/N > 0$ . En la figura 2.2, representamos el espectro para un número más pequeño de partículas diferenciando entre estados pares e impares, entendiendo como estados pares (impares) aquellos con  $(-1)^{(S+S_z)} = +1$  ( $-1$ ). Vemos que la degeneración observada se debe a la degeneración existente entre estados pares e impares para  $E/N < 0$ . También en la figura 2.2, representamos el salto de energía existente entre estados consecutivos para un mismo  $\lambda$ . Se visualiza esta degeneración y cómo desaparece a partir de  $E/N = 0$ . Además, el salto se va haciendo más pequeño a medida que nos acercamos a la energía  $E = 0$ , para después volver a crecer, lo que indica un aumento de densidad de estados alrededor de esta región.

Con respecto al estado fundamental, analizando sus derivadas numéricas en la figura 2.3 observamos que tenemos una QPT de segundo orden, pues la segunda derivada es discontinua. Además, analizando el valor esperado de  $S_z$  en el estado fundamental en la figura 2.4, a modo de parámetro de orden, observamos que la transición de fase se produce cerca del punto crítico  $\lambda_c \approx 0.8$ . Se ha representado el operador  $\left(\frac{S_z + N/2}{N}\right)$  por



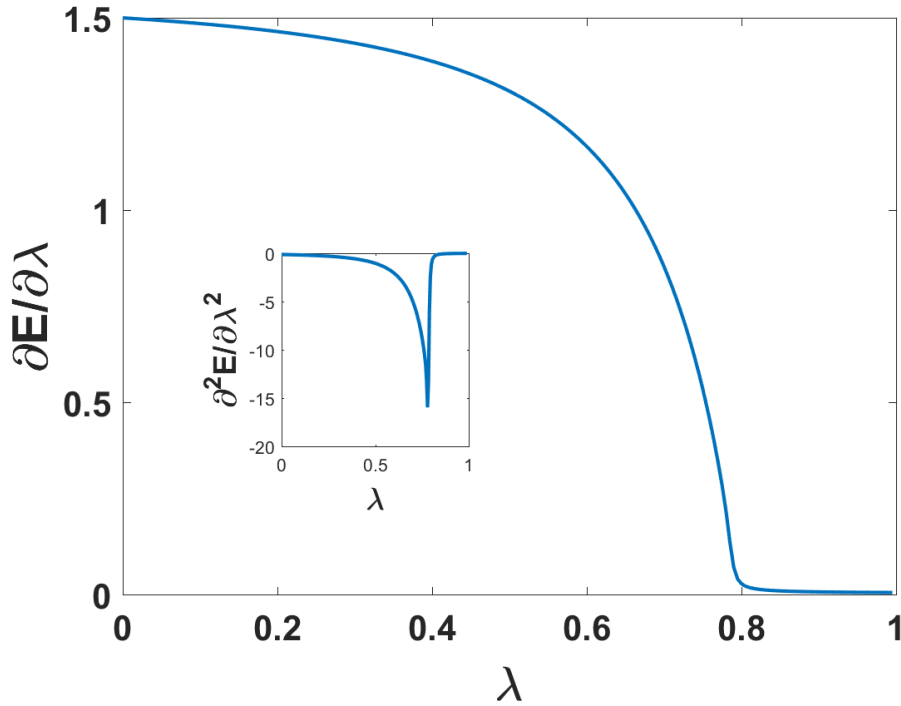


Figura 2.3: Primera derivada del estado fundamental con respecto al parámetro  $\lambda$  con  $\alpha = 0$  y  $N = 200$ . En el recuadro interior aparece la segunda derivada con respecto a  $\lambda$ .

sencillez en el escalado y para que el parámetro de orden se haga nulo para  $\lambda > \lambda_c$ , pues normalmente por definición los parámetros de orden para el estado fundamental toman valor cero en una de las fases, aunque más adelante veremos que esto no se cumple en el caso de estados excitados. Cuando  $\lambda = 0$ , es decir, cuando nos encontramos en la fase definida por  $-\frac{1}{N}(S_+ + S_-)^2$ , el valor esperado  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle = 1/2$ , lo que quiere decir que en esta fase, el valor esperado de la proyección de espín en la dirección  $z$  es  $\langle S_z \rangle = 0$ . El valor esperado  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle$  va decreciendo hasta que en el punto crítico  $\lambda_c$  toma el valor  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle = 0$ , o lo que es lo mismo,  $\langle S_z \rangle = -N/2$ , que se corresponde con el valor que toma  $S_z$  en el estado fundamental del modelo de Lipkin, en el que todas las partículas están en la capa inferior. Estos valores se mantienen constantes desde  $\lambda_c$  hasta  $\lambda = 1$ , es decir cuando estamos en la otra fase definida por  $(S_z + \frac{N}{2})$ .

Hemos visto cómo tanto la derivada de la energía en el estado fundamental como el valor esperado de  $(\frac{S_z + N/2}{N})$  tienen una forma muy similar. Este hecho se debe a que estas dos magnitudes están relacionadas por el teorema de Hellmann–Feynman, que se expresa de la siguiente forma:

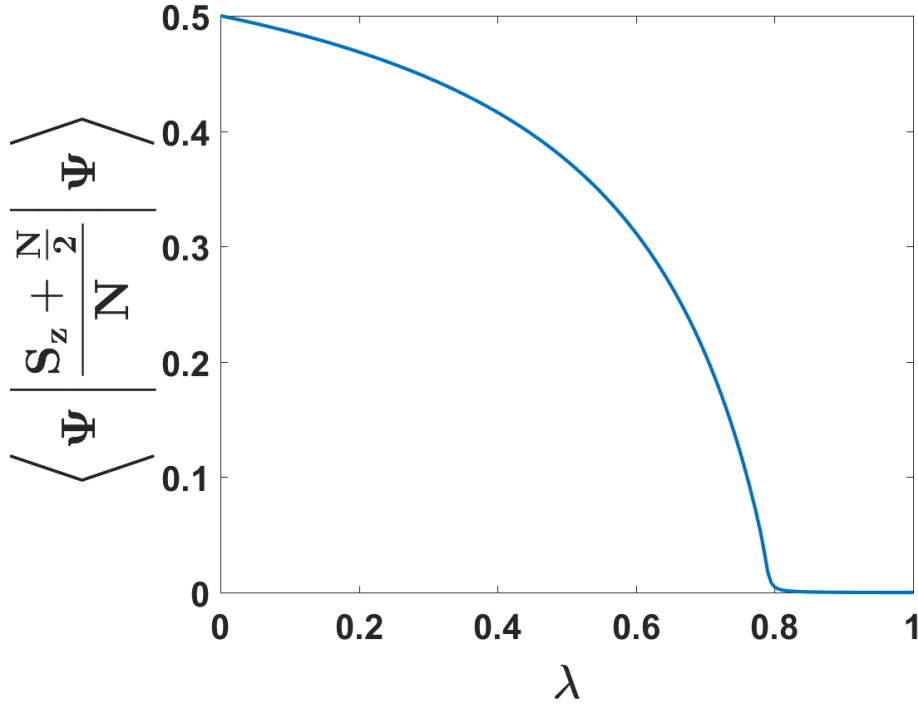


Figura 2.4: Valor esperado del operador  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle$  en el estado fundamental en función del parámetro  $\lambda$  para  $\alpha = 0$  y  $N = 200$ .

$$\frac{dE}{d\lambda} = \langle \Psi | \frac{dH}{d\lambda} | \Psi \rangle. \quad (2.5)$$

Con el Hamiltoniano dado en la ecuación (2.1), la relación entre la derivada de la energía y el valor esperado de nuestro parámetro de orden  $S_z$  es, según (2.5):

$$\frac{dE}{d\lambda} = \langle \Psi | S_z + \frac{N}{2} | \Psi \rangle + \frac{1}{N} \langle \Psi | (S_+ + S_-)^2 | \Psi \rangle. \quad (2.6)$$

A partir de esta ecuación vemos que la diferencia entre ambas es únicamente el valor esperado del operador  $\frac{1}{N} (S_+ + S_-)^2$ , que se comporta de manera parecida a  $\left(\frac{S_z + N/2}{N}\right)$ , es por ello que la forma es similar.

Hasta aquí llega la discusión acerca del estado fundamental, a continuación vamos a estudiar los estados excitados. Si observamos la figura 2.5, vemos que en esa región crítica en  $E = 0$  de la que antes hablábamos, la densidad de estados presenta un pico muy marcado para valores por debajo del valor crítico de  $\lambda_c = 0.8$ . De acuerdo a lo visto en la sección 1.2, podemos decir que existe una ESQPT continua para  $\lambda < \lambda_c$ . Una variable interesante para el estudio de los estados excitados es  $k/N$ , donde  $k$  es el  $k$ -ésimo estado excitado. Esta magnitud es esencialmente continua para un

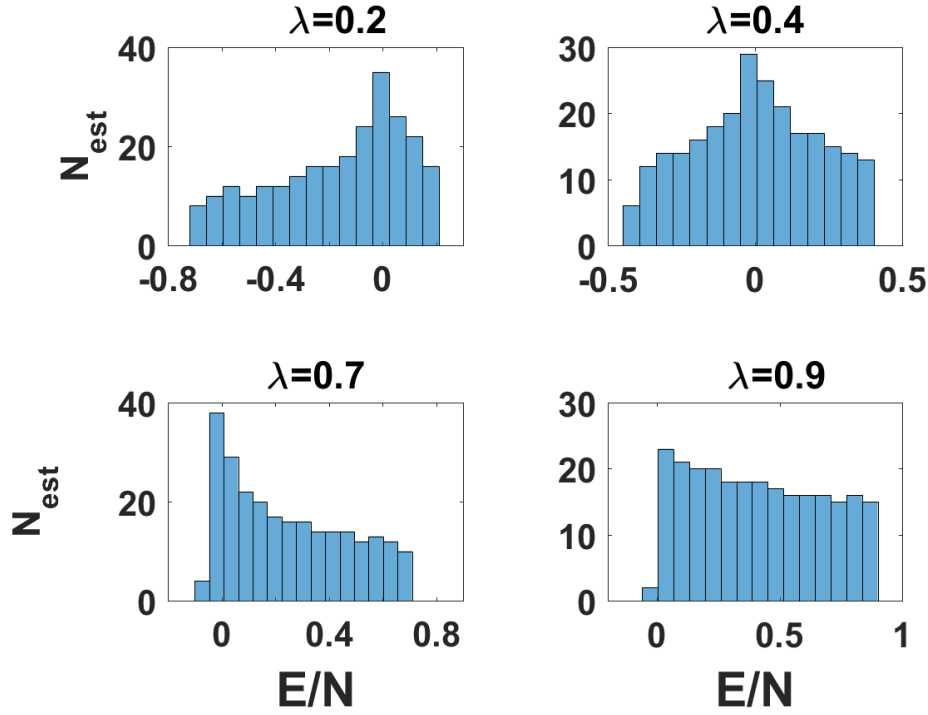


Figura 2.5: *Densidad de estados para distintos valores del parámetro  $\lambda$  con  $\alpha = 0$  y  $N = 250$*

número grande de partículas. Estudiando las derivadas y el parámetro de orden para los estados excitados, magnitudes que hemos visto que están relacionadas, y a partir de las singularidades que presentan, podemos advertir la presencia de transiciones de fase. En la figura 2.6 vemos cómo la derivada de un estado excitado, en este caso el estado excitado  $k/N = 0.3$ , tiende hacia cero de manera abrupta con una curvatura que se hace infinita y cambia de signo en las proximidades de la ESQPT, siendo la tendencia más marcada a medida que aumentamos  $N$ . Tenemos una transición de segundo orden pues la segunda derivada es discontinua. Observamos que los estados excitados también presentan un punto crítico del parámetro de control  $\lambda_c|_{k/N=0.3} \approx 0.58$  en el que se produce la transición; sin embargo, este valor crítico es único de cada estado excitado y distinto del que se obtiene para el estado fundamental. Como puede intuirse si nos fijamos en el espectro de energía de la figura 2.1, en términos de  $k/N$ , el valor crítico del parámetro para un estado excitado será menor cuanto mayor sea el estado excitado. Más adelante en este trabajo, en la sección 2.2, obtendremos una forma analítica de hallar estos valores críticos del parámetro.

Por otra parte, en la figura 2.7 vemos cómo el parámetro de orden toma el valor  $\langle S_z \rangle = 0$  cuando  $\lambda = 0$  (nos encontramos en la fase definida por  $-\frac{1}{N}(S_+ + S_-)^2$ ) y tiene un marcado descenso hacia  $\langle S_z \rangle = -N/2$  alrededor del punto crítico  $\lambda_c|_{k/N=0.3}$

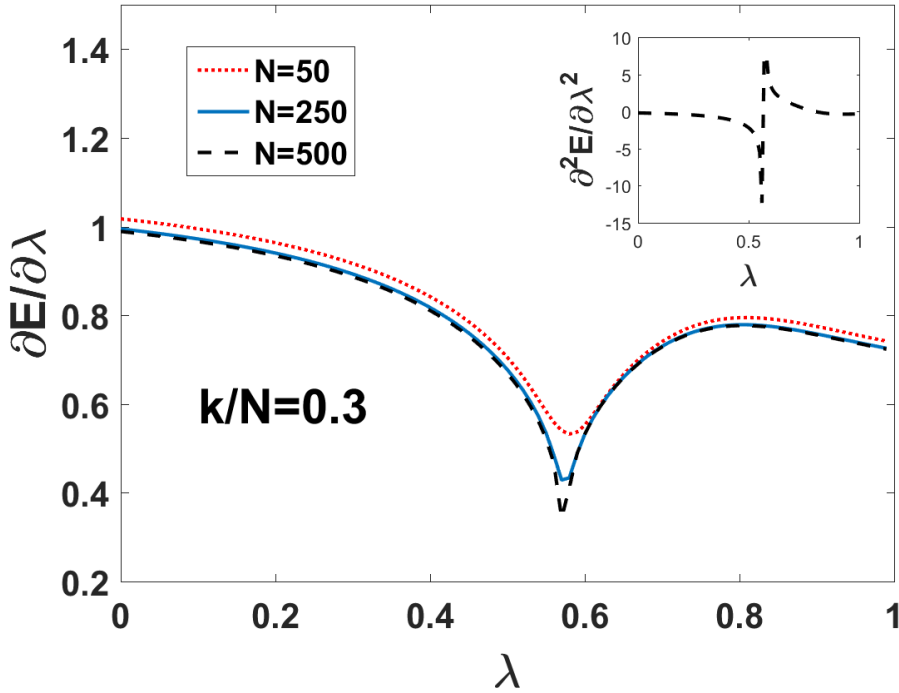


Figura 2.6: Primeras derivadas del estado excitado  $k/N=0.3$  para distintos  $N$  con respecto al parámetro  $\lambda$  y  $\alpha = 0$ . En el recuadro interior aparece la segunda derivada con respecto a  $\lambda$  para  $N = 500$ .

correspondiente a la ESQPT, siendo este valor del parámetro de orden el que toma el sistema cuando se encuentra en la fase definida por  $\lambda \left( S_z + \frac{N}{2} \right)$ . Luego, a diferencia de lo que ocurría en el estado fundamental, vuelve a crecer hacia el valor  $k/N$ . Vemos así como en el caso de estados excitados el parámetro de orden no se hace nulo en ninguna de las fases. Estos resultados se ajustan a lo que predice el análisis semiclásico del sistema [16, 19].

Observamos que la ESQPT puede "cruzarse" tanto horizontal (variando  $\lambda$ ) como verticalmente (variando  $k/N$ , o lo que es equivalente, la energía  $E/N$ ). En la figura 2.2 comprobamos cómo el salto de energía entre estados para  $\lambda = 0.5$  se va haciendo cada vez más pequeño a medida que nos acercamos a la energía a la que se produce la ESQPT ( $E/N = 0$ ) y después vuelve a crecer, esta propiedad definía las ESQPTs continuas. Otra forma de "cruzar" verticalmente esta ESQPT consiste en analizar cómo varía el valor esperado de  $S_z$  en función de la energía para un valor fijo  $\lambda$  (figura 2.8). Aquí, el valor esperado tomará valores cercanos a  $\langle S_z \rangle = 0$  para aquellos estados por debajo de la ESQPT, será además más cercano a cero cuanto más lo sea  $\lambda$ , por lo explicado en el caso del estado fundamental. En la región cercana a la ESQPT sufrirá un marcado descenso hacia  $\langle S_z \rangle = -N/2$ , valor que toma cuando el sistema se encuentra en la fase

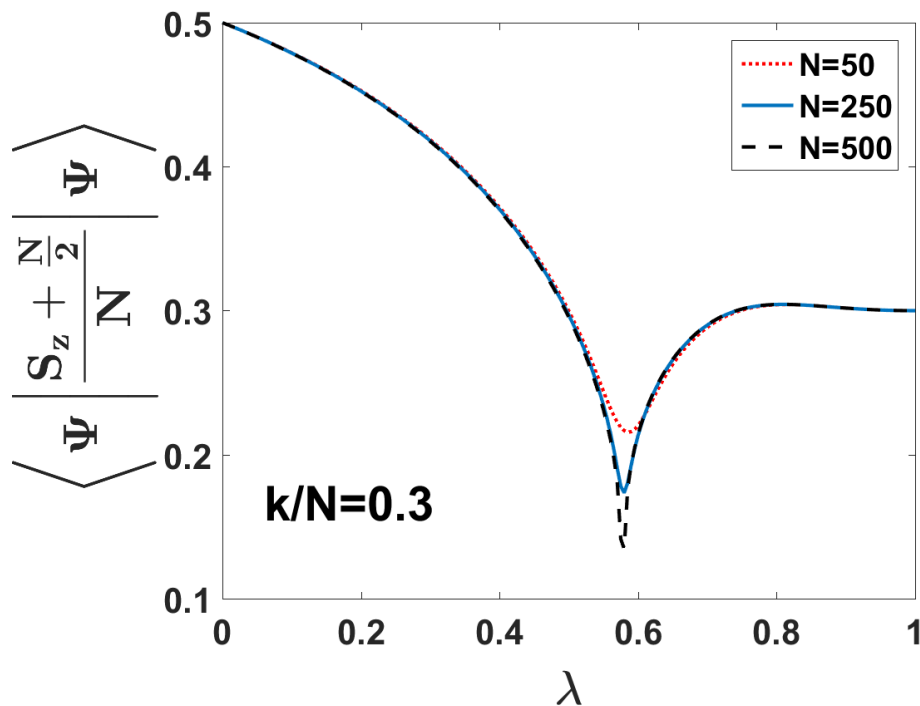


Figura 2.7: Valor esperado del operador  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle$  en el estado excitado  $k/N = 0.3$  para distintos  $N$  en función del parámetro  $\lambda$  para  $\alpha = 0$ .

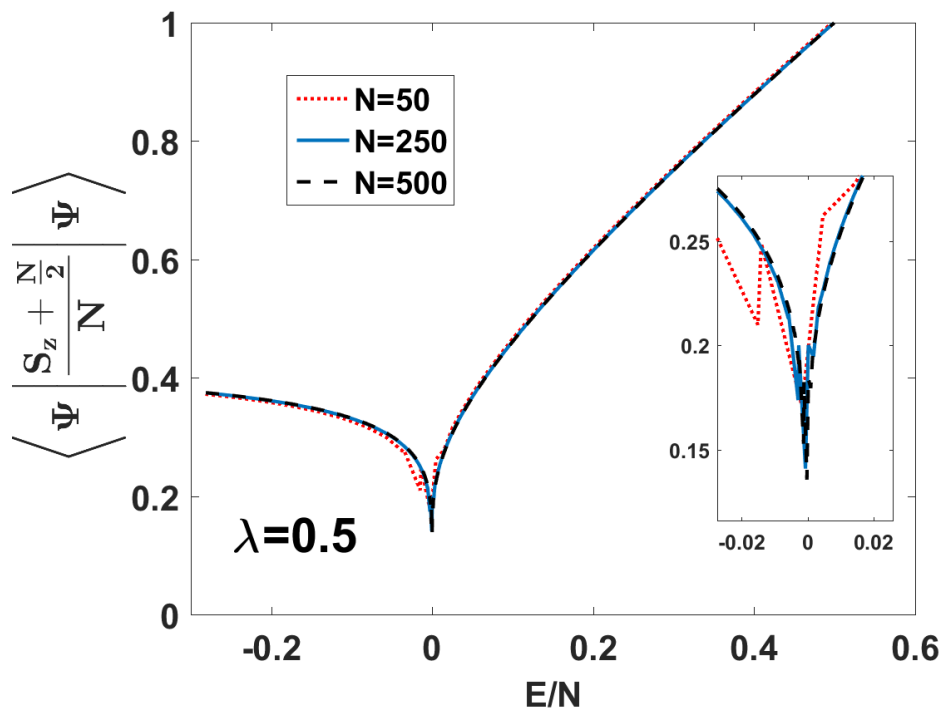


Figura 2.8: Valor esperado del operador  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle$  en función de la energía con un valor fijo del parámetro  $\lambda = 0.5$  para distintos  $N$  y  $\alpha = 0$ .

dada por  $(S_z + \frac{N}{2})$ , y luego crecerá hasta alcanzar el valor  $\langle S_z \rangle = N/2$  para el estado más excitado del modelo, en el que todas las partículas están en la capa superior. Cabe destacar que a medida que crece  $N$  el comportamiento es más suave y continuo. A su vez, podremos "cruzar" horizontalmente la ESQPT analizando el valor esperado en un estado excitado de algún parámetro de orden, en este caso  $S_z$ , en función de  $\lambda$  (figura 2.7).

En todo este apartado hemos visto cómo se advierte la presencia de transiciones de fase cuánticas en un sistema a partir del espectro de energía y otras propiedades del sistema, y hemos señalado cómo los resultados se ajustan a lo esperado de los estudios semiclásicos conforme aumentamos el número de partículas. En base a esto, podemos decir que con  $\alpha = 0$  el modelo presenta una QPT de segundo orden alrededor de  $\lambda_c = 0.8$  y una ESQPT continua en  $E/N = 0$ .

### 2.1.2. Modelo con $\alpha = 1$

A continuación vamos a estudiar qué le ocurre a nuestro sistema cuando introduzcamos el término anarmónico dándole valores al parámetro  $\alpha$  [18]. En este trabajo nos vamos a centrar únicamente en valores positivos de  $\alpha$ . Tomando  $\alpha = 1$ , obtenemos el espectro de energía que aparece en la figura 2.9. En este caso vemos que aparece una nueva línea crítica en regiones de  $E/N > 0$ , concretamente para  $E/N = \lambda$ , que se suma a la ya conocida línea crítica en  $E/N = 0$ . Analizando en la figura 2.10 el salto de energía entre niveles, la densidad de estados y las derivadas tanto del estado fundamental como de un par de estados excitados, concluimos que el sistema presenta dos ESQPTs continuas en esas regiones críticas. El comportamiento de las derivadas cambia en función de que atravesemos una u otra: para la ESQPT que se encuentra en  $E/N = 0$ , la derivada presenta un mínimo y un cambio de curvatura discontinuo positivo en el punto crítico; para la que se encuentra en  $E/N > 0$ , la derivada presenta un máximo local y un cambio de curvatura discontinuo negativo para luego seguir creciendo. El valor esperado de  $S_z$  en función de la energía por partícula para un  $\lambda$  fijo presenta un comportamiento similar al caso con  $\alpha = 0$ , con la diferencia de que en vez de tender a  $\langle S_z \rangle = N/2$  para el estado más excitado, obtenemos un pico marcado hacia este valor en la ESQPT situada en  $E/N = \lambda$  y luego desciende. Este descenso hacia  $\langle S_z \rangle = 0$  es mucho más marcado para valores pequeños de  $\lambda$  y es un comportamiento análogo al que presenta  $S_z$  antes de la primera ESQPT. En cuanto al salto de energía entre niveles, vemos que existe degeneración en todas las zonas excepto entre las dos

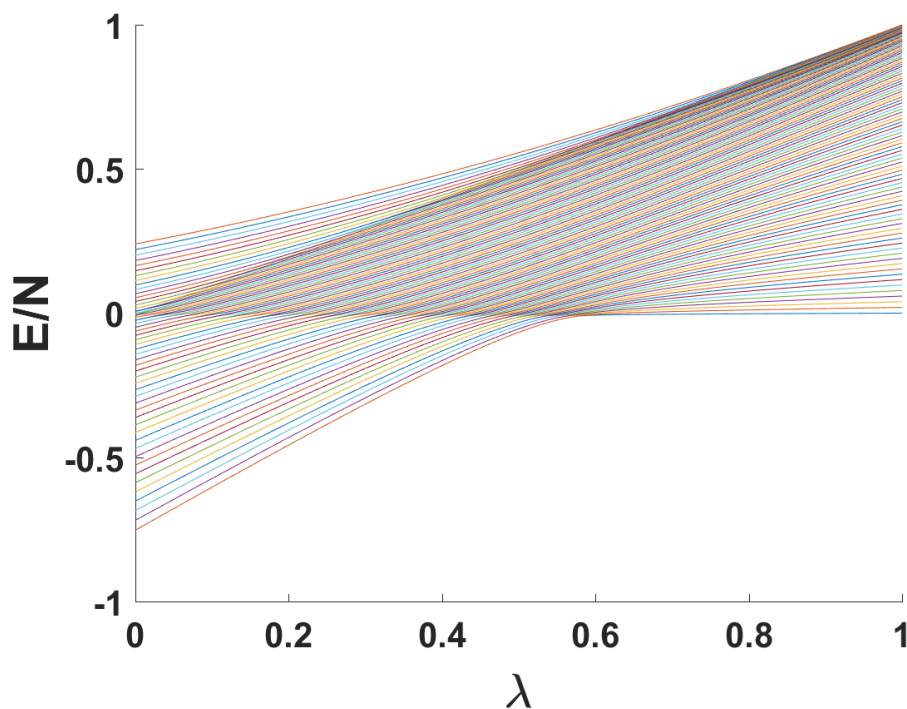


Figura 2.9: *Espectro de energía por partícula como función del parámetro  $\lambda$  con  $N = 100$  para  $\alpha = 1$ .*

líneas críticas, y que además la densidad de estados es máxima en estas dos líneas. Con respecto al estado fundamental, vemos que la transición de segundo orden se produce en  $\lambda_c = 0.6$ . En resumen, el término anarmónico con  $\alpha = 1$  hace que la QPT del estado fundamental se produzca para valores más pequeños de  $\lambda$  y genera en el sistema una segunda ESQPT continua en  $E/N = \lambda$ .

## 2.2. Aproximación de campo medio

Una vez hemos obtenido las soluciones exactas (numéricas) del sistema, vamos a obtener una solución analítica por medio de una aproximación de campo medio [19]. La idea fundamental de la aproximación de campo medio es que, cuando el sistema es suficientemente grande, la interacción que sufre una partícula con el resto se puede aproximar por una interacción de campo medio que surge del conjunto de la acción de todas las partículas del sistema. De esta manera, los operadores que describen el Hamiltoniano se sustituyen por sus valores esperados en dicho campo.

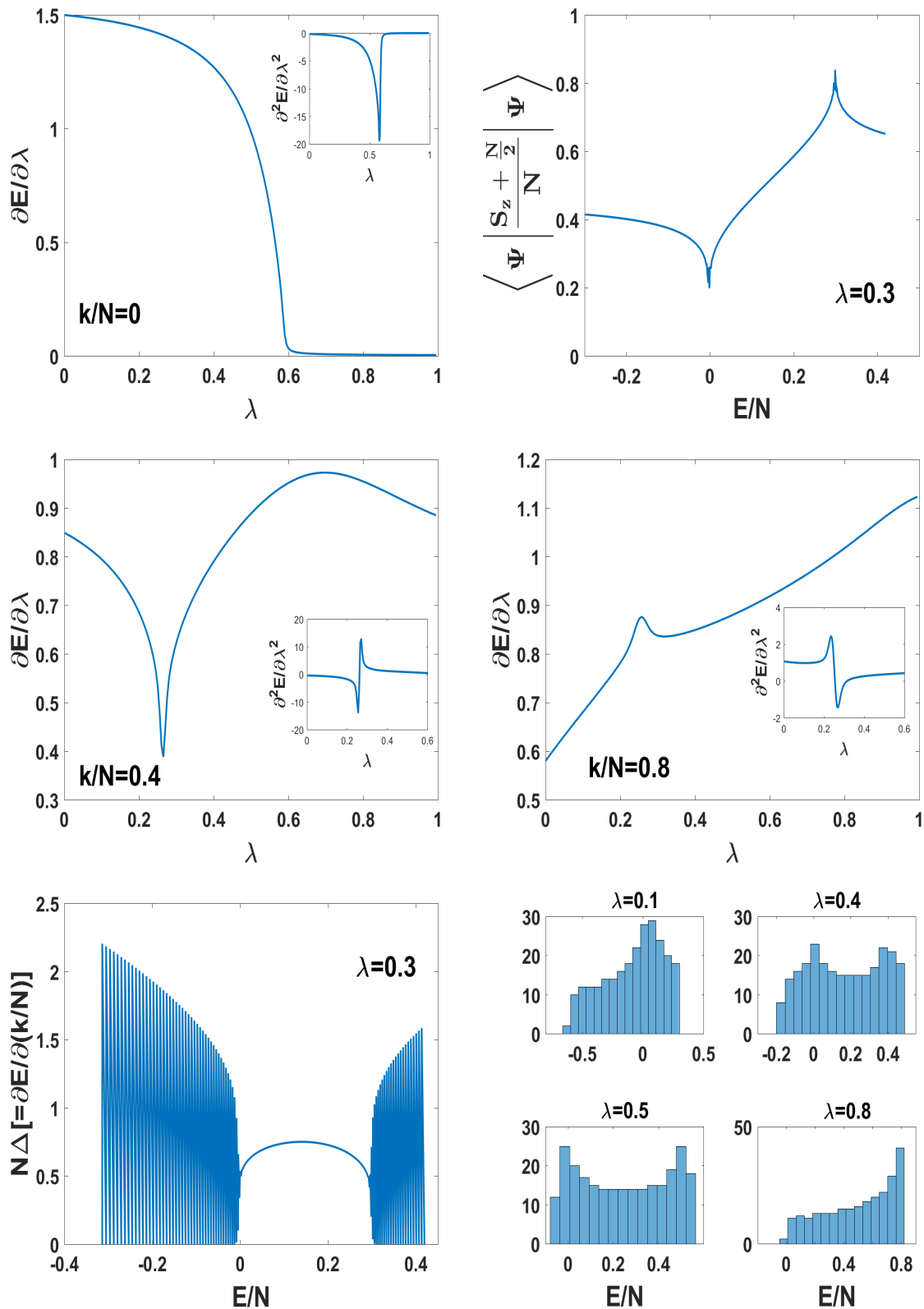


Figura 2.10: Resultados del sistema con  $\alpha = 1$  y  $N = 250$ . Arriba Izq: Derivadas de la energía del estado fundamental con respecto a  $\lambda$ . Arriba Der: Valor esperado del parámetro de orden  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle$  en función de la energía. Medio Izq: Derivadas de la energía del estado excitado  $k/N = 0.4$  con respecto a  $\lambda$ . Medio Der: Derivadas de la energía del estado excitado  $k/N = 0.8$  con respecto a  $\lambda$ . Abajo Izq: salto escalado de energía entre estados para  $\lambda = 0.3$ . Abajo Der: Densidad de estados con respecto a la energía.



A priori no tenemos una expresión para el campo medio, por lo que vamos a hacer un tratamiento variacional en el que utilizaremos una función de prueba que dependerá de algún parámetro. Se puede demostrar que  $\langle \psi(\beta) | H | \psi(\beta) \rangle \geq E_0$ , donde  $|\psi(\beta)\rangle$  es la familia de funciones de prueba y  $E_0$  la energía real del estado fundamental del sistema. Si en la familia de funciones de prueba que hemos utilizado está la que verdaderamente describe al sistema, la energía que obtengamos por este método coincidirá con la del estado fundamental real. En caso contrario, obtendremos una energía  $E > E_0$ .

Vamos a utilizar como función de prueba los estados coherentes de espín [22]. Estos estados minimizan la relación de indeterminación de Heisenberg. En este sentido, son la mejor aproximación cuántica de estados clásicos y, además, forman una base sobrecompleta. El estado coherente de espín normalizado se define como

$$|s, \beta\rangle = \frac{e^{\beta S_+}}{(1 + \beta\beta^*)^s} |s, -s\rangle, \quad (2.7)$$

donde  $\beta$  es un parámetro complejo,  $S_+$  el operador de espín escalera y  $|s, -s\rangle \equiv |-s\rangle$  es el estado de espín de proyección más baja. En nuestro caso recordamos que  $s = N/2$ . Con estos estados, vamos a calcular el valor esperado de la energía y luego la minimizaremos. Para obtener la funcional de energía  $\langle s, \beta | H | s, \beta \rangle$ , donde  $H$  viene dado por la ecuación (2.1), haremos uso de las relaciones obtenidas en el apéndice B:

$$\begin{aligned} S_+ |s, \beta\rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta} |s, \beta\rangle, \\ S_- |s, \beta\rangle &= \left(2s\beta - \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta}\right) |s, \beta\rangle, \\ S_z |s, \beta\rangle &= \left(\beta \frac{\partial}{\partial \beta} - s\right) |s, \beta\rangle. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Con las ecuaciones (2.8), hallamos los términos del Hamiltoniano:

$$\langle s, \beta | S_+^2 | s, \beta \rangle = \frac{2s(2s-1)\beta^{*2}}{(1 + \beta\beta^*)^2}, \quad (2.9)$$

$$\langle s, \beta | S_-^2 | s, \beta \rangle = \frac{2s(2s-1)\beta^2}{(1 + \beta\beta^*)^2}, \quad (2.10)$$

$$\langle s, \beta | S_z | s, \beta \rangle = \frac{s(\beta\beta^* - 1)}{(1 + \beta\beta^*)}, \quad (2.11)$$

$$\langle s, \beta | S_z^2 | s, \beta \rangle = \frac{s(s\beta^2\beta^{*2} - 2s\beta\beta^* + s + 2\beta\beta^*)}{(1 + \beta\beta^*)^2}, \quad (2.12)$$

$$\langle s, \beta | S_+ S_- | s, \beta \rangle = \frac{2s\beta\beta^*(2s + \beta\beta^*)}{(1 + \beta\beta^*)^2}, \quad (2.13)$$

$$\langle s, \beta | S_- S_+ | s, \beta \rangle = \frac{2s(2s\beta\beta^* + 1)}{(1 + \beta\beta^*)^2}. \quad (2.14)$$

Con todos estos términos y sabiendo que  $s = \frac{N}{2}$ , el valor esperado de la energía por partícula para el Hamiltoniano de la ecuación (2.1) queda:

$$\begin{aligned} \frac{E}{N}(\beta; \lambda, \alpha) &= \frac{\lambda\beta\beta^*}{(1 + \beta\beta^*)} + \frac{\alpha\beta\beta^*}{(1 + \beta\beta^*)^2} - \frac{\alpha\beta\beta^*}{N(1 + \beta\beta^*)^2} \\ &- (1 - \lambda) \left( \frac{(\beta^2 + 2\beta\beta^* + \beta^{*2})}{(1 + \beta\beta^*)^2} + \frac{(\beta^2 - 1)(\beta^{*2} - 1)}{N(1 + \beta\beta^*)^2} \right). \end{aligned} \quad (2.15)$$

La aproximación de campo medio solamente tiene sentido para sistemas muy grandes de partículas, o lo que es lo mismo, en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ . Aplicando esta aproximación en la ecuación (2.15) obtenemos

$$\frac{E}{N}(\beta; \lambda, \alpha) = \frac{\lambda\beta\beta^*}{(1 + \beta\beta^*)} + \frac{\alpha\beta\beta^*}{(1 + \beta\beta^*)^2} - (1 - \lambda) \frac{\beta^2 + 2\beta\beta^* + \beta^{*2}}{(1 + \beta\beta^*)^2}. \quad (2.16)$$

O lo que es equivalente, escribiendo el parámetro  $\beta$  en su forma polar  $\beta = |\beta|e^{i\phi}$ :

$$\frac{E}{N}(\beta; \lambda, \alpha) = \frac{\lambda|\beta|^2}{(1 + |\beta|^2)} + \frac{\alpha|\beta|^2}{(1 + |\beta|^2)^2} - (1 - \lambda) \frac{|\beta|^2 e^{i2\phi} + 2|\beta|^2 + |\beta|^2 e^{-i2\phi}}{(1 + |\beta|^2)^2}. \quad (2.17)$$

Ahora vamos a derivar esta expresión con respecto a  $|\beta|$  y  $\phi$  e igualarla a cero para encontrar la energía mínima:

$$\frac{\partial E}{\partial \phi N} = -(1 - \lambda) \frac{i2|\beta|^2 (e^{i2\phi} - e^{-i2\phi})}{(1 + |\beta|^2)^2} = 0. \quad (2.18)$$

De la ecuación (2.18) obtenemos  $e^{i2\phi} = \pm 1 \Rightarrow \phi = 0, \pi/2, \pi$ . La otra derivada es:

$$\frac{\partial E}{\partial |\beta| N} = \frac{2\lambda|\beta|}{(1 + |\beta|^2)^2} - \frac{2\alpha|\beta|(|\beta|^2 - 1)}{(1 + |\beta|^2)^3} + (1 - \lambda) \frac{2|\beta|(|\beta|^2 - 1)e^{-i2\phi}(1 + e^{i2\phi})^2}{(1 + |\beta|^2)^3} = 0. \quad (2.19)$$

De aquí obtenemos tres soluciones:

$$|\beta| = 0, \quad (2.20)$$

$$|\beta| = \frac{\sqrt{\alpha + \lambda}}{\sqrt{\alpha - \lambda}}, \quad (2.21)$$

$$|\beta| = \frac{\sqrt{\alpha + 5\lambda - 4}}{\sqrt{\alpha + 3\lambda - 4}}. \quad (2.22)$$

De estas tres soluciones, sólo nos quedaremos con (2.20), (2.22) y  $e^{i2\phi} = 1$ , ya que se puede comprobar que la energía que da la solución (2.21) es siempre mayor que alguna de las otras en función de  $\lambda$ . En cuanto a la solución (2.22), observamos que para que exista solución el signo del numerador y del denominador deben ser iguales ya que el radicando tiene que ser positivo, esto nos da un rango de valores de  $\lambda$  en los que esta solución existe:  $\lambda \leq \frac{4-\alpha}{5} \cup \lambda \geq \frac{4-\alpha}{3}$  con  $\lambda \in [0, 1]$ . No obstante, se puede comprobar también que la energía que da la solución (2.22) sólo es menor que la de (2.20) en el caso  $\lambda \leq \frac{4-\alpha}{5}$ . A partir de esto encontramos el punto crítico  $\lambda_c = \frac{4-\alpha}{5}$  en el que se produce la transición de fase. La energía mínima para el valor de equilibrio  $\beta_e$  puede entonces expresarse en función de los parámetros  $\lambda$  y  $\alpha$  de la siguiente forma:

$$|\beta_e| = 0, \sqrt{\frac{\alpha + 5\lambda - 4}{\alpha + 3\lambda - 4}}, \quad (2.23)$$

$$\frac{E_{min}}{N}(\beta_e; \lambda, \alpha) = \begin{cases} \frac{(\alpha+5\lambda-4)^2}{[4(\alpha+4\lambda-4)]} & \lambda < \lambda_c, \\ 0 & \lambda \geq \lambda_c. \end{cases} \quad (2.24)$$

En el caso de  $\alpha = 0$ , obtenemos un valor crítico  $\lambda_c = 0.8$ , que se corresponde con el valor exacto que encontramos numéricamente. En la figura 2.11 observamos la energía del estado fundamental obtenida con la aproximación de campo medio comparada con la exacta, se ve como a medida que aumentamos el número de partículas  $N$  los resultados exactos se aproximan al obtenido analíticamente. Esto tiene mucho sentido puesto que la aproximación la hemos hecho en el límite termodinámico con  $N \rightarrow \infty$ . De manera similar, en la figura 2.12 vemos el valor esperado del parámetro de orden  $S_z$  obtenido analíticamente por medio de la ecuación 2.11 y la comparación con los resultados exactos presentan la misma tendencia.

El cambio de fase se produce, por tanto, cuando el mínimo de energía pasa de un valor de  $\beta_e$  al otro en la ecuación (2.23). En la figura 2.13 se ve cómo el mínimo de energía para  $\lambda > \lambda_c = 0.8$  se encuentra en  $\beta_e = 0$  mientras que para valores  $\lambda < \lambda_c$  el

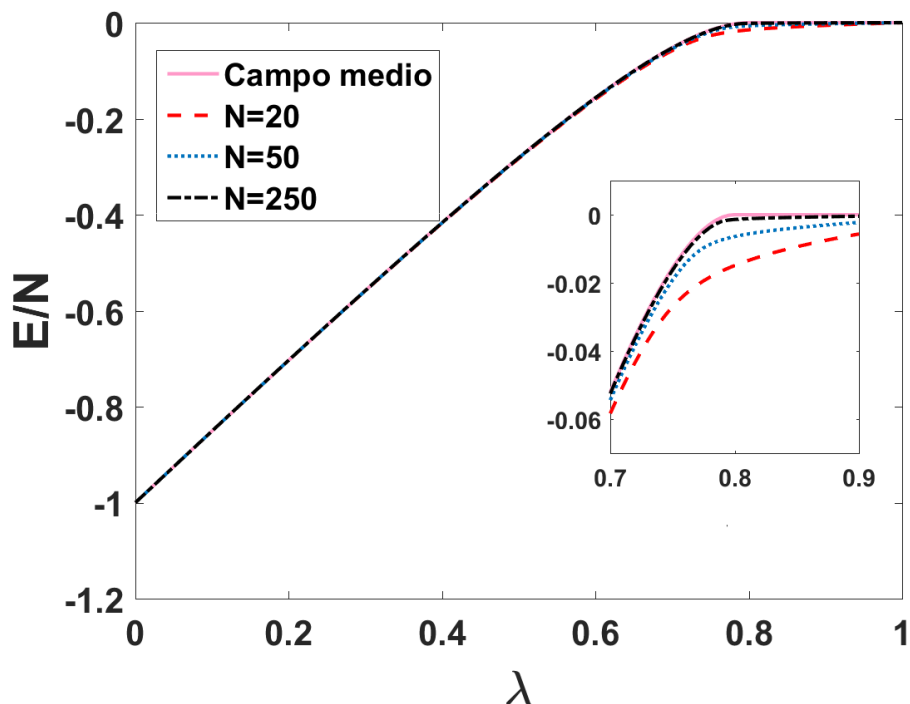


Figura 2.11: Comparación de la energía del estado fundamental hallada analíticamente con los resultados exactos para distintos  $N$  con  $\alpha = 0$ .

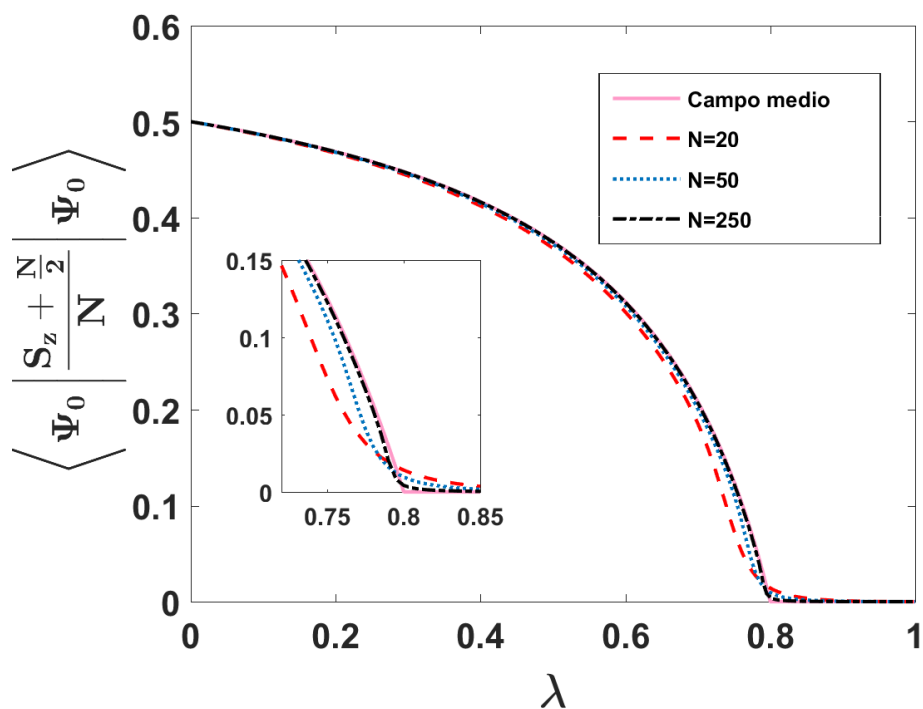


Figura 2.12: Comparación del valor esperado de  $\langle \frac{S_z + N/2}{N} \rangle$  en el estado fundamental hallado analíticamente con los resultados exactos para distintos  $N$  con  $\alpha = 0$ .

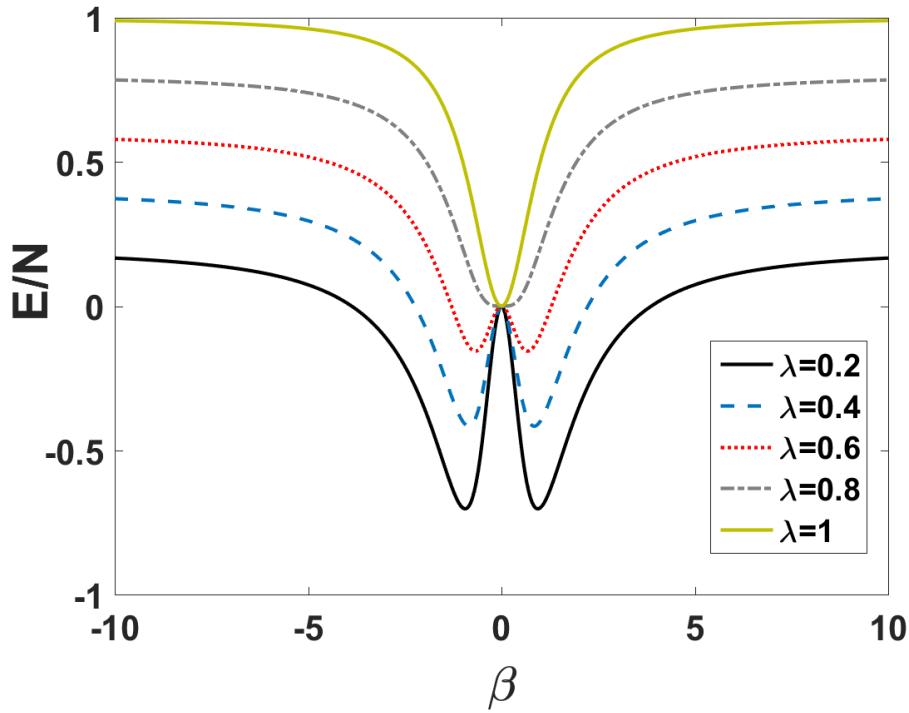


Figura 2.13: *Energía por partícula frente al parámetro variacional  $\beta$  para distintos  $\lambda$  con  $\alpha = 0$ .*

mínimo lo da la ecuación (2.22). Si entendemos la figura 2.13 como la energía potencial del sistema en función de  $\beta$  podemos comprender el espectro de energía de la figura 2.1 un poco mejor. Observamos que la zona en la que tenemos estados degenerados se corresponde con la región en la que existe un doble pozo de potencial. A energías superiores a la del pozo, la degeneración desaparece. Igualmente observamos que la región en la que existe la ESQPT ( $E/N = 0$ ) se corresponde con los máximos locales de los potenciales de doble pozo. De hecho, los potenciales para  $\lambda > \lambda_c$  tienen un comportamiento local cuadrático, una forma de doble pozo para  $\lambda < \lambda_c$ , y en el caso  $\lambda = \lambda_c$  el potencial presenta un comportamiento local cuártico. Estas características son las que se esperan en un estudio semiclásico del sistema [16, 19]. La aparición de las ESQPTs puede entenderse clásicamente a partir del doble pozo de potencial: para energías cercanas al borde del pozo, la velocidad clásica de las partículas se vuelve muy pequeña, indicando que sistemas con energías cercanas a la ESQPT pasan mucho tiempo en esa zona. Esos puntos estacionarios se asocian a la singularidad en la densidad de estados [20, 21].

En el caso de  $\alpha = 1$ , el análisis del potencial de la figura 2.14 no describe de manera precisa el espectro de energía de la figura 2.9. Seguimos teniendo el doble pozo de potencial para  $\lambda < \lambda_c = 0.6$ , los máximos locales en la ESQPT de  $E/N = 0$ , y el

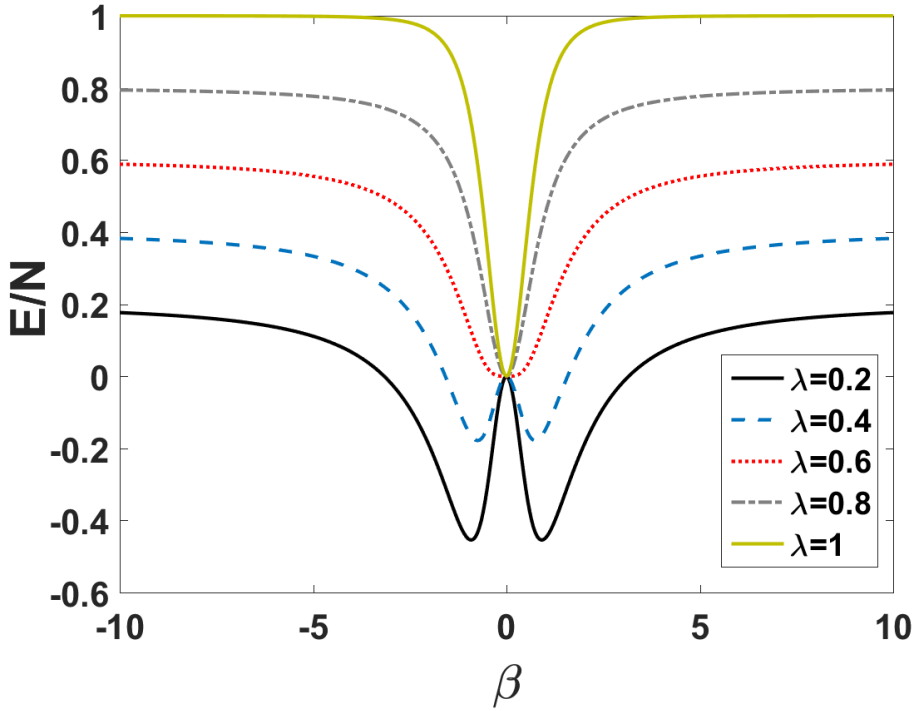


Figura 2.14: *Energía por partícula frente al parámetro variacional  $\beta$  para distintos  $\lambda$   $\alpha = 1$ .*

potencial tiende al valor de la energía de la línea crítica de la ESQPT superior que se encuentra en  $E/N = \lambda$ , pero en el espectro vemos que a partir de ahí siguen habiendo estados que además vuelven a ser degenerados y de éstos el potencial no nos da ninguna información.

Una manera de observar mejor la dependencia de la ESQPT con el parámetro  $\lambda$  y cómo se propaga hacia estados excitados es representar la energía de los estados excitados restándole la del estado fundamental, es decir,  $E'_k = E_k - E_0$ . En la figura 2.15 vemos este espectro para  $\alpha = 0$  y  $\alpha = 1$ . Las líneas gruesas que aparecen en el espectro se corresponden con las separatrices que señalan las ESQPTs y separan las dos fases del sistema [19]. En el caso de  $\alpha = 0$ , para  $\lambda < \lambda_c$  la ecuación de la separatriz  $f_0(\lambda, \alpha)$  se obtiene de la diferencia entre el valor de la funcional de energía en el máximo local del origen y el valor de la funcional mínimo:

$$f_0(\lambda, \alpha) = -\frac{(\alpha + 5\lambda - 4)^2}{4(\alpha + 4\lambda - 4)}. \quad (2.25)$$

En el caso  $\alpha = 1$  aparece una nueva separatriz además de  $f_0(\lambda, \alpha)$ . La ecuación de la nueva separatriz  $f_1(\lambda, \alpha)$  se obtiene de la diferencia entre el valor asintótico de la

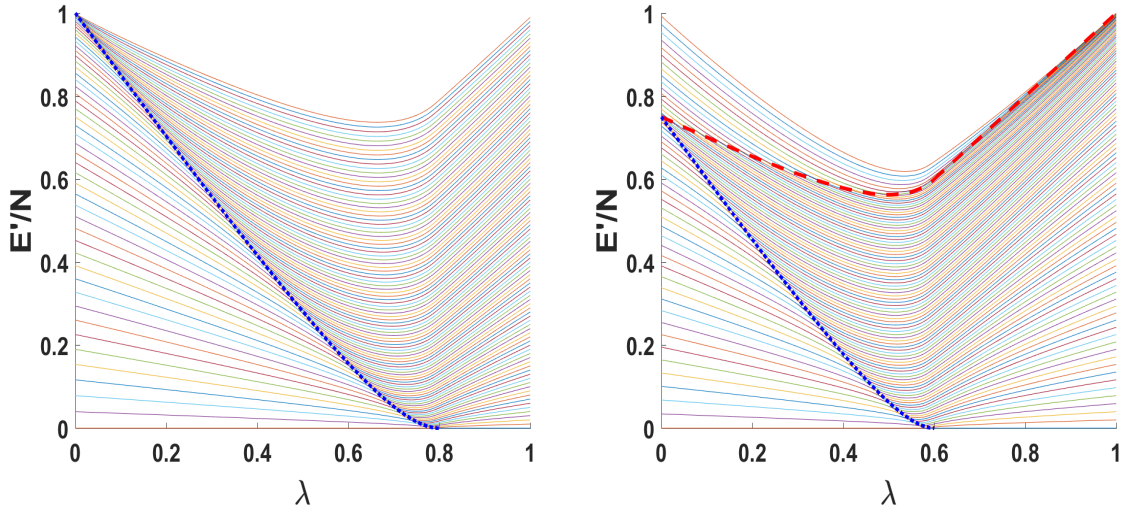


Figura 2.15: *Energía por partícula frente al parámetro  $\lambda$  con  $N = 100$  para  $\alpha = 0$  (izquierda) y  $\alpha = 1$  (derecha). La energía del estado fundamental se ha fijado a cero. La línea de puntos corresponde a la separatriz de la ecuación (2.25) y la discontinua a la ecuación (2.26).*

funcional de energía al que tiende para  $\beta \rightarrow \infty$  y el valor de la funcional mínimo:

$$f_1(\lambda, \alpha) = \begin{cases} -\frac{(\alpha+3\lambda-4)^2}{4(\alpha+4\lambda-4)} & \lambda < \lambda_c, \\ \lambda & \lambda \geq \lambda_c. \end{cases} \quad (2.26)$$

Hemos comprobado cómo el término anarmónico añade una nueva ESQPT, además de modificar el  $\lambda_c$  en la que se produce la QPT, y que a partir de la aproximación de campo medio podemos definir las regiones del espectro en las que se encuentran por medio de las separatrices. Es interesante dejar constancia de que aunque en este trabajo nos hemos limitado a estudiar el caso de  $\alpha = 1$ , este parámetro puede tomar valores mayores. De acuerdo al dominio de la solución (2.22) que definimos anteriormente,  $\lambda \leq \frac{4-\alpha}{5} \cup \lambda \geq \frac{4-\alpha}{3}$  con  $\lambda \in [0, 1]$ , para  $\alpha > 1$  aparecen nuevas soluciones correspondientes a  $\lambda > \frac{4-\alpha}{3}$ . Si bien esto no tiene repercusión en el estado fundamental, sí que complica un poco el espectro ya que aparecen nuevas líneas críticas asociadas a que los bordes del pozo de potencial se vuelven ahora máximos, dados por la solución (2.22), para estos valores de  $\lambda > \frac{4-\alpha}{3}$ . Del mismo modo, hay otro valor crítico en  $\alpha \geq 4$  a partir del cual, la solución correspondiente a  $\lambda \leq \frac{4-\alpha}{5}$  deja de existir y con ella el doble pozo de potencial. Esto se traduce en que el estado fundamental deja de presentar transición de fase y que la ESQPT delimitada por  $f_0$  desaparece.

## Capítulo 3

# Estructura y dinámica del sistema

Hasta ahora hemos estudiado cómo podemos advertir la presencia de transiciones de fase estudiando la derivada de la energía con respecto al parámetro de control, el valor medio del parámetro de orden  $\langle S_z \rangle$  o la densidad de estados. En este capítulo vamos a ver otras formas de advertir la presencia de transiciones de fase en el sistema: primero estudiando la estructura de los autoestados, es decir, la forma en que los elementos de la base forman cada autoestado y por último estudiando la dinámica del sistema por medio del eco de Loschmidt y del OTOC.

### 3.1. Estructura de los autoestados

A lo largo de este trabajo, hemos reparado en una diferencia fundamental entre las transiciones del estado fundamental (QPTs) y las de estados excitados (ESQPTs): en el estudio de los parámetros de orden, las QPTs presentan un valor constante, generalmente nulo, de los parámetros de orden a algún lado del valor crítico; mientras que en las ESQPTs esto no ocurre, causando que la distinción de fases sea más complicada en este caso. Por ello, vamos a tratar otra propiedad que nos puede dar información acerca de las transiciones de fase de estados excitados: la estructura de los autoestados [17, 20].



### 3.1.1. Cociente de participación inverso (IPR)

Para analizar la estructura de los autoestados vamos a utilizar una magnitud conocida como cociente de participación inverso (IPR, del inglés *inverse participation ratio*). Esta magnitud nos da una idea de la deslocalización de un estado en una cierta base, en otras palabras, del número de elementos de la base que participan en la construcción del estado. Está por tanto relacionada con la matriz densidad y con la pureza del estado. Diremos que un valor grande del IPR indica un estado muy mezclado y un valor pequeño un estado más localizado. Definimos el IPR como:

$$IPR \equiv P^{(k)} = \frac{1}{\sum_i |c_i^{(k)}|^4}, \quad (3.1)$$

donde los coeficientes  $c_i^{(k)}$  son los términos del desarrollo del autoestado  $k$  en nuestra base dada por (2.2), tal como se explica en el apéndice A. Como debe cumplirse que  $\sum_i |c_i|^2 = 1$ , para un sistema de  $N$  partículas, un estado totalmente deslocalizado tendrá contribuciones idénticas de los  $N$  elementos de la base, por tanto  $c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \forall i \rightarrow IPR = N$  mientras que uno totalmente localizado o puro presentará una única contribución de los elementos de la base, luego  $c_i = \delta_{x,x_0} \rightarrow IPR = 1$ .

En la última fila de la figura 3.1 observamos el comportamiento del IPR por número de partículas para el estado fundamental en función de  $\lambda$  con  $\alpha = 0$  y  $\alpha = 1$ . Para  $\lambda < \lambda_c$  el IPR muestra un valor más o menos constante hasta que en el punto crítico decae hacia el valor  $1/N$ , valor que se mantiene para  $\lambda_c < \lambda \leq 1$ , lo que significa que a este lado del punto crítico el estado fundamental está compuesto únicamente por un elemento de la base. En torno a  $\lambda = 0.4$  obtenemos un pico que en principio no debería existir y que se debe al número relativamente bajo de partículas que hemos utilizado para los cálculos, por eficiencia computacional. Si aumentamos el número de partículas, este pico desaparece. Vamos a estudiar ahora el IPR por número de partículas para un  $\lambda$  fijo en función de la energía. En la figura 3.1 vemos cómo  $P/N$  es una función suave con la energía en la región  $\lambda_c < \lambda < 1$ , mostrando estados más localizados en los extremos. Por debajo del punto crítico  $\lambda_c$ , los extremos siguen estando muy localizados y la deslocalización aumenta a medida que aumentamos la energía, pero en la región crítica ( $E/N = 0$  y  $E/N = \lambda$  en el caso de  $\alpha = 1$ )  $P/N$  presenta una caída muy marcada que además es más acentuada conforme crece el número de partículas. Después de esta caída el IPR vuelve a crecer para, por último, volver a decrecer de manera suave en los extremos. De manera general, podríamos decir que es una función suave de la energía excepto cuando hay presente una transición de fase que se reconoce

en forma de caída marcada del IPR a la energía de la transición. Además, el IPR es menor conforme vamos aumentando el parámetro  $\lambda$  (obsérvese el eje de ordenadas de la figura 3.1), indicando la existencia de estados más localizados, hasta el punto de que en  $\lambda = 1$  los autoestados coinciden con los de la base y, por tanto,  $P/N = 1/N$ . Nótese que en  $\lambda = 0.4$  volvemos a observar el pico de alto IPR antes de la primera ESQPT relacionado con el número relativamente bajo de partículas empleado. Según todo lo estudiado, el IPR puede utilizarse como herramienta para detectar los puntos críticos en los que se producen las ESQPTs.

A pesar de que pueda parecer contraintuitivo, pues en la zona de la ESQPT la densidad de estados es mayor y uno espera que los estados estén más deslocalizados en zonas con alta densidad de estados, hemos visto que el IPR se hace muy pequeño en la energía crítica y esto significa que sólo unos pocos elementos de la base contribuyen a este estado crítico. Para entender esto mejor, vamos a estudiar las contribuciones de los elementos de la base en distintos autoestados. En la figura 3.2 se muestran las estructuras de algunos autoestados escritos en la base  $|s, m_s\rangle$ . Los términos  $|c_i^{(k)}|^2$  representan la probabilidad de encontrar al autoestado  $|\Psi_k\rangle = \sum_{i=-N/2}^{N/2} c_i^{(k)} |s, m_s\rangle$  en el vector  $|s, i\rangle$  de la base y  $e_i = \langle s, i | H | s, i \rangle$  es la energía del vector de la base en el Hamiltoniano (2.1). En los casos no críticos, vemos que contribuyen muchos elementos de la base cuya energía es más alta (baja) según nos encontremos por encima (por debajo) de la ESQPT, con un pico en ambos límites de elementos contribuyentes. Con  $\alpha = 0$  los estados más próximos a la ESQPT están muy localizados en el estado de la base  $|s, -N/2\rangle$  (señalado con un círculo en la figura 3.2). En el caso  $\alpha = 1$ , los estados próximos a la ESQPT de  $E/N = 0$  vuelven a estar muy localizados en el estado  $|s, -N/2\rangle$ , sin embargo, aquellos cercanos a la ESQPT de  $E/N = \lambda$  están muy localizados en el estado de la base  $|s, N/2\rangle$  (señalado también con un círculo en la figura 3.2). Nótese la diferencia de escala en el eje  $y$  en los distintos casos.

Hemos visto cómo en la ESQPT los autoestados están muy localizados en un elemento de la base. Además, hemos encontrado una diferencia estructural entre ambas ESQPTs: mientras que en la ESQPT de  $E/N = 0$  los autoestados se localizan en el estado  $|s, -N/2\rangle$  de la base, en aquella que aparece en  $E/N = \lambda$  tras incluir una anharmonicidad en el sistema, los autoestados se localizan en el estado  $|s, N/2\rangle$  de la base.

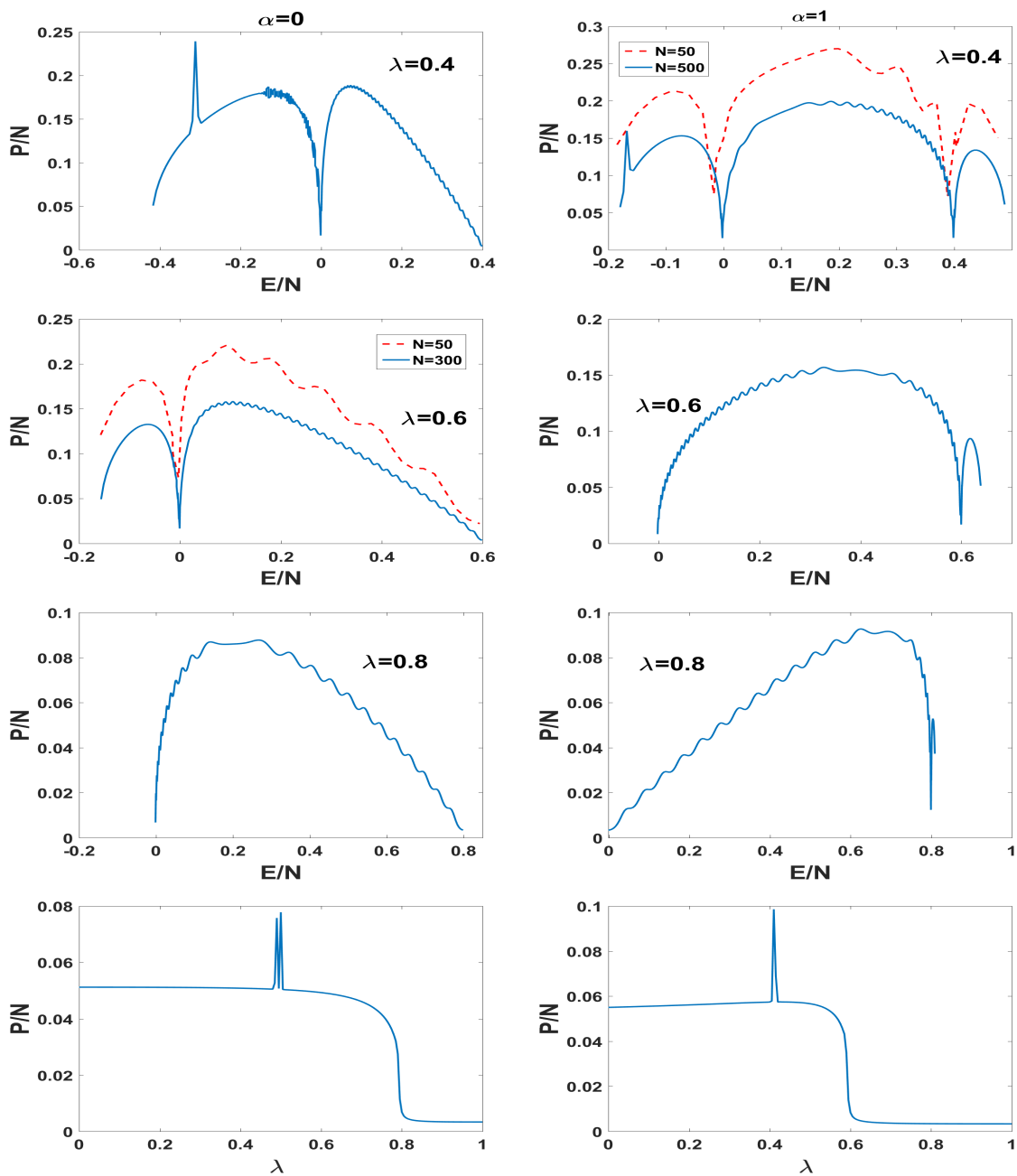


Figura 3.1: Tres primeras filas: IPR por número de partículas frente a la energía por partícula con  $N = 300$ . Columna izquierda:  $\alpha = 0$  y  $\lambda = 0.4, 0.6, 0.8$  respectivamente de arriba a abajo ( $\lambda_c = 0.8$ ). Columna derecha:  $\alpha = 1$  y  $\lambda = 0.4, 0.6, 0.8$  de arriba a abajo ( $\lambda_c = 0.6$ ). Última fila: IPR por número de partículas del estado fundamental frente al parámetro de control  $\lambda$ .

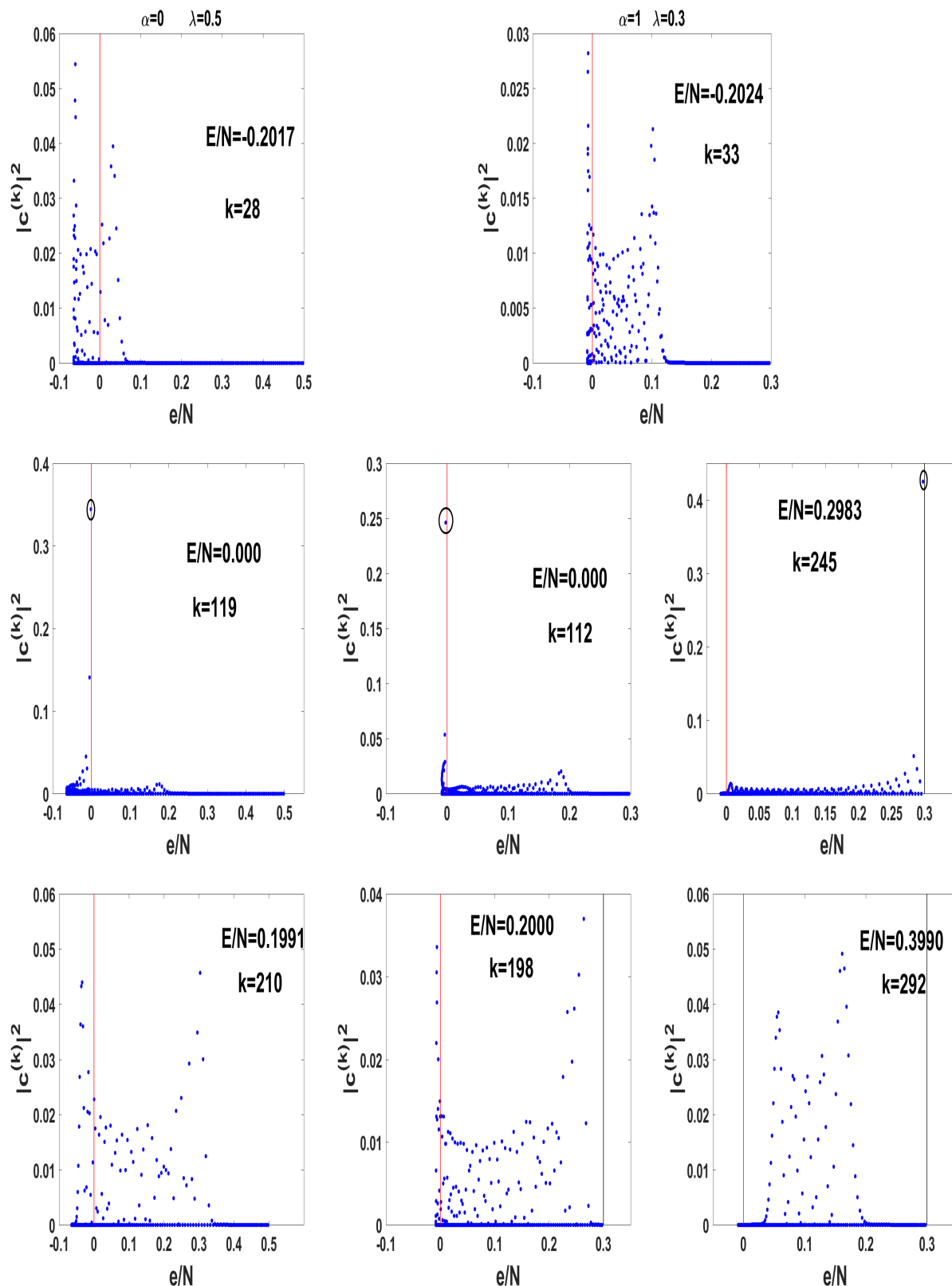


Figura 3.2: Coeficientes al cuadrado de distintos autoestados  $|\Psi_k\rangle$  en la base  $|s, m_s\rangle$  frente a la energía de los correspondientes vectores de la base;  $N = 300$ ,  $\lambda = 0.5$  y  $\alpha = 0$  (izquierda),  $\lambda = 0.3$  y  $\alpha = 1$  (centro y derecha). La energía y el número de autoestado aparecen en cada imagen. En la fila de en medio aparecen los autoestados próximos a las ESQPTs. Las líneas verticales representan las ESQPTs.

### 3.1.2. Distribución de Husimi

Relacionado también con la estructura de los autoestados y como medida de la complejidad de los mismos podemos utilizar el segundo momento de la distribución de Husimi. Partiendo de la definición de estado coherente (B.6) del apéndice B, podemos definir la distribución de cuasiprobabilidad de Husimi como el solapamiento al cuadrado de un autoestado  $|\Psi\rangle$  con el estado coherente  $|s, \beta\rangle$ :

$$Q_{\Psi}(\beta) = |\langle s, \beta | \Psi \rangle|^2. \quad (3.2)$$

El parámetro variacional complejo  $\beta$  puede escribirse como  $\beta = \tan(\theta/2)e^{i\phi}$  en un espacio de fases definido por  $(\theta, \phi)$ . La distribución de Husimi se puede relacionar con la probabilidad de encontrar a nuestro sistema en una pequeña región del espacio de fases alrededor de  $\beta = (\theta, \phi)$ .  $Q_{\Psi}(\theta, \phi)$  está normalizada:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \frac{2s+1}{4\pi} Q_{\Psi}(\theta, \phi) = 1. \quad (3.3)$$

Muchas veces se recurre al segundo momento de la distribución de Husimi, definido como:

$$M_{\Psi}^2 = \frac{4s+1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Q_{\Psi}^2(\theta, \phi). \quad (3.4)$$

Es este segundo momento  $M_{\Psi}^2$  el que se conecta con el caos de un sistema. Para calcularlo, hay que evaluar el solapamiento  $\langle s, \beta | \Psi \rangle$ ; y para ello comenzamos calculando el solapamiento  $\langle s, \beta | s, m_s \rangle$ , siendo  $|s, m_s\rangle$  los elementos de la base en los que está desarrollado el autoestado  $|\Psi\rangle$ . A partir de la ecuación (B.6) obtenemos directamente:

$$\langle s, \beta | s, m_s \rangle = \frac{1}{(1 + \beta\beta^*)^s} \binom{2s}{m_s}^{1/2} \beta^{m_s}. \quad (3.5)$$

De la definición (3.2) y escribiendo  $\beta = \tan(\theta/2)e^{i\phi}$ :

$$Q_{|s, m_s\rangle}(\theta) = \frac{1}{(1 + \beta\beta^*)^{2s}} \binom{2s}{m_s} \beta^{2m_s}, \quad (3.6)$$

o, recordando que  $\tan^2(\theta/2) = (1 - \cos\theta)(1 + \cos\theta)^{-1}$ :

$$Q_{|s, m_s\rangle}(\theta) = \frac{1}{2^{2s}} \binom{2s}{m_s} (1 - \cos\theta)^{m_s} (1 + \cos\theta)^{-m_s}. \quad (3.7)$$

Se puede demostrar que el segundo momento de Husimi es entonces:

$$M_{|s,m_s\rangle}^2 = \frac{\binom{2s}{m_s}^2}{\binom{4s}{2m_s}}. \quad (3.8)$$

Con todo esto, podemos decir que para un estado general  $|\Psi\rangle$ , el segundo momento de Husimi puede escribirse como:

$$M_{|\Psi\rangle}^2 = \sum_{m=0}^{2s} |c_m|^2 \frac{\binom{2s}{m}^2}{\binom{4s}{2m}}. \quad (3.9)$$

Vamos a ver como los resultados obtenidos a partir de la ecuación (3.9) son muy similares a los obtenidos con el IPR, con la diferencia de que valores altos del segundo momento de Husimi  $M^2$  indican estados localizados mientras que en el caso del IPR los estados localizados se relacionan con valores bajos de éste. De este modo, podemos utilizar también el segundo momento de Husimi como herramienta para localizar los puntos críticos en los que se produce la transición. En la figura 3.3 mostramos los resultados de manera análoga a la figura 3.1 en la que mostrábamos los del IPR, aunque con un número de partículas menor debido a la eficiencia computacional. Es por ello que no obtenemos picos suaves en las regiones críticas que sí obtendríamos si elevásemos el número de partículas; aunque se observa bien el comportamiento esperado.

En el caso del estado fundamental, vemos un salto de valor desde  $M^2 \approx 0.1$  hasta  $M^2 = 1$  en torno al punto crítico  $\lambda_c$ . Cuando representamos  $M^2$  frente a la energía por partícula para valores fijos de  $\lambda$ , obtenemos picos marcados en las regiones críticas así como un valor cercano a la unidad para el estado más excitado cuando  $\alpha = 0$ , indicando que el estado coincide con unos pocos elementos de la base. Una diferencia que encontramos con respecto al IPR, es que  $M^2$  mantiene su valor mínimo (a priori estados deslocalizados) excepto cuando nos encontramos estados muy localizados en los que contribuyen sólo unos pocos elementos de la base; en cambio, el IPR señala también estados "intermedios", en los que intervienen un número pequeño de elementos, sin llegar a ser únicamente uno o dos elementos de la base. Podemos observar esta reflexión fijándonos en los mínimos locales que obtenemos en la figura 3.1 para el estado fundamental en los casos  $\lambda = 0.4, 0.6$  para  $\alpha = 0$ . Vemos cómo aquí el IPR muestra un valor pequeño (estados localizados), aunque no tan pequeño como el que se obtiene en la región crítica o para el estado más excitado; mientras que  $M^2$  no da señal ninguna

de esto.

## 3.2. Dinámica del *quench*

En esta sección vamos a ver cómo podemos encontrar indicios de las ESQPTs estudiando la evolución en el tiempo del sistema. Tal y como explicamos en la sección 1.3, vamos a someter al sistema a un *quantum quench*, un cambio abrupto del parámetro  $\lambda$ , y a estudiar cómo evoluciona por medio de dos magnitudes: el eco de Loschmidt y el OTOC.

### 3.2.1. Eco de Loschmidt

Vamos a empezar estudiando el proceso de relajación del sistema por medio del estudio del eco de Loschmidt:

$$r(t) = \left| \frac{\langle \Psi_0 | e^{iH_2 t} e^{-iH_1 t} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \right|^2. \quad (3.10)$$

Por comodidad, vamos a estudiar el caso en el que el sistema parte del estado fundamental  $|\Psi_0\rangle$  que es autoestado del Hamiltoniano  $H_1 = H(\lambda_1)$ , aunque se puede calcular en cualquier otro caso. Con esta elección la expresión (3.10) queda:

$$r(t) = \left| \frac{\langle \Psi_0 | e^{iH_2 t} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \right|^2. \quad (3.11)$$

Hacemos que en el instante  $t = 0$  el parámetro  $\lambda$  cambie súbitamente de un valor  $\lambda_1$  a otro valor  $\lambda_2$ . El estado  $|\Psi_0\rangle$  no es autoestado del nuevo Hamiltoniano  $H_2 = H(\lambda_2)$ , por tanto, para calcular  $r(t)$  será útil expresar  $|\Psi_0\rangle$  en función de los autoestados del nuevo Hamiltoniano  $H_2|\phi_{2i}\rangle$ :

$$|\Psi_0\rangle = \sum_i c_i |\phi_{2i}\rangle, \quad (3.12)$$

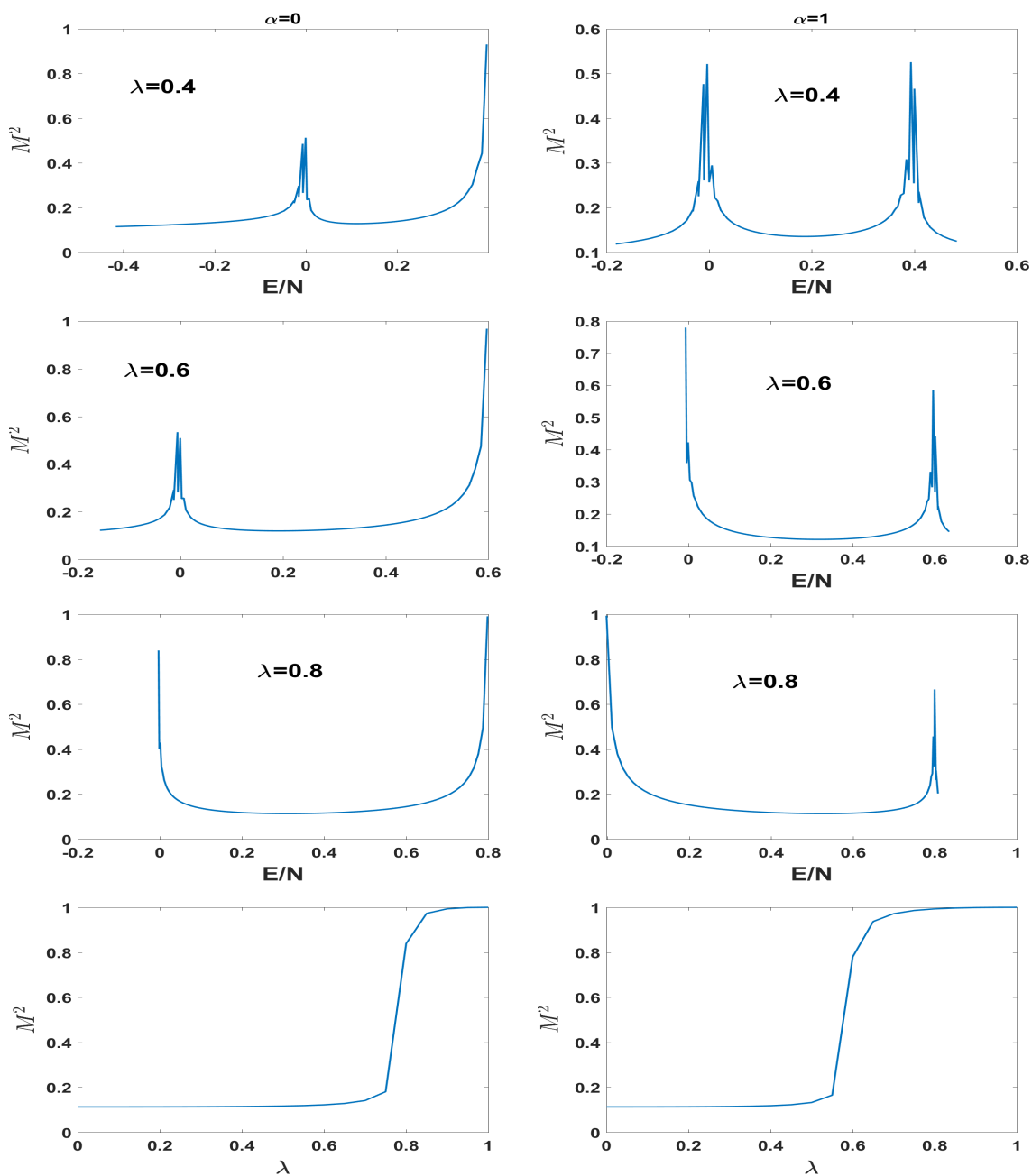


Figura 3.3: Tres primeras filas: Segundo momento de Husimi frente a la energía por partícula con  $N=100$ . Columna izquierda:  $\alpha = 0$  y  $\lambda = 0.4, 0.6, 0.8$  de arriba a abajo ( $\lambda_c = 0.8$ ). Columna derecha:  $\alpha = 1$  y  $\lambda = 0.4, 0.6, 0.8$  de arriba a abajo ( $\lambda_c = 0.6$ ). Última fila: Segunda distribución de Husimi del estado fundamental frente al parámetro de control  $\lambda$ .



de modo que

$$r(t) = \left| \frac{\sum_i e^{iE_{2i}t} \langle \phi_{2i} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | \phi_{2i} \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \right|^2, \quad (3.13)$$

donde  $E_{2i}$  es el autovalor del Hamiltoniano  $H_2$  asociado a cada autoestado  $\phi_{2i}$ . Antes hemos indicado que el objetivo de todo esto es estudiar como influyen las ESQPTs en la relajación del sistema, por ello, la elección del  $\lambda_2$  será crucial para observar tal comportamiento. Si escogemos el nuevo parámetro tal que  $\lambda_2 = \lambda_1 + \delta$  siendo  $\delta$  un parámetro real, podemos escribir:

$$H_2 = H_1 + \delta \left( \left( S_z + \frac{N}{2} \right) + \frac{1}{N} (S_+ + S_-)^2 \right). \quad (3.14)$$

A partir de esta expresión podemos deducir el valor crítico que debe tomar  $\delta$  para que el sistema se encuentre en la línea correspondiente a la ESQPT tras el *quench*:

$$\delta_c = \frac{\varepsilon_c - \langle \Psi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle} = \frac{\varepsilon_c - \varepsilon_1}{\varepsilon'_1}, \quad (3.15)$$

donde  $\varepsilon_c = \langle \Psi_0 | H_2 | \Psi_0 \rangle$  es la energía a la que queremos mandar el sistema ( la de la línea crítica) y  $H' = \left( S_z + \frac{N}{2} \right) + \frac{1}{N} (S_+ + S_-)^2$ .

En la columna izquierda de la figura 3.4 observamos el eco de Loschmidt para  $\alpha = 0$  calculado para distintos valores de  $\delta$  partiendo siempre desde el estado fundamental con  $\lambda_1 = 0.4$ . Apreciamos que el eco de Loschmidt presenta unas oscilaciones regulares amortiguadas en los casos en los que no nos encontramos cerca de la región crítica. Cuando nos encontramos lejos de la ESQPT, las oscilaciones presentan mayor frecuencia y amplitud constante (el sistema vuelve periódicamente a su estado inicial con  $r(t) = 1$ ). En cambio, conforme nos vamos acercando a la ESQPT nos encontramos con menos oscilaciones y además la amplitud de éstas va decreciendo (el sistema no vuelve a su estado inicial). Como caso límite, en las regiones cercanas a la ESQPT con  $\delta_c = 0.3$ , este comportamiento amortiguado deja de existir y nos encontramos con que el eco de Loschmidt decae rápidamente a cero y solo se aprecian unas pequeñas oscilaciones (cuanto mayor sea  $N$  menores son estas oscilaciones). Otra peculiaridad es que la anchura de los picos varía con el tiempo y con la región en la que nos encontremos.

Vamos a analizar ahora el eco de Loschmidt para  $\alpha = 1$ , parámetro para el cual el espectro de energía mostraba dos líneas críticas. En la columna central de la figura 3.4 observamos el eco para distintos valores del parámetro  $\delta$  partiendo del estado fundamental con  $\lambda_1 = 0.3$ . En este caso volvemos a apreciar las oscilaciones regulares

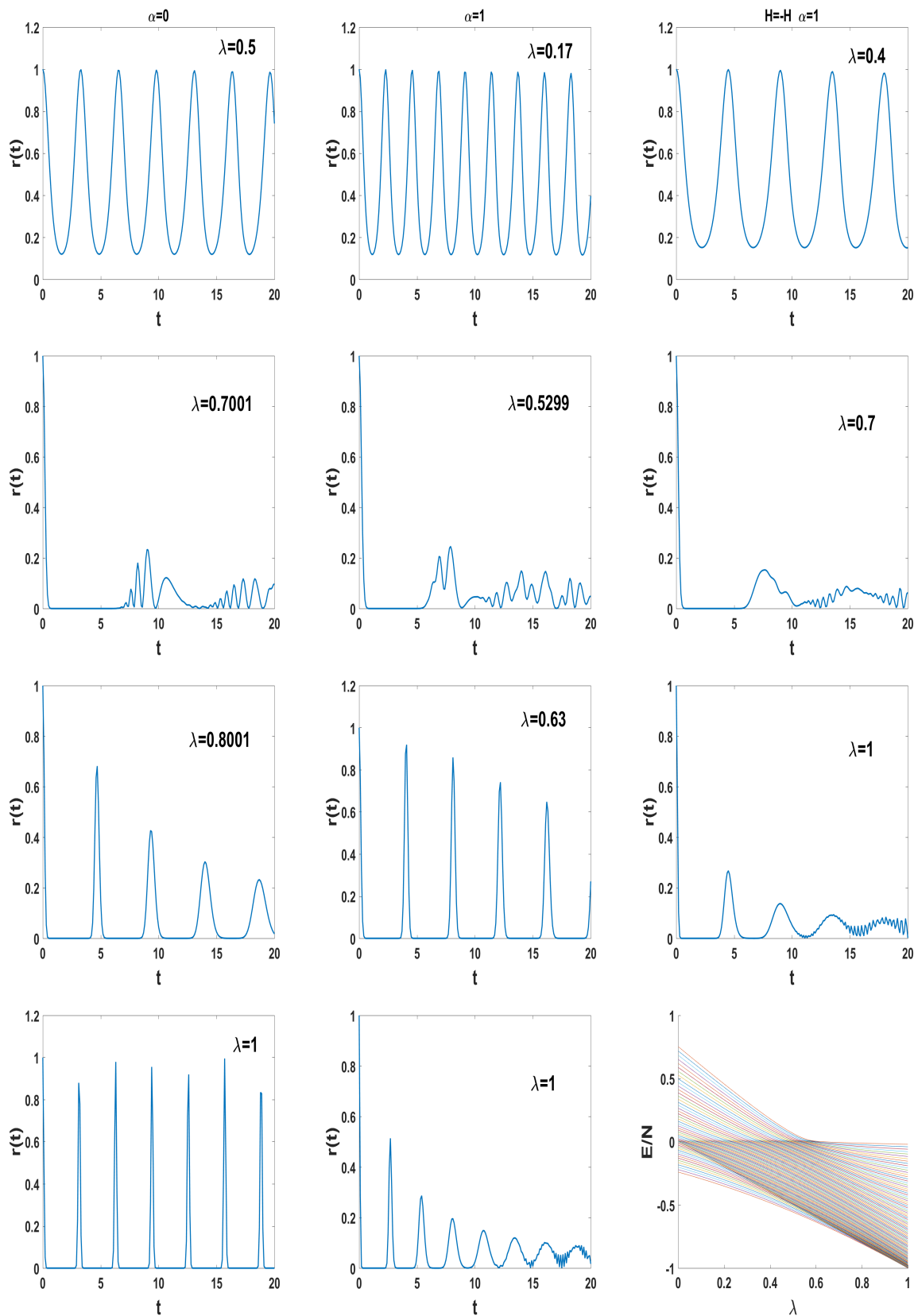


Figura 3.4: Eco de Loschmidt para distintos quenches calculado con  $N = 300$ . Columna izquierda: partiendo del estado fundamental con  $\lambda_1 = 0.4$  y  $\alpha = 0$ . Columna central: partiendo del estado fundamental con  $\lambda_1 = 0.3, \alpha = 1$ . Columna derecha: partiendo del estado fundamental con el espectro invertido (última imagen) con  $\lambda_1 = 0.3$  y  $\alpha = 1$ . En cada imagen aparece el  $\lambda_2$  al que se manda el sistema tras el quench. Las imágenes de la segunda fila corresponden al quench crítico. Unidades arbitrarias.

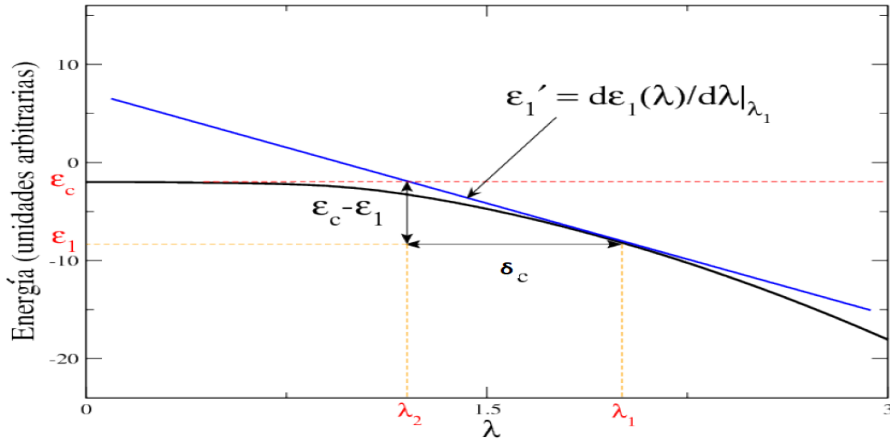


Figura 3.5: Representación gráfica de la ecuación (3.15) con la que hallar el valor  $\delta_c$ .

amortiguadas en las regiones alejadas de las ESQPTs y el rápido decaimiento a cero en el valor crítico de la primera ESQPT, la de  $E/N = 0$ , alrededor de  $\delta_c = 0.2274$ . Para valores mayores a éste, es decir, cuando estamos por encima de la primera región crítica pero por debajo de la línea crítica superior, vemos cómo el sistema vuelve a oscilar con mayor frecuencia y amplitud, volviendo al estado inicial, pero si seguimos aumentando el valor del parámetro  $\delta$  el eco vuelve a decaer, siendo las oscilaciones de menor amplitud aunque la frecuencia no baja. En base a lo que hemos comprobado hasta ahora acerca del eco de Loschmidt, vemos que este comportamiento es precursor de una ESQPT, indicando que nos estamos acercando a la línea crítica superior  $E/N = \lambda$ , lo que ocurre es que no podemos seguir yendo hacia valores mayores de  $\lambda$  para observar esta tendencia singular en el eco de Loschmidt propia de las ESQPTs porque nuestro parámetro está definido como  $\lambda \in [0, 1]$ . Esta complicación nos la encontramos por la manera que tenemos de elegir el parámetro  $\lambda_2$  para el *quench*. Si aplicamos el teorema de Hellmann–Feynman en la ecuación (3.15), resulta que  $\langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle \equiv \varepsilon_1' = d\varepsilon_1(\lambda)/d\lambda|_{\lambda=\lambda_1}$ . Esto nos proporciona una interpretación gráfica de la ecuación (3.15) que se muestra en la figura 3.5: el nuevo parámetro  $\lambda_2$  nos llevará a la zona crítica de la ESQPT si la tangente en el nivel inicial de energía  $\varepsilon_1(\lambda_1)$  cruza a la curva crítica  $\varepsilon_c(\lambda_2)$ . Si inspeccionamos el espectro de energía con  $\alpha = 1$  de la figura 2.9, vemos que la tangente en ningún punto del estado fundamental llega a cruzarse con la línea crítica superior en el rango de valores posibles de  $\lambda \in [0, 1]$ , por lo que debido a esta elección del *quench* nunca podemos llegar a situarnos en la ESQPT superior.

Una manera de analizar el comportamiento del eco de Loschmidt en la línea crítica superior, es darle la vuelta al espectro. De esta forma, el estado más excitado es ahora el nuevo estado fundamental y podemos llegar a la línea crítica superior (ahora inferior)

con el método tangencial antes descrito. En la columna derecha de la figura 3.4 vemos el espectro obtenido al darle la vuelta al original y el eco obtenido con este espectro para distintos valores de  $\delta$  partiendo del nuevo estado fundamental en  $\lambda_1 = 0.3$ . En este caso, la tangente en cualquier punto del estado fundamental es negativa y lo que nos permite nuestro método es ir hacia abajo en energía para situarnos en la ESQPT de  $E/N = \lambda$  ( $-\lambda$  en este espectro invertido). Obtenemos el comportamiento esperado amortiguado del eco en regiones lejanas a la ESQPT y a partir de  $\delta = 0.3$  las oscilaciones dejan de ser regulares indicándonos que nos acercamos a la zona crítica. Desde  $\delta = 0.4$  en adelante, el eco muestra el comportamiento atribuido a las regiones cercanas a las ESQPTs, esto es, un rápido decaimiento a cero y pequeñas oscilaciones irregulares en este valor. De modo que podemos decir que alcanzamos la ESQPT para un valor  $0.3 < \delta_c < 0.4$ . El motivo por el que el eco no vuelve a recuperarse tras la región crítica como ocurría antes, es de nuevo por nuestro método tangencial: inspeccionando el espectro de la figura 3.4, vemos que la tangente en cualquier punto del estado fundamental "sigue" a la ESQPT una vez que la alcanza, de modo que nos encontramos en regiones cercanas a la ESQPT para cualquier valor de  $\delta > \delta_c$ . En cualquier caso, de esta manera hemos comprobado que el eco se comporta de la manera esperada al situar al sistema en la ESQPT superior tras el quench.

Hemos comprobado que utilizando el eco de Loschmidt podemos reconocer la presencia de una transición de fase en base al comportamiento anómalo del eco cuando nos situamos sobre la zona crítica tras el quench.

### 3.2.2. Correlación de operadores a través del tiempo (OTOC)

A continuación vamos a estudiar la correlación de dos operadores a través del tiempo tras el *quench* descrito en la sección previa, a partir de una magnitud conocida como OTOC (del inglés *out-of-time-order correlator*). Vamos a centrarnos en estudiar cómo la presencia de una transición de fase modifica las propiedades del OTOC [23]. Dado un Hamiltoniano  $H$ , un estado inicial  $|\Psi\rangle$  y dos operadores  $\hat{W}$  y  $\hat{V}$ ; la propagación en el tiempo del operador  $\hat{W}$  puede estudiarse por medio del valor esperado del siguiente conmutador al cuadrado, con un segundo operador  $\hat{V}$  :

$$C_{w,v}(t) = \left\langle [\hat{W}(t), \hat{V}(0)]^\dagger [\hat{W}(t), \hat{V}(0)] \right\rangle. \quad (3.16)$$

Si los operadores son Hermíticos,  $C_{w,v}(t) = 2 - 2\text{Re}[F_{w,v}(t)]$  donde:

$$F_{w,v}(t) = \langle \hat{W}^\dagger(t) \hat{V}^\dagger(0) \hat{W}(t) \hat{V}(0) \rangle, \quad (3.17)$$

es el OTOC, y  $\hat{W}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{W} e^{-i\hat{H}t}$  es el operador  $\hat{W}$  en la representación de Heisenberg. En nuestro caso  $[\hat{W}(0), \hat{V}(0)] = 0$  aunque esto no es una condición necesaria. El valor medio se calcula sobre el estado fundamental de nuestro sistema  $\Psi_0$ . Como se ha adelantado, vamos a introducir un *quench* en el sistema y se estudiará cómo se comporta el OTOC por encima y por debajo de la región crítica. Además, vamos a ver cómo el valor estacionario del OTOC calculado para tiempos largos puede tomarse como parámetro de orden para localizar la transición y diferenciar las fases del sistema.

En este trabajo, vamos a utilizar como operadores del OTOC  $\hat{W} = \hat{V} = S_x/N$  y como estado inicial  $|\Psi_0\rangle$  el estado fundamental del Hamiltoniano (2.1). Sometemos al sistema al *quench* de la sección previa en el que cambiamos repentinamente el parámetro  $\lambda$  del Hamiltoniano desde  $\lambda_1$  a  $\lambda_2$ , de modo que la evolución temporal del operador  $\hat{W}$  con este nuevo Hamiltoniano es:  $\hat{W}(t) = e^{i\hat{H}_2 t} \hat{W} e^{-i\hat{H}_2 t}$ . En la figura 3.6 presentamos los resultados numéricos del OTOC obtenidos, y observamos las siguientes características. Primero, la parte imaginaria de  $F(t)$  es siempre cero, independientemente del *quench*. Segundo, el comportamiento de la parte real del OTOC, a partir de ahora  $F_R(t)$ , depende claramente de la zona del espectro a la que mandemos el sistema tras el *quench*. Concretamente, en la primera fila de la imagen 3.6, vemos que cuando nos situamos por debajo de la región crítica,  $F_R(t)$  presenta oscilaciones muy pequeñas alrededor de un valor positivo. En la segunda fila de la misma imagen, vemos la evolución del OTOC en la región crítica:  $F_R(t)$  decae rápidamente a su valor mínimo y a partir de ahí oscila de manera irregular entorno a un valor no nulo. Por otra parte, en la tercera fila de la imagen vemos que el comportamiento cambia radicalmente cuando nos encontramos por encima de la zona crítica:  $F_R(t)$  presenta entonces unas oscilaciones amortiguadas que con el paso del tiempo acaban yéndose a cero. El decaimiento a cero es más lento conforme más nos alejamos de la zona crítica (obsérvese el orden de magnitud del eje temporal de la tercera y cuarta fila de la imagen).

Estos resultados confirman que la existencia de transiciones de fases en el sistema afectan de manera drástica al comportamiento dinámico del OTOC, de hecho, hemos comprobado que se puede hallar la región crítica de la transición a partir del estudio de la dinámica del OTOC, así como distinguir las distintas fases. Como punto negativo, vemos que el comportamiento del OTOC es muy similar en los casos con  $\alpha = 0$  y  $\alpha = 1$ , de manera que no nos da ninguna información acerca de la línea crítica que

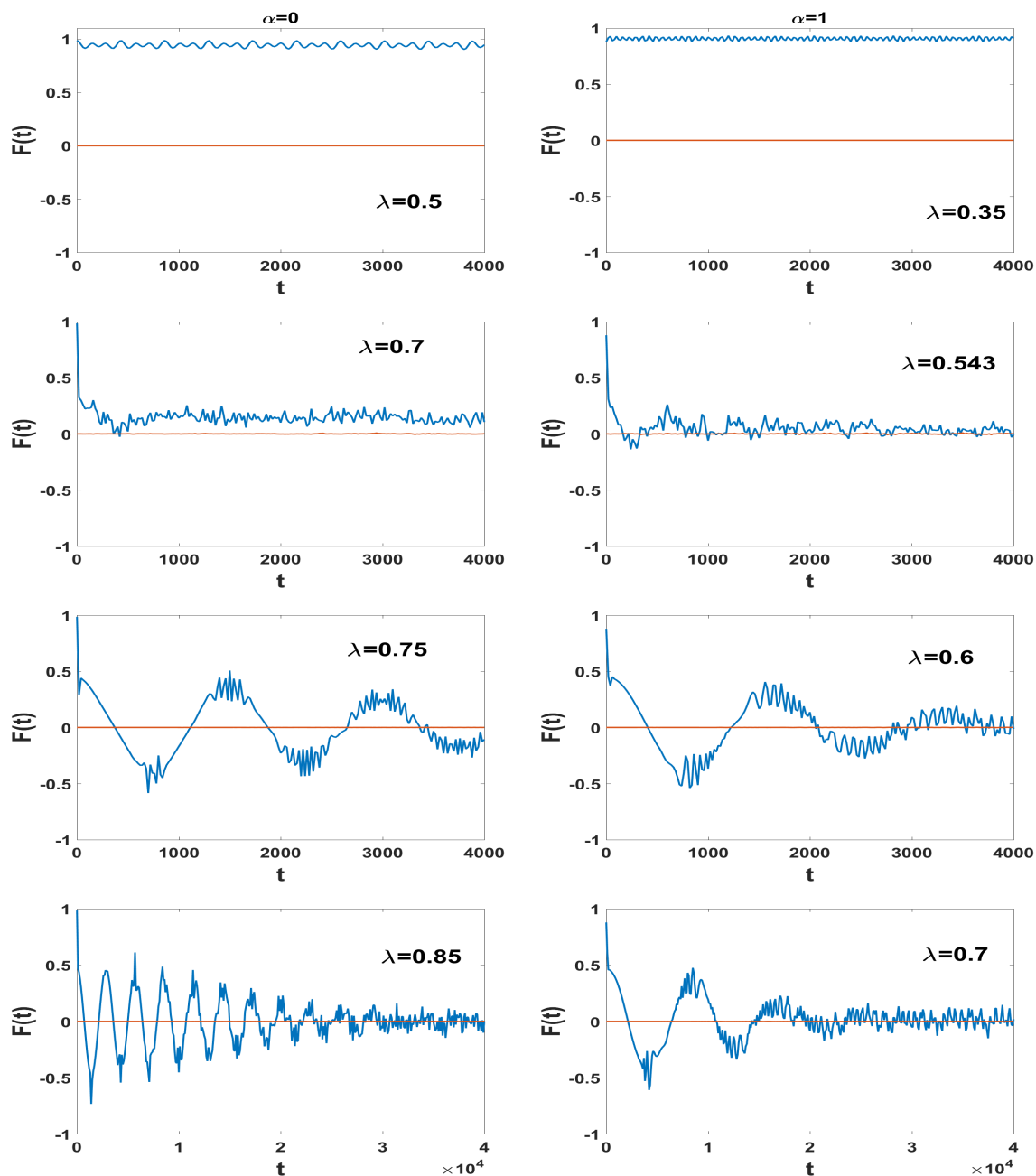


Figura 3.6: Evolución temporal del OTOC  $F(t)$  con  $N=300$  para distintos quenches. Columna izquierda: partiendo del estado fundamental con  $\lambda = 0.4$  y  $\alpha = 0$ . Columna derecha: partiendo del estado fundamental con  $\lambda = 0.4$  y  $\alpha = 0$ . En cada imagen aparece el  $\lambda_2$  al que se manda el sistema tras el quench. La segunda fila corresponde al quench crítico. La línea azul es la parte real del OTOC, la naranja que se mantiene en  $F(t)=0$  la parte imaginaria. Se ha normalizado con el valor  $F(0)$ . Unidades arbitrarias.

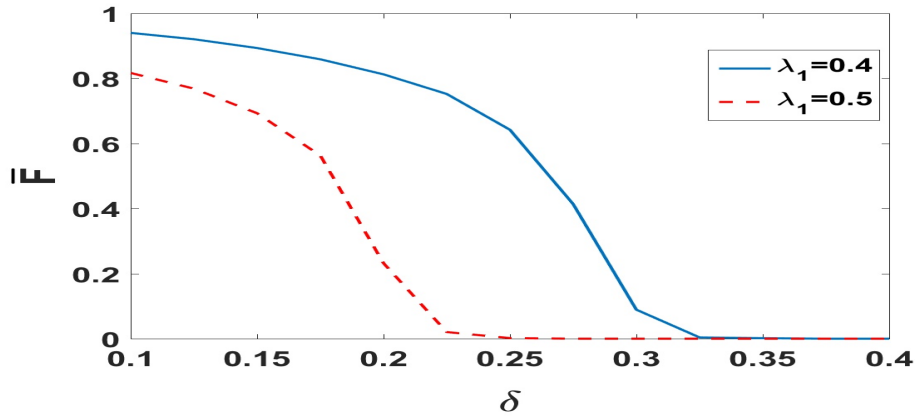


Figura 3.7: Valor estacionario del OTOC  $\bar{F}$  en función del parámetro del *quench*  $\delta$  para distintos valores iniciales del parámetro  $\lambda_1$  con  $N = 300$  y  $\alpha = 0$ .

aparece con  $\alpha = 1$  en la región  $E/N = \lambda$ . No nos vale en este caso el procedimiento que usamos con el eco de Loschmidt de darle la vuelta al espectro, pues no se obtienen resultados relevantes.

Para terminar el estudio del OTOC, vamos a demostrar que el valor estacionario del OTOC para tiempos largos  $\bar{F}$  puede ser tomado como parámetro de orden, pues ya en la figura 3.6 puede adelantarse que tendrá un valor positivo a un lado del punto crítico, y nulo al otro; comportamiento asociado a los parámetros de orden. Definimos el valor estacionario del OTOC:

$$\bar{F} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T F_R(t) dt, \quad (3.18)$$

donde  $T$  es el tiempo transcurrido total. En la figura 3.7 observamos los resultados para un tiempo transcurrido  $T = 10^4$  y analizamos distintos *quenches* para el caso de  $\alpha = 0$ . Se presenta el valor estacionario del OTOC en función del parámetro  $\delta$  partiendo de dos estados iniciales distintos, uno con  $\lambda_1 = 0.4$  y otro con  $\lambda_1 = 0.5$ . Vemos cómo  $\bar{F}$  es una función continua de  $\delta$  que se hace nula desde el valor crítico del *quench*  $\delta_c$ , aquél que manda a nuestro sistema a la región crítica, en adelante. Pese a que se han utilizado pocos puntos por eficiencia computacional, se puede comprobar cómo por ejemplo para el caso de  $\lambda_1 = 0.4$  obtenemos el valor crítico  $\delta_c = 0.3$ , es decir, tras el *quench* el sistema se encuentra en el punto crítico con  $\lambda_2 = 0.7$ . Este valor de  $\lambda_2$  crítico es el mismo que obteníamos antes en el caso del eco de Loschmidt y del OTOC en las figuras 3.4 y 3.6. El hecho de que  $\bar{F}$  sea nulo a partir de  $\delta_c$  nos confirma que puede utilizarse como un parámetro de orden que nos permita distinguir entre las dos fases del sistema.

## Capítulo 4

# Resumen y conclusiones

A lo largo del trabajo se ha presentado un modelo simplificado de Lipkin con el cual introducimos en los conceptos de transición de fase cuántica del estado fundamental (QPT) y de estados excitados (ESQPT). Se ha resuelto el sistema de manera exacta (numérica) por medio de la diagonalización del Hamiltoniano en una base adecuada. Además, para comparar los resultados, se ha hecho una aproximación de campo medio a partir de estados coherentes de espín para obtener una solución analítica del sistema en el límite termodinámico. Por último, se ha estudiado el efecto de un *quantum quench* en el sistema y su relación con las transiciones de fase.

Concretamente, hemos estudiado el Hamiltoniano y el espectro de energías del modelo de Lipkin, identificando en él una zona con alta densidad de estados que corresponde a la zona de transición de fases. A su vez, hemos visto cómo al añadir un término anharmónico al Hamiltoniano, el espectro se ve afectado mostrando una nueva zona de alta densidad de estados, correspondiente a una nueva transición de fase del sistema. Hemos comprobado cómo las transiciones se producen para un valor concreto del parámetro del Hamiltoniano del sistema, y hemos hallado este valor estudiando las derivadas de la energía o el valor esperado de algún operador, que hemos identificado como parámetro de orden al hacerse nulo en una de las fases. Se ha observado cómo en el estado fundamental, podemos distinguir dos "fases" en función del valor que toma el parámetro de orden  $S_z$  a ambos lados del punto crítico, siendo nulo en uno de ellos. Por contra, muchas veces para los estados excitados, el parámetro de orden no muestra diferencia cualitativa a ambos lados de la ESQPT, impidiendo así distinguir entre dos "fases".



---

Hemos estudiado también cómo los resultados exactos se ajustan bien para un número relativamente bajo de partículas a los obtenidos en la aproximación de campo medio en el límite termodinámico, a partir de un método variacional utilizando estados coherentes de espín como función de prueba. Se ha comprobado cómo el término anarmónico influye en los resultados obtenidos y se ajustan bien a los analíticos, excepto en la región de energía superior a la ESQPT que se encuentra en  $E/N = \lambda$ , donde de manera exacta se obtienen varios estados degenerados de los cuales la aproximación de campo medio no parece dar ningún indicio.

De igual forma, hemos visto que la estructura de los autoestados nos puede dar información acerca de las zonas críticas de transición; y cómo magnitudes como el IPR o el segundo momento de la distribución de Husimi, pueden ser tomados como parámetros de orden para detectar los puntos en los que se producen las transiciones. Además, hemos comprobado cómo en el caso anarmónico la estructura de las dos ESQPTs es distinta.

En cuanto a la dinámica del *quench*, se ha comprobado que la presencia de ESQPTs en el sistema influye de manera notable en el comportamiento dinámico del sistema. Se ha estudiado cómo el eco de Loschmidt nos da información acerca de la relajación del sistema y cómo para cierto *quench* crítico, relacionado con la ESQPT, el sistema se comporta de manera muy singular, permitiendo así reconocer estas zonas críticas. Además, se ha explicado por qué nuestra elección del *quench* nos impide llevar al sistema a la nueva línea crítica cuando añadimos el término anarmónico y se ha introducido una manera alternativa de examinar esa zona crítica. Por otra parte, hemos trabajado con la dinámica del OTOC tras un *quench* y se ha comprobado que la presencia de una transición de fase afecta de manera considerable a éste, permitiendo así identificar la región crítica. Además hemos visto que el valor estacionario del OTOC puede tomarse como un nuevo parámetro de orden que permita estudiar las ESQPTs presentes en el sistema. Sin embargo, el OTOC no nos permite estudiar la transición adicional que presenta el sistema en el caso anarmónico.

En definitiva, se ha trabajado con un modelo exactamente soluble para acercarnos al concepto de transición de fase cuántica y se han estudiado diversas formas de identificarlas a partir de la influencia que éstas tienen en el sistema. Para realizar todos los cálculos necesarios, se ha desarrollado un programa en MATLAB.

## Apéndice A

# Resolución algebraica de la ecuación de Schrödinger

Vamos a comprobar que resolver la ecuación diferencial de Schrödinger es equivalente a diagonalizar el Hamiltoniano en una base. Antes de abordar el problema, analizaremos un caso similar de aspecto puramente matemático para explicar el método de diagonalización. Supongamos un operador  $A$ , definido en un espacio vectorial de dimensión 2 y queremos resolver el problema de autovalores dado por

$$A\vec{u} = \lambda\vec{u}, \quad (\text{A.1})$$

o lo que es lo mismo, queremos hallar los vectores propios  $\vec{u}$  de  $A$ , tal que el operador  $A$  actuando sobre dichos vectores nos devuelve el mismo vector multiplicado por una cierta constante  $\lambda$ . Sea  $\{\vec{i}, \vec{j}\}$  una base de nuestro espacio vectorial 2-dimensional, el operador  $A$  quedará completamente determinado si sabemos cómo actúa dicho operador sobre los vectores de la base. Generalmente, la acción de  $A$  sobre los estados de la base nos devolverá una combinación lineal de dichos estados:

$$A\vec{i} = a\vec{i} + b\vec{j}, \quad (\text{A.2})$$

$$A\vec{j} = c\vec{i} + d\vec{j}, \quad (\text{A.3})$$

de igual forma, los vectores  $\vec{u}$  serán una combinación lineal de los elementos de la base

$$\vec{u} = u_1 \vec{i} + u_2 \vec{j}, \quad (\text{A.4})$$

por tanto, calcular  $\vec{u}$  se reduce a obtener los coeficientes  $u_1$  y  $u_2$  en una cierta base. Usando estas tres últimas ecuaciones, podemos escribir la ecuación (A.1) en forma matricial

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix},$$

de manera que resolver el problema de autovalores (A.1) es equivalente a diagonalizar la matriz del operador.

Ahora vamos a analizar nuestro problema cuántico. El objetivo es resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo dada por

$$H\psi_k = E_k\psi_k, \quad (\text{A.5})$$

que es un problema de autovalores para el operador Hamiltoniano. Para resolverlo es necesario encontrar las autofunciones  $\psi_k$  y los autovalores de energía  $E_k$  para  $k = 1, 2, 3, \dots$ . Haciendo un paralelismo con el caso estudiado antes, podemos partir de una base del espacio de Hilbert del problema que llamaremos  $\{\phi_n\}$ . Los autoestados  $\psi_k$  podemos desarrollarlos en términos de esta base:

$$\psi_k = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \phi_n. \quad (\text{A.6})$$

Sustituyendo este desarrollo en la ecuación (A.5), obtenemos

$$H \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \phi_n = E_k \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \phi_n. \quad (\text{A.7})$$

De modo que hallar los autoestados  $\psi_k$  es lo mismo que determinar los coeficientes  $\{c_n^{(k)}\}$ . Multiplicando esta ecuación por  $\phi_m^*$  a la izquierda e integrando en todo el espacio

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \langle m|H|n \rangle = E_k \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \langle m|n \rangle = E_k c_m^{(k)}, \quad (\text{A.8})$$

donde se ha usado la notación de Dirac<sup>1</sup> y las propiedades de ortogonalidad de una base del espacio de Hilbert, i.e,  $\langle m|n \rangle = \delta_{m,n}$ . La ecuación (A.8) puede escribirse en

<sup>1</sup>En la notación de Dirac:  $\int dV \phi_m^*(x) H \phi_n(x) \rightarrow \langle m|H|n \rangle$ .

forma matricial

$$\begin{pmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} & \cdots \\ H_{2,1} & H_{2,2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(k)} \\ c_2^{(k)} \\ \vdots \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} c_1^{(k)} \\ c_2^{(k)} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

donde  $H_{m,n} = \langle m|H|n\rangle$ . La matriz hamiltoniana se puede interpretar como una representación del Hamiltoniano en la base  $\{\phi_n\}$ . Así que resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es equivalente a resolver una ecuación matricial lineal en la que para obtener los autovectores y autovalores es necesario diagonalizar la matriz hamiltoniana.

## Apéndice B

### Estados coherentes

Un estado coherente de espín se define de manera general como la autofunción del operador de bajada de espín  $S_-$  :

$$S_- |s, \beta\rangle = \beta |s, \beta\rangle . \quad (\text{B.1})$$

donde  $\beta$  es un número complejo. Es fácil demostrar entonces que:

$$|s, \beta\rangle = A e^{\beta S_+} |s, -s\rangle , \quad (\text{B.2})$$

donde  $A$  es una constante de normalización,  $\beta$  es un parámetro complejo,  $S_+$  el operador de subida de espín y  $|s, -s\rangle \equiv |-s\rangle$  es el estado de espín de proyección más baja. En este trabajo, el espín vale  $s = N/2$ . Para hallar la constante de normalización  $A$  debemos hacer  $\langle s, \beta | s, \beta \rangle = 1$ . Para ello primero debemos demostrar que:

$$S_+^n |-s\rangle = n! \sqrt{\binom{2s}{n}} |-s + n\rangle . \quad (\text{B.3})$$

Lo haremos aplicando de manera iterativa la ecuación de autovalores de  $S_+$  de la ecuación (2.3):

$$k = 1; \quad S_+ |-s\rangle = \sqrt{s(s+1) - (-s)(-s+1)} |-s+1\rangle = \sqrt{2s} |-s+1\rangle ,$$

$$k = 2; \quad S_+^2 |-s\rangle = S_+ \sqrt{2s} |-s+1\rangle = \sqrt{2(2s-1)} \sqrt{2s} |-s+2\rangle ,$$

$$k = 3; \quad S_+^3 |-s\rangle = \sqrt{3(2s-2)} \sqrt{2(2s-1)} \sqrt{2s} |-s+3\rangle ,$$

⋮

$$k = i; \quad S_+^i | -s \rangle = \sqrt{i[2s - (i - 1)]} \dots \sqrt{3(2s - 2)} \sqrt{2(2s - 1)} \sqrt{2s} | -s + i \rangle. \quad (\text{B.4})$$

Con la forma del término  $i$ -ésimo, tenemos la forma general para  $n$ :

$$\begin{aligned} S_+^n | -s \rangle &= \sqrt{n[2s - (n - 1)]} \sqrt{(n - 1)[2s - (n - 2)]} \dots \sqrt{[n - (n - 1)][2s - (n - n)]} | -s + n \rangle, \\ S_+^n | -s \rangle &= \sqrt{n! [2s - (n - 1)][2s - (n - 2)] \dots [2s]} | -s + n \rangle = \\ &= \sqrt{n! \frac{2s!}{(2s - n)!}} | -s + n \rangle = n! \sqrt{\binom{2s}{n}} | -s + n \rangle. \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Una vez hemos demostrado esto, usaremos la expansión en serie de la exponencial  $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$  para escribir la ecuación (B.2):

$$|s, \beta\rangle = A \sum_{n=0}^{2s} \frac{(\beta S_+)^n}{n!} | -s \rangle = A \sum_{n=0}^{2s} \beta^n \sqrt{\binom{2s}{n}} | -s + n \rangle. \quad (\text{B.6})$$

En nuestro caso la suma sólo es hasta  $2s$  porque es el número de elementos de la base. De igual forma, el estado coherente conjugado es:

$$\langle s, \beta| = A^* \sum_{m=0}^{2s} \frac{(\beta^* S_+^+)^m}{m!} \langle -s| = A^* \sum_{m=0}^{2s} \beta^{*m} \sqrt{\binom{2s}{m}} \langle -s + m|, \quad (\text{B.7})$$

por tanto, la constante de normalización se obtiene de:

$$\begin{aligned} \langle s, \beta| s, \beta \rangle &= AA^* \sum_{n=0}^{2s} \sum_{m=0}^{2s} \beta^n \beta^{*m} \sqrt{\binom{2s}{n} \binom{2s}{m}} \delta_{m,n} = |A|^2 \sum_{n=0}^{2s} (\beta \beta^*)^n \binom{2s}{n} = \\ &= |A|^2 (1 + \beta \beta^*)^{2s} = 1 \Rightarrow |A| = (1 + \beta \beta^*)^{-s}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Donde en el último paso se ha utilizado el teorema del binomio:  $(1 + x)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k$ . Por tanto el estado coherente normalizado es:

$$|s, \beta\rangle = \frac{e^{\beta S_+}}{(1 + \beta \beta^*)^s} | -s \rangle. \quad (\text{B.9})$$

Ahora vamos a demostrar las relaciones diferenciales de la ecuación (2.8). Empeza-

remos con  $S_+ |s, \beta\rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} |s, \beta\rangle$ , tenemos que (no escribiremos la constante de normalización por simplicidad en la notación y porque no influye en los cálculos):

$$S_+ |s, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n S_+^{n+1}}{n!} |-s\rangle. \quad (\text{B.10})$$

Teniendo en cuenta que  $\frac{\partial}{\partial \beta} \beta^{n+1} = (n+1) \beta^n$ , multiplicamos y dividimos por  $(n+1)$  y obtenemos:

$$S_+ |s, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\beta^{n+1} S_+^{n+1}}{(n+1)!} |-s\rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} |s, \beta\rangle. \quad \blacksquare \quad (\text{B.11})$$

La última igualdad se obtiene simplemente haciendo un cambio de variable en los índices de la suma  $n+1 = k$ . Vamos a demostrar ahora  $S_z |s, \beta\rangle = \left(\beta \frac{\partial}{\partial \beta} - s\right) |s, \beta\rangle$ :

$$S_z |s, \beta\rangle = S_z \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n S_+^n}{n!} |-s\rangle. \quad (\text{B.12})$$

Tenemos, por tanto, que examinar el término  $S_z S_+^n$ , utilizando la relación de conmutación  $[S_z, S_+] = S_+$ :

$$\begin{aligned} S_z S_+^n &= S_z S_+ S_+^{n-1} = (S_+ + S_+ S_z) S_+^{n-1} = S_+^n + S_+ S_z S_+^{n-1} = S_+^n + S_+ (S_+ + S_+ S_z) S_+^{n-2} = \\ &= 2S_+^n + S_+^2 S_z S_+^{n-2} = \dots = n S_+^n + S_+^n S_z. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Hemos llevado el término  $S_z$  a la derecha, que es lo que buscábamos y aparte tenemos un término más:

$$S_z |s, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n S_+^n}{n!} (n + S_z) |-s\rangle. \quad (\text{B.14})$$

Si utilizamos ahora que  $S_z |m_s\rangle = m_s |m_s\rangle$ , obtenemos:

$$S_z |s, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n S_+^n}{n!} (n - s) |-s\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{n \beta^n S_+^n}{n!} |-s\rangle - s |s, \beta\rangle. \quad (\text{B.15})$$

Nos damos cuenta que  $\frac{\partial}{\partial \beta} \beta^n = n \beta^{n-1}$ , por tanto multiplicamos y dividimos por  $\beta$  en el sumatorio y obtenemos la derivada de beta:

$$S_z |s, \beta\rangle = \beta \sum_{n=0}^{2s} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\beta^n S_+^n}{n!} |-s\rangle - s |s, \beta\rangle = \left(\beta \frac{\partial}{\partial \beta} - s\right) |s, \beta\rangle. \quad \blacksquare$$

Por último, vamos a demostrar  $S_- |s, \beta\rangle = \left(2s\beta - \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta}\right) |s, \beta\rangle$  :

$$S_- |s, \beta\rangle = S_- \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n S_+^n}{n!} | -s \rangle. \quad (\text{B.16})$$

Ahora debemos examinar el término  $S_- S_+^n$ , utilizando la relación de conmutación  $[S_+, S_-] = 2S_z$ :

$$\begin{aligned} S_- S_+^n &= (S_+ S_- - 2S_z) S_+^{n-1} = S_+ (S_+ S_- - 2S_z) S_+^{n-2} - 2(S_+ + S_+ S_z) S_+^{n-2} = \\ &= (S_+^2 S_- - 4S_+ S_z) S_+^{n-2} - 2S_+^{n-1} = (S_+^3 S_- - 6S_+^2 S_z) S_+^{n-3} - 6S_+^{n-1} = \dots = \\ &= (S_+^k S_- - 2k S_+^{k-1} S_z) S_+^{n-k} - k(k-1) S_+^{n-1} = S_+^n S_- - 2n S_+^{n-1} S_z - n(n-1) S_+^{n-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Una vez tenemos estos términos, podemos expresar :

$$S_- |s, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n}{n!} \left( S_+^n S_- - 2n S_+^{n-1} S_z - n(n-1) S_+^{n-1} \right) | -s \rangle. \quad (\text{B.18})$$

Sabemos que  $S_- | -s \rangle = 0$ , luego nos queda

$$S_- |s, \beta\rangle = \sum_{n=0}^{2s} \frac{\beta^n S_+^{n-1}}{n!} (-2n S_z - n(n-1)) | -s \rangle. \quad (\text{B.19})$$

Multiplicamos y dividimos por  $\beta$  en el primer término además de usar de nuevo la ecuación de autovalores de  $S_z$ , y por  $\beta^2$  en el segundo además de la sustitución  $\frac{\partial}{\partial \beta} \beta^{n-1} = (n-1) \beta^{n-2}$ . Obtenemos:

$$S_- |s, \beta\rangle = \left( 2s\beta - \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \right) |s, \beta\rangle. \quad \blacksquare \quad (\text{B.20})$$



## Apéndice C

### Programa de Matlab

En este apéndice se muestra el programa de Matlab desarrollado para obtener todos los resultados del trabajo. No se han incluido aquellas líneas de código destinadas a la obtención de representaciones gráficas por simplificar el código.

```

1  %En este programa se diagonaliza el hamiltoniano de Lipkin
2  %con una anarmonicidad en una base de spin  $S=N/2$ ,  $M_s$ .
3  tic
4  close all
5  clear variables
6  %Definimos los parámetros
7  alpha=0; %Parámetro alpha
8  incremento=0.005; lambda=0.0:incremento:1; %Parámetro lambda
9  %Valor fijo de lambda y su posición en el vector
10 lambda1=.4; poslambda1=find(abs(lambda-lambda1)<1e-4);
11 delta=0.7; lambda2=lambda1+delta; %Parámetro delta y lambda 2
12 N=100; %Número de partículas del sistema
13 %Número de excitación k/N
14 eqn=(0:1:N)/N; estex=0; posestex=find(abs(eqn-estex)<1e-3);
15 %Definimos la base y los operadores Sz Smas Smenos
16 s=N/2; ms=-s:s;
17 Szmedio=zeros(length(ms),length(lambda),length(N));
18 Sx=zeros(length(ms)); Sy=zeros(length(ms));
19 Szi=zeros(1,length(ms));
20 for ii=1:2*s+1;

```

```

21  Szi(ii)=- (s+1-ii);
22  end
23  Sz=diag(Szi);
24  for j=1:length(ms)
25  for ii=1:length(ms)
26  m=j-(s+1);
27  n=ii-(s+1);
28  if m==(n+1)
29  Sx(ii,j)=sqrt((s+1)*(ii+j-1)-ii*j)/2;
30  Sy(ii,j)=-1i*sqrt((s+1)*(ii+j-1)-ii*j)/2;
31  elseif m==(n-1)
32  Sx(ii,j)=sqrt((s+1)*(ii+j-1)-ii*j)/2;
33  Sy(ii,j)=1i*sqrt((s+1)*(ii+j-1)-ii*j)/2;
34  end
35  end
36  end
37  Smas=Sx+1i*Sy;
38  Smenos=Sx-1i*Sy;
39  %Construimos la matriz Hamiltoniana.
40  Ham=zeros(length(ms),length(ms),length(lambda));
41  Ham2=zeros(length(ms),length(ms),length(lambda));
42  Ham3=zeros(length(ms),length(ms),length(lambda));
43  autoval=zeros(length(ms),length(lambda));
44  autovec=zeros(length(ms),length(ms),length(lambda));
45  autoval2=zeros(length(ms),length(lambda));
46  autovec2=zeros(length(ms),length(ms),length(lambda));
47  for k=1:length(lambda)
48  for j=1:length(ms)
49  for ii=1:length(ms)
50  m=j-(s+1); n=ii-(s+1);
51  if m==n
52  Ham(ii,j,k)=(lambda(k)*N/2)+lambda(k)*n-(1-lambda(k))/...
53  N*(N*(N/2+1)-2*n^2)+alpha*N/4-alpha/N*n^2;
54  Ham2(ii,j,k)=Ham(ii,j,k)+delta*(n+N/2)+...
55  delta/N*(N*(N/2+1)-2*n^2);
56  elseif m==(n-2)
57  Ham(ii,j,k)=-(1-lambda(k))/N*(sqrt(N/2*(N/2+1)-...
58  n*(n-1))*sqrt(N/2*(N/2+1)-(n-1)*(n-2)));
59  Ham2(ii,j,k)=Ham(ii,j,k)+delta/N*(sqrt(N/2*(N/2+1)-...
60  n*(n-1))*sqrt(N/2*(N/2+1)-(n-1)*(n-2)));

```

```

61 elseif m==(n+2)
62 Ham(ii,j,k)=-(1-lambda(k))/N*(sqrt(N/2*(N/2+1)-...
63 n*(n+1))*sqrt(N/2*(N/2+1)-(n+1)*(n+2)));
64 Ham2(ii,j,k)=Ham(ii,j,k)+delta/N*(sqrt(N/2*(N/2+1)-...
65 n*(n+1))*sqrt(N/2*(N/2+1)-(n+1)*(n+2)));
66 end
67 end
68 end
69 %%Diagonalizamos las matrices hamiltonianas
70 [V,D]=eig(Ham(:,:,k),'vector');
71 autovec(:,:,k)=V;
72 autoval(:,k)=D;
73 [V2,D2]=eig(Ham2(:,:,k),'vector');
74 autovec2(:,:,k)=V2;
75 autoval2(:,k)=D2;
76 end
77 autovalN=autoval/N; %Energia por particula
78 %Valor esperado de Sz
79 for k=1:length(lambda)
80 for j=1:length(ms)
81 Szmedio(j,k)=autovec(:,j,k)'*((Sz+N*...
82 eye(length(Sz))/2)/N)*autovec(:,j,k);
83 end
84 end
85 %Derivadas de la energía frente a lambda
86 degs=diff(autoval(posesdex,:))/incremento;%primera derivada
87 d2egs=diff(degs)/incremento;%segunda derivada
88 %Gap de energía entre niveles para un mismo lambda
89 vectorenergia=autoval(:,poslambda1)/N;
90 gap=diff(vectorenergia);
91 dergap=gap/(1/N);
92 %%Calculo analítico
93 beta=zeros(1,length(lambda)); e=zeros(1,length(lambda));
94 Szmedioan=zeros(1,length(lambda));
95 degsan=zeros(1,length(lambda));
96 d2egsan=zeros(1,length(lambda));
97 for ii=1:length(lambda)
98 if lambda(ii)<(4-alpha)/5
99 beta(ii)=sqrt(alpha+5*lambda(ii)-4)/...
100 sqrt(alpha+3*lambda(ii)-4);

```

```

101 else
102 beta(ii)=0;
103 end
104 %Energia por partícula
105 e(ii)=lambda(ii)*beta(ii)^2/(1+beta(ii)^2)+...
106 alpha*beta(ii)^2/(1+beta(ii)^2)^2-(1-lambda(ii))...
107 *(beta(ii)^2+2*beta(ii)^2+beta(ii)^2)/(1+beta(ii)^2)^2;
108 %Valor esperado de Sz analitico
109 Szmedioan(ii)=((N/2*(beta(ii)^2-1)/(1+beta(ii)^2))+N/2)/N(end);
110 end
111 %Derivada analítica de la energía con respecto a lambda
112 for ii=1:length(lambda)
113 if lambda(ii)<(4-alpha)/5
114 degsan(ii)=(3*alpha^2+25*alpha*lambda(ii)-24*alpha...
115 +50*lambda(ii)^2-100*lambda(ii)+48)/...
116 (2*(alpha+4*lambda(ii)-4)^2);
117 d2egsan(ii)=(alpha-4)^2/(2*(alpha+4*lambda(ii)-4)^3);
118 else
119 degsan(ii)=0; d2egsan(ii)=0;
120 end
121 end
122 %Energia por partícula frente a beta
123 betaan=-10:0.1:10;
124 ean=zeros(1,length(betaan));
125 for i=1:length(betaan)
126 ean(i)=lambda1*betaan(i)^2/(1+betaan(i)^2)+alpha*...
127 betaan(i)^2/(1+betaan(i)^2)^2-(1-lambda1)*(betaan(i)^2 ...
128 +2*betaan(i)^2+betaan(i)^2)/(1+betaan(i)^2)^2;
129 end
130 %%Calculos referentes al eco de Loschmidt
131 gs=autovec(:,1,postlambda1);
132 %El Hamiltoniano en lambda 1 es
133 Ham1=lambda1*(Sz+eye(length(ms))*N/2)+alpha/N*...
134 (diag(ones(1,length(ms)))*(N/2)^2-Sz*Sz)...
135 -(1-lambda1)/N*(Smas*Smas+Smenos*Smenos+...
136 Smas*Smenos+Smenos*Smas);
137 %El hamiltoniano en lambda 2 es
138 Ham22=Ham1+delta*((Sz+diag(ones(1,length(ms)))*N/2)+...
139 1/N*(Smas*Smas+Smenos*Smenos+Smas*Smenos+Smenos*Smas));
140 %Hamiltoniano prima

```

```

141 Hampri=Sz+diag(ones(1,length(ms))*N/2+1/N*...
142 (Smas*Smas+Smenos*Smenos+Smas*Smenos+Smenos*Smas);
143 time=0:0.1:20; %Variable temporal
144 energiacrit=0; %Energía del sistema tras el quench
145 %Delta crítico
146 deltacrit=(energiacrit-autoval(1,poslambda1)/N)/...
147 ((autovec(:,1,poslambda1)'*Hampri*autovec(:,1,poslambda1))/N)
148 %%Calculamos el eco de poniendo el estado fundamental
149 %como comb. lin. de autoestados de Ham2
150 term2=zeros(1,length(time)); termconj2=zeros(1,length(time));
151 r2=zeros(1,length(time)); %Definimos el eco de lochsmidt con
    Ham2
152 for j=1:length(time)
153 for ii=1:length(ms)
154 term2(j)=term2(j)+exp(1i*autoval2(ii,poslambda1)*time(j))...
155 *abs((autovec2(:,ii,poslambda1)'*gs))^2;
156 termconj2(j)=termconj2(j)+exp(-1i*autoval2(ii,poslambda1)*...
157 time(j))*abs((autovec2(:,ii,poslambda1)'*gs))^2;
158 end
159 r2(j)=term2(j)*termconj2(j);
160 end
161 %%Calculamos el IPR
162 sumaipr=zeros(1,length(ms)); ipr=zeros(1,length(ms));
163 for j=1:length(ms)
164 sumaipr(j)=sum(abs(autovec(:,j,poslambda1)).^4);
165 ipr(j)=1/sumaipr(j)/N;
166 %%Calculamos los coeficientes cuadrados de los autoestados
167 energiabase=zeros(1,length(ms)); energiaautoestado=0.2;
168 [e_autoestado,posautoestado]=min(abs(energiaautoestado-...
169 autoval(:,poslambda1)/N)); identidad=eye(length(ms));
170 coefcuad=autovec(:, :, poslambda1).^2;
171 for ii=1:length(ms)
172 energiabase(ii)=((identidad(:,ii)')*Ham1*(identidad(:,ii)))/N;
173 end
174 end
175 %%Calculo del OTOC
176 Wotoc=zeros(length(ms),length(ms),length(time));
177 otoc=zeros(1,length(time));
178 Votoc=(Sx)/N;
179 for j=1:length(time)

```

```
180 Wotoc(:, :, j) = expm(1i*Ham22*time(j))*Votoc*....
181 expm(-1i*Ham22*time(j));
182 otoc(j) = autovec(:, 1, poslambda1)' * ((Wotoc(:, :, j)*...
183 Votoc*Wotoc(:, :, j)*Votoc)) * autovec(:, 1, poslambda1);
184 end
185 steadyvalue = trapz(time, real(otoc)/0.06)/40000;
186 %%Calculos de Husimi
187 Husimi = zeros(length(ms), length(lambda));
188 for k = 1:length(lambda)
189 for j = 1:length(ms)
190 for ii = 1:length(ms)
191 Husimi(j, k) = Husimi(j, k) + autovec(ii, j, k)^2*...
192 nchoosek(N, ii-1)^2/nchoosek(2*N, 2*(ii-1));
193 end
194 end
195 end
196 toc
```

# Bibliografía

- [1] P Ring. y P Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer ( 2004).
- [2] J. P. Elliott y B. H. Flowers, Proc. Roy. Soc. A242, 57 (1959).
- [3] F. Iachello y A. Arima, *The Interacting Boson Model*, Cambridge University Press (1987).
- [4] Barry M. Garraway. *The Dicke model in quantum optics: Dicke model revisited*. Philosophical Transaction of the Royal Society A 369, 1137-1155 (2011).
- [5] H J Lipkin, N Meshkov y N Glick. Nucl. Phys. A 62 188 (1965).
- [6] P. Pérez Fernández. *Estudio de transiciones de fase cuánticas en sistemas de dos niveles*, Tesis Doctoral, Universidad de Sevilla (2011).
- [7] A. Sugita, H. Aiba. Phys. Rev. E 65, 036205 (2002)
- [8] T. Gorin, T. Prosen, T. H. Seligman, and M. Znidaric. *Dynamics of Loschmidt echos and fidelity decay*. Physics Reports, Vol. 435, pp. 33-156 (2006).
- [9] B. Swingle. Nat. Physics 14, 988-990 (2018).
- [10] J. Aguilar Peris, *Curso de Termodinamica*, Alhambra Universidad, Primera Edición (1989).
- [11] S Sachdev. *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (2011).
- [12] F. Iachello, N.V. Zamfir. Phys. Rev. Lett. 92, 212501 (2004).
- [13] R. Gilmore, D.H. Feng. Nucl. Phys. A 301, 189 (1978)
- [14] D.H. Feng, R. Gilmore, S.R.Deans. Phys. Rev. C 23, 1254 (1981)
- [15] M. Votja. Rep. Prog. Phys. 66. 2069 (2003).

- 
- [16] M.A. Caprio, P. Cejnar, F. Iachello. *Annals of Physics* 323, 1106–1135 (2008).
- [17] Lea F. Santos, Francisco Pérez-Bernal. *Phys. Rev. A* 92, 050101 (2015).
- [18] F. Perez-Bernal y O. Alvarez-Bajo. *Phys. Rev. A* 81, 050101(R) (2010).
- [19] F. Pérez-Bernal y F. Iachello. *Phys. Rev. A* 77, 032115 (2008).
- [20] L. F. Santos, M. Tavora, y F. P-Bernal, *Phys. Rev. A* 94, 012113 (2016)
- [21] P. Cejnar, M. Macek, S. Heinze, J. Jolie, y J. Dobes, *J. Phys. A: Math. Gen.* 39, L515 (2006).
- [22] J M Radcliffe. *Some properties of coherent spin states*. *J. Phys. A: General Physics*, Volume 4, Number 3 (1971).
- [23] Q. Wang y F. Perez-Bernal. *Probing excited-state quantum phase transition in a quantum many body system via out-of-time-ordered correlator*. arXiv:1812.01920 (2018).
- [24] J. J. Sakurai y J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics: Second Edition*. Ed. Pearson (2010).