

Transiciones de fase y termalización en el modelo st

Phase transitions and thermalization in the st model

Ángel Gutiérrez Rubio (angelgutierrezrubio@gmail.com)

Dirigido por: Joaquín Retamosa Granada (iokin@nuc3.fis.ucm.es)
Armando Relaño Pérez (armando.relano@gmail.com)

Septiembre de 2011

Palabras clave: modelo st , Lipkin, IBM, variacional, transición, fase, cuántica, termalización, microcanónica, relajación.

Keywords: st model, Lipkin, IBM, variational, quantum, phase, transition, thermalization, microcanonical, relaxation.

Índice

1. Introducción	3
2. Sistema y fases	5
2.1. Método exacto	6
2.2. Método variacional	7
2.3. Comparación entre los métodos exacto y variacional	9
2.4. Estudio de la función $E_{var}(\beta)$	10
2.5. Interpretación del método variacional en los casos $\omega = 0$ y frontera C-D	14
2.6. Fases del sistema en el estado fundamental	16
2.7. Parámetros de orden y regiones del espectro	17
2.8. Estudio de los estados excitados	24
2.9. Fases del sistema para los estados excitados	28
3. Evolución temporal y termalización	30
3.1. Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo	30
3.2. Elección de $ \psi(t_0)\rangle$	31
3.3. Elección de una magnitud para el estudio de la evolución temporal	32
3.4. Predicción microcanónica del valor de equilibrio para n_t	32
3.5. Comportamiento de $\langle n_t \rangle(t)$ en las distintas regiones del espectro	33
3.6. Recurrencias de $\langle n_t \rangle(t)$ y sus periodos	34
3.7. Cuantificación de la desviación de $\langle n_t \rangle(t)$ con respecto a $\langle n_t \rangle_{mic}$	35
4. Conclusión	37

Resumen

En el presente trabajo, se aborda el estudio del modelo st , que consiste en un sistema de bosones de dos niveles (con momento angular 0) en interacción, equivalente al modelo de Lipkin y que puede considerarse como una simplificación del IBM (*Interacting Boson Model*) (véase [3] y [4]).

El análisis llevado a cabo se compone de dos partes: la primera consiste en su caracterización atendiendo a zonas de su espectro con diferente estructura, al comportamiento de magnitudes de interés (parámetros de orden) en dichas regiones y a la subsiguiente especificación de cuáles son las fases que se presentan tanto en el estado fundamental como en los excitados. La segunda se centra en la determinación de la evolución temporal del modelo y de la correlación entre las diferentes fases del sistema y el hecho de que se produzca termalización (o relajación a una situación de equilibrio independiente de las condiciones iniciales). El último punto es un tema de estudio e interés actual, puesto que no han sido dilucidadas en el marco de la Mecánica Cuántica, contrariamente a como ocurre en la Física Clásica, las circunstancias que implican la llegada de un sistema a un estado de equilibrio. Abordaremos este asunto partiendo del caso concreto del modelo st .

Demostraremos siguiendo el esquema anterior que el sistema presenta tres fases excitadas con propiedades claramente diferenciadas, manifestándose éstas en la estructura del espectro, en la conducta de los parámetros de orden y en la presencia de termalización en sólo dos de ellas. La conclusión a la que se llega en cuanto a lo último es relevante y novedosa: consiste en la observación por vez primera de una relación directa entre una transición de fase cuántica y un cambio brusco en la relajación al equilibrio y aplicabilidad de la colectividad microcanónica.

Abstract

The present essay puts forward the study of the st model, consisting in a two level (with 0 angular momentum) interacting boson system, equivalent to the Lipkin model and being a simplification of IBM (*Interacting Boson Model*) (see [3] and [4]).

The analysis developed is made up of two parts, the first one being a characterization according to the different structure zones that can be found in the spectrum, the behaviour of magnitudes of interest (order parameters) within those regions and the subsequent specification of which phases can be found in both fundamental and excited states; on the other hand, the second one is centered in the determination of the model's temporal evolution and the correlation between different system phases and the process of thermalization (or relaxation towards an equilibrium state independent of the initial conditions). As to the last point, it is a currently studied issue, given that no circumstances under which the reaching of an equilibrium state is guaranteed have been elucidated (unlike in the framework of Classical Mechanics). This topic will be dealt from the perspective of a concrete case: the st model.

Following the previous scheme, it will be demonstrated that three excited phases with clearly dissimilar properties are present, with them becoming evident in the spectrum structure, in the behaviour of several order parameters and in the existence of thermalization only in two of them. The conclusion reached concerning the latter point is relevant and new: it consists of the observation for the first time of a direct relationship between a quantum phase transition and an abrupt change in relaxation to equilibrium and applicability of microcanonical collectivity.

1. Introducción

El estudio de las **transiciones de fase cuánticas** es notablemente relevante en el marco de la investigación actual. Goza, por una parte, de un interés teórico o fundamental avalado por el afán de explicar y caracterizar las diversas configuraciones (con subsecuentes propiedades dispares) de ciertos sistemas en función de los valores de las variables que los gobiernan. Por otra, la necesidad de su comprensión emerge en el desarrollo de aplicaciones eminentemente prácticas y de no menos trascendencia, como podrían ser las involucradas en la tecnología necesaria para conseguir el funcionamiento de un computador cuántico.

La **descripción clásica** que sobre ellas se ha hecho es el pilar sobre el que se construye un ulterior tratamiento cuántico. Según [1], ésta se basa en afirmar que 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. La clasificación de las mismas atiende al menor orden de la derivada de g para la que hay un salto finito (transiciones de primer y segundo orden); en el caso de existir un salto infinito en alguna de las segundas derivadas de g , Tisza les concede el apelativo de transiciones λ . Las magnitudes físicas importantes serán, pues, las derivadas de g con respecto a las variables que gobiernan el sistema. Nos indicarán si éste se encuentra en una fase o en otra. Como ejemplo, podemos citar volúmenes y entropías por unidad de masa, el calor específico a presión constante o el coeficiente de compresibilidad de una sustancia.

Cuánticamente se establece un claro paralelismo con lo anterior. [2] define una transición de fase como el **comportamiento no analítico de la energía del estado fundamental**. Esto puede extenderse tanto a otras magnitudes diferentes a la energía como a la descripción de los estados excitados, recibiendo en el último caso el nombre de *Transiciones de Fase Cuánticas de los Estados Excitados* (ESQPT). Su clasificación ahora alude a la causa que provoca la ausencia de analiticidad de cierta variable. Tomando la energía como referencia, puede tener lugar por un cruce de niveles (transición de primer orden) o por la presencia de una alta densidad de los mismos, que desemboca en una pérdida de analiticidad cuando el número de partículas tiende a infinito (límite termodinámico). Al igual que ocurría en el caso clásico, ciertas magnitudes cobrarán protagonismo en este contexto. Nos referiremos a ellas como parámetros de orden.

En vistas a lo anterior, el **estudio de una transición de fase cuántica** debe reposar sobre dos cuestiones fundamentales. Una de ellas es la caracterización del **espectro de energía**, donde deberán encontrarse regiones en las que se produzcan cruces de niveles o haya una alta densidad de ellos, que apunten a la existencia de una transición. La otra es el estudio de magnitudes que revelen cuándo se producen, y que gocen de un sentido físico con el que describir las distintas fases desde un punto de vista cualitativo (**parámetros de orden**).

Un caso concreto en el que el estudio de las transiciones de fase puede ser provechoso es en el que vamos a centrarnos en este artículo, **el modelo st** . Consiste en un **sistema de bosones de dos niveles** (ambos con momento angular igual a cero) que combina una gran sencillez con una considerable riqueza en fenómenos críticos.

El modelo en cuestión es una herramienta útil en el **ámbito de la Física Nuclear**. Como se afirma en [3], es una generalización del modelo de Lipkin con la que obtenemos un hamiltoniano que coincide con el Q-consistente del Modelo de Bosones en Interacción (IBM) cuando en éste imponemos que uno de sus parámetros, γ , es igual a 0 (lo que equivale restringir nuestro estudio al de los núcleos axialmente simétricos; véase [4]). Podemos hablar, pues, de una **simplificación del IBM**. Sin embargo, lo interesante es que, aun siendo más sencillo (haciendo posible, en consecuencia, llevar a buen término cálculos con un gran número de bosones), conserva las principales características del diagrama de fases del IBM. Por ello nos permite, por ejemplo, estudiar las transiciones de fase de un núcleo esférico a otros con simetría axial. En consecuencia,

de él podemos obtener información valiosa sobre temas propios al estudio de los núcleos.

Otras motivaciones dotan de mayor trascendencia al conocimiento de nuestro sistema. Si somos capaces de describirlo, también podremos investigar sobre cómo interacciona con otros, y en qué medida a ese respecto son importantes las transiciones de fase que en él pueden tener lugar. Aquí entra en juego una interesante aplicación llevada a cabo en [5], que consiste en el estudio de la interacción de un entorno descrito por nuestro modelo st con un qubit, con la consecuente posibilidad de que se produzcan **fenómenos decoherentes**. Se demuestra que el papel que desempeñan entonces las transiciones de fase del entorno es fundamental, hasta el extremo de condicionar el entrelazamiento que debe estar presente para poder hacer funcionar un computador cuántico. A esta cuestión práctica se suma, además, una ampliación del conocimiento sobre procesos de decoherencia, que hacen aflorar un comportamiento clásico de sistemas cuánticos. Lo anterior prueba, pues, que el interés del modelo bajo estudio no queda anclado en su ámbito de origen, la Física Nuclear, sino que goza de una idiosincrasia multidisciplinaria que exhorta a su investigación.

El avance en otros temas puede verse también impulsado por lo que vamos a desarrollar a lo largo de este artículo. Uno de los problemas en cuya posible resolución puede verse involucrado el conocimiento del modelo st es el de la **evolución temporal de un sistema cuántico que cuenta con un gran número de partículas**. Es ésta una línea de investigación abierta actualmente. En tanto que clásicamente la Física Estadística es capaz de tratar (en el formalismo de las colectividades microcanónica, canónica y macrocanónica) con sistemas caóticos de muchas partículas, prediciendo sus configuraciones de equilibrio en virtud del teorema de ergodicidad, no existe un equivalente en Mecánica Cuántica que asegure el hecho de que necesariamente se produzca una relajación a lo que dictarían cálculos de esa índole. **El fin último de todo este estudio** es precisamente discutir esa cuestión para nuestro modelo concreto, y **ver en qué circunstancias** (que dependerán, como veremos, del hecho de que el sistema se encuentre en una fase u otra) **hay concordancia entre los resultados que proporciona la Física Estadística y la evolución real del sistema**. Es este enfoque un primer paso encaminado, pues, a extraer conclusiones de un ámbito mucho más general y extenso, pero fundamentado desde la perspectiva de tratar con un problema específico, lo suficientemente simplificado como para facilitar el cálculo de resultados de interés aunque no por ello irrelevante dentro del marco (la Física Nuclear) en el que se plantea, como justificábamos previamente. Es de destacar lo novedoso de este estudio, que otorga todavía más interés a lo que nos proponemos, ya que lo concerniente a **la relación entre las fases del modelo st y la evolución temporal que presenta es todavía un tema inexplorado**.

Hemos argumentado, pues, la utilidad de caracterizar e intentar detallar las **propiedades de nuestro sistema**, el modelo st . El modo de proceder, como también hemos comentado, gravita en torno a la **indagación sobre su espectro, el comportamiento de algunos de sus parámetros de orden y la determinación de las transiciones de fase que de ello se siguen**, a lo que posteriormente se sumará **la caracterización de la evolución temporal de las distintas fases del sistema**, incluyendo la **comparación** entre lo predicho por la **colectividad microcanónica** y lo calculado resolviendo la **ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo**.

Quedando clara, pues, la relevancia de nuestro objeto de estudio, hay que centrarse en la **estrategia** para obtener la información que precisamos. Lo más natural es abordar primero el problema desde una **perspectiva numérica**: el cálculo exacto de los autovalores y autofunciones de nuestro hamiltoniano se llevará a cabo en la sección 2.1. A esto seguirá la aplicación del **método variacional** para comenzar con el estudio del estado fundamental (sección 2.2), que, como se mostrará explícitamente, no sólo arrojará muy buenos resultados, sino que nos

permitirá obtener una primera **imagen física** del problema con el que tratamos. A lo largo de las secciones 2.4 y 2.5 se llevará a cabo un estudio de la energía variacional, que será clave tanto para poder examinar el estado fundamental y determinar y caracterizar sus fases (sección 2.6) como para extender el análisis al conjunto de todas las energías. Así se hará patente en la sección 2.8, donde llegaremos a hacer una **descripción cualitativa de las diferentes regiones que presenta el espectro, dotando de una plausible interpretación a un problema** (la determinación de la estructura de los niveles de energía) **del que sólo existía un enfoque numérico**. Quedará con ello, pues, descrito convenientemente el espectro, y será perentorio también el indagar sobre el comportamiento de los **parámetros de orden** en las regiones significativas del mismo, asunto que se lleva a término en la sección 2.7. Todo esto nos conducirá a detallar cuáles son las fases excitadas que se presentan en el modelo st , lo que aparece reflejado en la sección 2.9. A lo largo de **3 calcularemos cómo evoluciona el sistema conforme transcurre el tiempo** a través de un parámetro de orden. Trataremos la **ecuación de Schrödinger** dependiente del tiempo en las secciones desde 3.1 hasta 3.3, y en 3.7 haremos una comparativa con lo dictado por la **colectividad microcanónica** (que se calcula en 3.4). **Llegaremos con ello a la conclusión de cuándo nuestro sistema relajará a un estado de equilibrio descrito por la Física Estadística, y en qué ocasiones es inútil la aplicación de ésta por ponerse de manifiesto cierta memoria del estado inicial**.

El objetivo de este trabajo se vería cumplido llegados a este punto, habiendo proporcionando una comprensión más profunda el hamiltoniano que suscitaba nuestro interés, que incluye una interpretación física del mismo, la capacidad de predecir cualitativamente la estructura de sus niveles, la determinación de sus fases en el estado fundamental y en los excitados, así como el análisis de su evolución temporal y de la concordancia con las predicciones que arroja la colectividad microcanónica.

2. Sistema y fases

Como se comentó en la introducción, nuestro objetivo es analizar un sistema de N bosones de dos niveles, s y t , que tienen momento angular $J = 0$. Las únicas interacciones que tendremos en cuenta son las que se producen a uno y dos cuerpos. El hamiltoniano, que es, según [3], idéntico al del modelo de Lipkin tras hacer una transformación de Schwinger, puede escribirse en formalismo de segunda cuantización (donde la connotación de los operadores construcción, s^\dagger y t^\dagger , y destrucción, s y t , es la obvia) del siguiente modo:

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

donde los operadores \hat{n}_t y \hat{Q}^ω se definen como:

$$\hat{n}_t = t^\dagger t; \quad \hat{Q}^\omega = s^\dagger t + t^\dagger s + \omega t^\dagger t \quad (2)$$

Nuestro sistema se modela, pues, mediante dos parámetros, α y ω , que aparecen manifiestamente en su hamiltoniano. A la hora de poder hacer cálculos con él, nos conviene tomar una base con la que calcular sus representantes. Una que podríamos elegir es, naturalmente, la respectiva a los números de ocupación de los dos niveles en los que pueden emplazarse los bosones, es decir:

$$|Nl\rangle = \frac{t^\dagger{}^l s^\dagger{}^{N-l}}{\sqrt{l!(N-l)!}} |0\rangle \quad l = 0, 1, \dots, N \quad (3)$$

donde, como puede verse con la fórmula anterior, el número de partículas en el nivel t es l y hay $N-l$ partículas en el nivel s . Dichos vectores tienen las siguientes propiedades, que emplearemos para obtener los representantes del hamiltoniano:

$$t^\dagger|Nl\rangle = \sqrt{l+1}|N+1l+1\rangle; \quad t|Nl\rangle = \sqrt{l}|N-1l-1\rangle; \quad (4)$$

$$s^\dagger|Nl\rangle = \sqrt{N-l+1}|N+1l\rangle; \quad s|Nl\rangle = \sqrt{N-l}|N-1l\rangle; \quad (5)$$

Y, además, son ortonormales:

$$\langle N'l'|Nl\rangle = \delta_{N'l'}\delta_{l'l} \quad (6)$$

Con lo anterior podremos calcular los representantes del hamiltoniano en la base elegida. Operando, lo que obtenemos es que los únicos elementos no nulos de la forma $\langle N'l'|H|Nl\rangle$ con $l' \leq l$ son los siguientes:

$$\langle Nl|H|Nl\rangle = l(3\alpha - 2) + l^2 \frac{\alpha - 1}{N}(\omega^2 - 2) \quad (7)$$

$$\langle Nl|H|Nl+1\rangle = \omega \frac{\alpha - 1}{N} \sqrt{(N-l)(l+1)}(1+2l) \quad (8)$$

$$\langle Nl|H|Nl+2\rangle = \frac{\alpha - 1}{N} \sqrt{(l+2)(l+1)(N-l)(N-l-1)} \quad (9)$$

Y, puesto que $H = H^\dagger$, conocemos $\langle N'l'|H|Nl\rangle$ para todos los valores de l y l' posibles. Es decir, tenemos la representación del hamiltoniano en la base de los números de ocupación de los niveles. Se trata de una matriz cuadrada, pentadiagonal y de dimensión $N+1$. Con ello, ya podremos obtener los autovalores de la energía (diagonalizando dicha matriz) y sus respectivos autovectores expresados en la base descrita anteriormente. Esto se hará en el apartado 2.1.

2.1. Método exacto

Contando con los representantes de la matriz no nulos dados por (7), (8) y (9) y teniendo en cuenta las consideraciones hechas en el apartado 2, es obvio que podemos diagonalizar la matriz para obtener sus autovalores. No obstante, hay que tener en cuenta que dicha matriz respectiva a un número de partículas N dado depende de los parámetros α y ω que aparecen en (1).

Veamos cómo es el espectro de energía para valores diferentes de esos parámetros. Para ello, construimos un programa en Matlab que diagonaliza la matriz y, para un valor de ω fijo, calcula los valores de energía respectivos a diferentes valores de α . Como puede verse en la figura 1, donde se muestran los resultados, hay dos espectros claramente diferenciados: aquél en el que $\omega = 0$ y el caso $\omega \neq 0$. En el primero de ellos, sólo apreciamos dos regiones diferentes, que son las correspondientes a $E < 0$ (para la cual el cálculo numérico delata que existe una degeneración doble de los niveles) y a $E > 0$. Por el contrario, en el segundo también existe una zona dentro de $E < 0$ en la que hay numerosos cruces de niveles. En éste, la degeneración es inexistente.

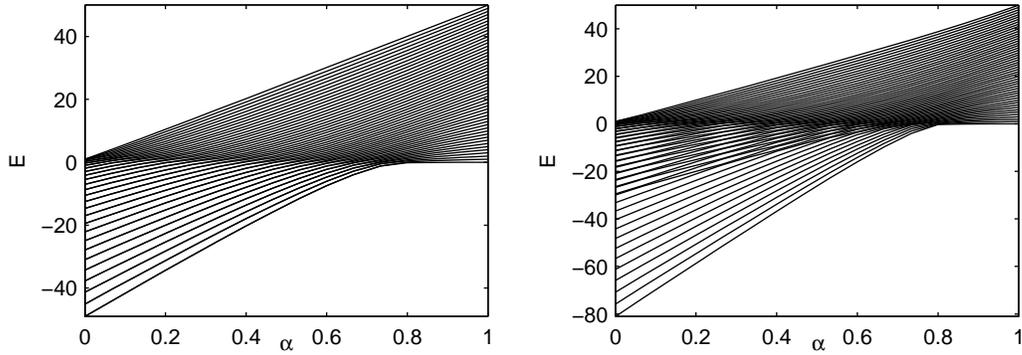


Figura 1: Izquierda: espectro de energía en función de α para $\omega = 0$ y $N = 50$. Derecha: ídem para $\omega = 0.5$.

Ese programa también calcula los autovectores respectivos a los autovalores mencionados antes (en la representación de la base (3)). Disponer de toda esta información nos será útil más adelante, cuando comparemos estos resultados (a los que nos referiremos como *exactos*) con los que arrojará el método variacional desarrollado en la sección 2.2.

Presentamos en la figura 2 un esquema de lo descrito en esta sección, al que nos referiremos constantemente a lo largo del trabajo. Como veremos posteriormente, el hecho de situarnos en una u otra zona propiciará unos resultados muy diferentes en cuanto a evolución temporal se refiere.

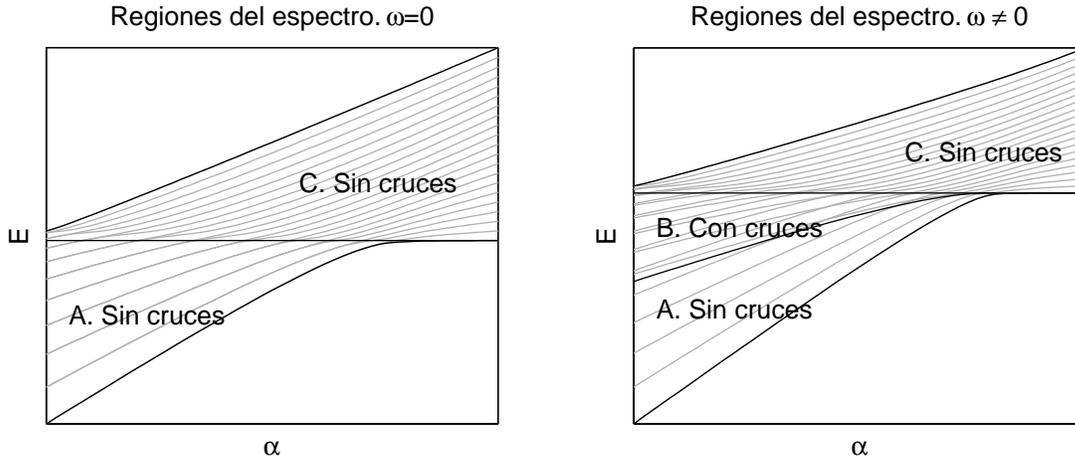


Figura 2: Esquema de las diferentes regiones del espectro para $\omega = 0$ y $\omega \neq 0$. Se indica en cuáles de ellas hay cruces de niveles y en cuáles no.

2.2. Método variacional

Como puede verse en p. 290 de [7], el método variacional nos sirve para calcular una cota superior a la energía del nivel fundamental E_0 . Es decir, dada cualquier función de onda $|\psi\rangle$, se verifica:

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (10)$$

Como puede comprobarse en dicha referencia, de ese procedimiento también puede en oca-

siones extraerse información acerca de la energía de los niveles excitados, y parte de eso es lo que se hará a lo largo de este trabajo. Centrémonos, sin embargo, en primer lugar, en el estudio del fundamental.

Lo que tenemos que hacer es encontrar una buena función de onda de prueba $|\psi\rangle$ que nos proporcione una cota superior para la energía. Puesto que tenemos un sistema de dos niveles, sería muy razonable tomar como estado uno que sea superposición de los autoestados de cada uno. Cualquiera bosón podría encontrarse o bien en el nivel inferior (s) o en el superior (t), asignándosele a cada caso una probabilidad concreta. Si tuviésemos un solo bosón, sería obvio que dicho estado (sin normalizar) sería el siguiente (con la misma notación que la empleada en (3)):

$$|\psi_{1\text{bosón}}\rangle = |10\rangle + \beta|11\rangle = s^\dagger|0\rangle + \beta t^\dagger|0\rangle = (s^\dagger + \beta t^\dagger)|0\rangle \quad (11)$$

Consideremos ahora que la función de onda del sistema de N partículas es igual al producto tensorial de las funciones de onda individuales (todas con la misma β). Podremos escribir, por lo tanto:

$$\boxed{|\psi_{var}\rangle \equiv \prod_{i=1}^N |\psi\rangle_i = (s^\dagger + \beta t^\dagger)^N |0\rangle} \quad (12)$$

Donde la función de onda está sin normalizar. Como decíamos anteriormente, sabemos que se cumplirá:

$$E_0 \leq E_{var}(\beta) \quad \text{siendo} \quad E_{var}(\beta) = \frac{\langle \psi_{var} | H | \psi_{var} \rangle}{\langle \psi_{var} | \psi_{var} \rangle} \quad (13)$$

Y, por lo tanto, será conveniente calcular β como aquél que, siendo solución de la ecuación siguiente, haga menor el valor de $E_{var}(\beta)$:

$$\frac{\partial E_{var}(\beta)}{\partial \beta} = 0 \quad (14)$$

Tenemos, en consecuencia, el procedimiento para calcular tanto una cota superior a la energía del nivel fundamental de nuestro sistema como la función de onda del respectivo estado. La energía variacional ($E_{var}(\beta)$) tomando como función de prueba (12) es la siguiente:

$$E_{var}(\beta) = N \frac{1}{(1 + \beta^2)^2} \left[(\alpha + \omega^2(\alpha - 1)) \beta^4 + 2\omega(\alpha - 1) \left(2 - \frac{1}{N} \right) \beta^3 + \right. \\ \left. + \left(5\alpha + \frac{(\alpha - 1)(\omega^2 - 4)}{N} - 4 \right) \beta^2 + 2\omega \frac{\alpha - 1}{N} \beta \right] \quad (15)$$

Ahora podemos hacer una consideración que simplificará los cálculos posteriores. Tengamos en cuenta que los sistemas que nos interesan constan de muchas partículas (ése era el caso comentado en la introducción sobre modelar el entorno que rodea a un qubit); en otras palabras, pretendamos obtener resultados en el límite termodinámico. En consecuencia, en (15) convendría tomar el límite $N \rightarrow \infty$, lo que conllevaría, como es obvio, una simplificación de la expresión que será de utilidad posteriormente. Hagámoslo, pues:

$$E_{var}(\beta) = N \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} [5\alpha - 4 + 4\omega(\alpha - 1)\beta + (\alpha + \omega^2(\alpha - 1)) \beta^2] \quad (16)$$

Nótese que en (16) la energía es una variable extensiva con respecto a N , mientras que no ocurre lo mismo en (15).

Aplicando ahora (14), tendremos la ecuación que cumple β que proporciona la cota superior más baja para la energía variacional y que, en principio, nos permitiría calcular una función de onda muy próxima a la del estado fundamental:

$$2\omega(\alpha - 1)\beta^4 + [3\alpha - 2\omega^2(\alpha - 1) - 4] \beta^3 - 6\omega(\alpha - 1)\beta^2 + (4 - 5\alpha)\beta = 0 \quad (17)$$

A partir de ahora, sólo tomaremos las soluciones reales de la ecuación anterior. Esto se debe a que puede comprobarse que haciendo los cálculos para $\beta \in \mathbb{C}$ se obtiene prácticamente lo mismo que si tomamos $\beta \in \mathbb{R}$. Para analizar el comportamiento de $E_{var}(\beta)$, tendremos muchas menos dificultades tomando $\beta \in \mathbb{R}$ y el resultado será satisfactorio.

2.3. Comparación entre los métodos exacto y variacional

Antes de hacer más consideraciones acerca del método variacional, convendría comprobar con algunos cálculos que su uso es legítimo. Será así cuando la energía calculada con (16) coincida con la calculada como el menor autovalor del método exacto, y cuando el solape entre las funciones de onda exacta, $|\psi_{exact}\rangle$, y variacional, $|\psi_{var}\rangle$, (definido como $S = |\langle\psi_{exact}|\psi_{var}\rangle|^2$) sea próximo a 1.

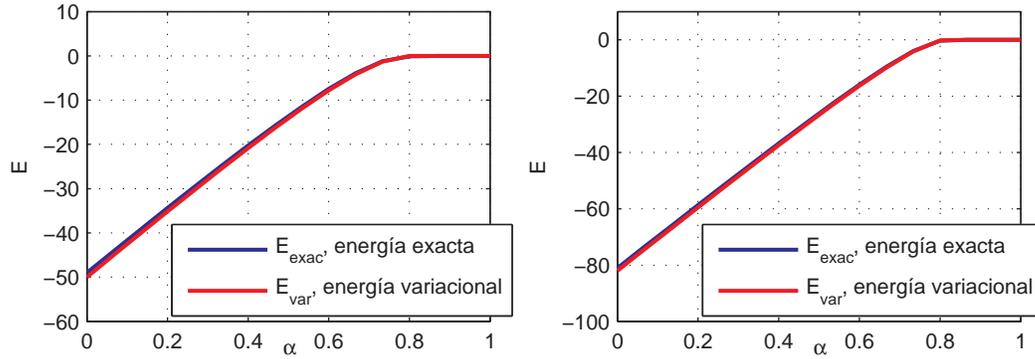


Figura 3: Gráficas de las energías del nivel fundamental calculadas con el método exacto y con el variacional. Izquierda: caso $\omega = 0$, $N = 50$. Derecha: caso $\omega = 0.5$, $N = 50$.

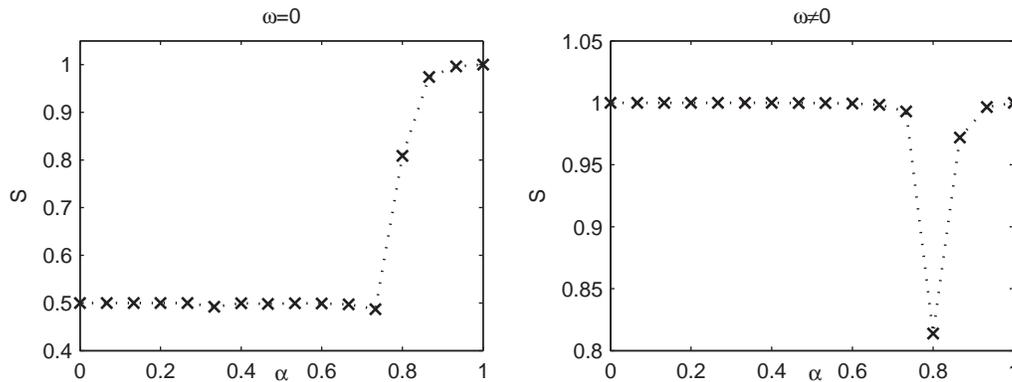


Figura 4: Solapes de las funciones de onda del nivel fundamental calculadas con el método exacto y con el variacional. Izquierda: caso $\omega = 0$, $N = 50$. Derecha: caso $\omega = 0.5$, $N = 50$.

En las figuras 3 y 4 mostramos esos resultados. Claramente, para el caso $\omega \neq 0$ la concordancia entre los resultados exacto y variacional es muy buena. La energía del estado fundamental para $\alpha \in [0, 1]$ es prácticamente la misma que la que se calcula diagonalizando el hamiltoniano, y el solape entre las funciones de onda es muy cercano a 1 salvo en la región en torno a $\alpha = 0.8$.

Por el contrario, el caso $\omega = 0$ parece algo más problemático. Hay una excelente concordancia en lo que se refiere al cálculo de la energía; tan buena como lo era para $\omega \neq 0$. No ocurre lo mismo, sin embargo, cuando atendemos al solape S : éste parece ser igual a $1/2$ para $\alpha < 0.8$ y muy próximo a 1 para $\alpha > 0.8$. En principio, el método variacional es capaz de proporcionar una buena aproximación de la energía aunque la función de onda de prueba no se acerque excepcionalmente a la del estado fundamental. De hecho, puede demostrarse que, para valores pequeños de ϵ , un error de orden ϵ en la función variacional $|\psi_{var}\rangle$ proporciona un valor de la energía que difiere del exacto con un error del orden de ϵ^2 (véase p. 294 de [7]). No obstante, cabría plantearse si disponiendo de un solape tan bajo entre $|\psi_{var}\rangle$ y $|\psi_{exact}\rangle$ podemos obtener la gran precisión en la energía que aparece reflejada en la gráfica. Se verá con detalle que así es en la sección 2.5, donde se evidenciará la importancia de la existencia de degeneración para $E < 0$ en el caso $\omega = 0$ y también la de la presencia de dos mínimos con la misma energía en la expresión (16). El empleo del método variacional quedará entonces plenamente justificado para toda la región del espectro.

La respuesta a las cuestiones precedentes sólo podrá darse cuando se estudie detalladamente el comportamiento de $E_{var}(\beta)$ en función del valor de nuestros parámetros de control. Dicho análisis se llevará a cabo en la sección 2.4, y nos permitirá tanto explicar completamente las gráficas anteriores como llegar a caracterizar nuestro sistema con un diagrama de fases.

2.4. Estudio de la función $E_{var}(\beta)$

Recordemos que tenemos que centrarnos en la caracterización de (16), que viene dada por:

$$E_{var}(\beta) = N \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} [5\alpha - 4 + 4\omega(\alpha - 1)\beta + (\alpha + \omega^2(\alpha - 1))\beta^2]$$

La dependencia que hay en la expresión anterior con los parámetros hace que la función tenga unas propiedades u otras según sea el valor de los mismos. Un estudio detallado de esta cuestión nos lleva a trazar el gráfico que aparece en la figura 5. En él aparecen varias regiones, determinadas por $\alpha \in [0, 1]$ y por $\omega \in \mathbb{R}$, en las que las características de la gráfica de $E_{var}(\beta)$ difieren. Así puede verse en la figura 6 (complementada por la figura 7), donde se ha elegido un representante (α, ω) para cada una de dichas zonas.

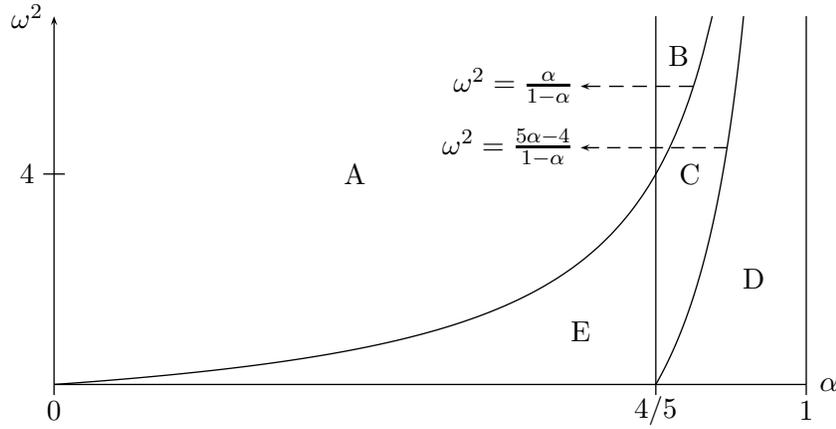


Figura 5: Regiones, en función de los parámetros, de diferente comportamiento de la función $E_{var}(\beta)$.

Por *diferente comportamiento en las gráficas*, del que estamos hablando, entendemos que no haya similitud en alguna de las características siguientes:

- Signo de la ordenada de la asíntota hacia la que tiene $E_{var}(\beta)$ cuando $\beta \rightarrow \pm\infty$.
- Número de extremos locales que presenta la gráfica.
- Existencia en el origen de un máximo.
- Existencia en el origen de un mínimo.

Es por ello por lo que distinguimos los casos A y B o C y E, reflejados en las figuras 6 y 7, que en principio nos parecen muy similares. Los dos últimos puntos de la lista anterior son particularmente importantes, puesto que serán una de las claves para discernir entre las distintas fases que presentará el sistema en función de los parámetros, como se verá posteriormente.

Hay que destacar que, por el momento, lo único que estamos haciendo es un análisis de la forma que tienen las gráficas de $E_{var}(\beta)$ al variar α y ω , sin relacionar directamente sus características con propiedades físicas de nuestro sistema. Ahora sólo queremos caracterizar completamente $E_{var}(\beta)$, para tener posteriormente en cuenta las propiedades (referidas en la lista anterior) que procedan para describir el conjunto de N partículas bajo estudio.

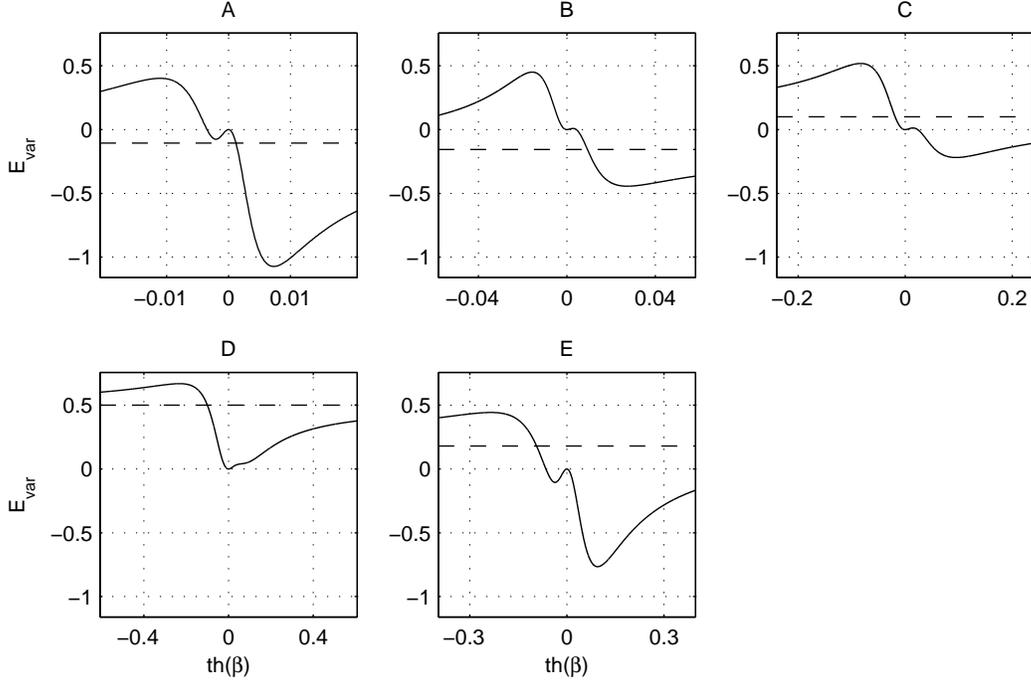


Figura 6: Gráfica de la función $E_{var}(th\beta)$ respectiva a cada una de las regiones indicadas en la figura 5. La línea discontinua representa la asíntota a la que se aproxima $E_{var}(\beta)$ cuando $\beta \rightarrow \pm\infty$. En la figura 7 se muestran más en detalle las zonas más próximas al origen de algunas de las gráficas anteriores.

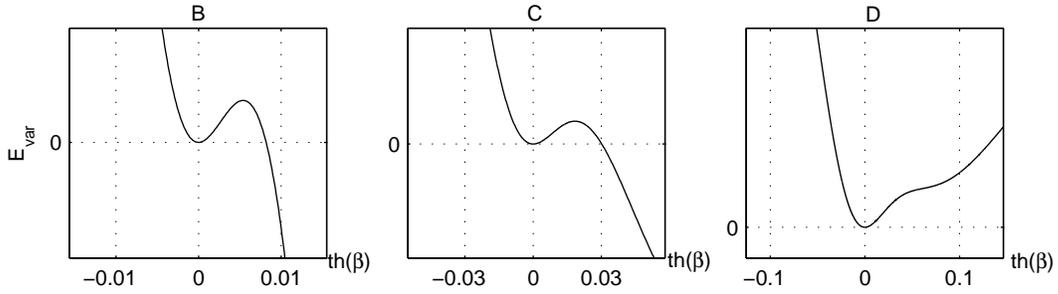


Figura 7: Detalle de algunas de las gráficas que aparecen en la figura 6.

Dada la figura 5, sería lógico también trazar las gráficas de $E_{var}(\beta)$ cuando los valores de los parámetros sean tales que nos sitúen en la frontera de algunas de las regiones que ya hemos caracterizado plenamente. En realidad, las representaciones que vamos a obtener pueden verse como una *mezcla* de aquellas respectivas a las zonas en contacto. Así puede apreciarse en la figura 8. Algunas de ellas, como las correspondientes a $\omega = 0$ serán especialmente interesantes por las implicaciones físicas que acarrearán.

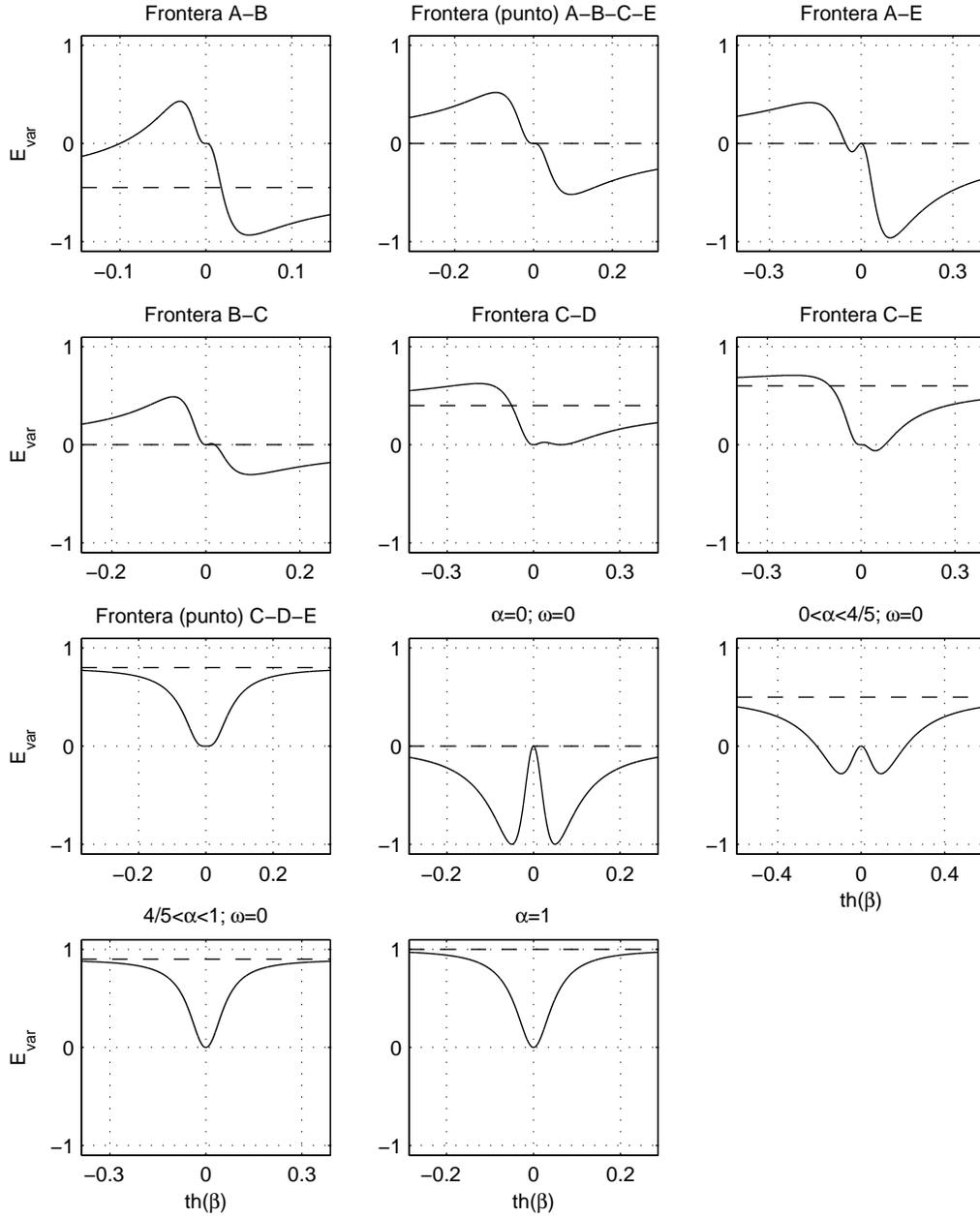


Figura 8: Gráficas de $E_{var}(\text{th}\beta)$ para las fronteras entre las diferentes regiones de la figura 5 y para las rectas que limitan el dibujo. La línea discontinua representa la asíntota a la que se aproxima $E_{var}(\beta)$ cuando $\beta \rightarrow \pm\infty$. En la figura 9 se amplían algunas regiones de las mismas para mostrarlas con mayor claridad. Nota: la semirrecta $\alpha = 0, \omega > 0$ comparte, en cuanto al comportamiento de $E_{var}(\beta)$ se refiere, las mismas propiedades que la región A.

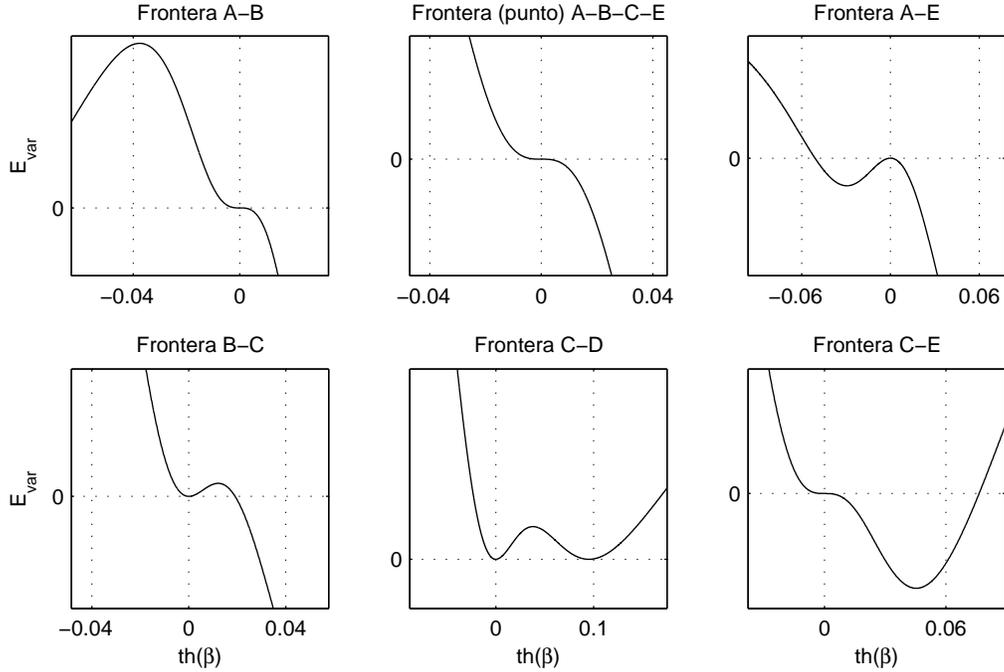


Figura 9: Detalle de algunas de las gráficas de la figura 8.

En este apartado hemos visto, pues, que la variación de los valores de los parámetros que gobiernan nuestro sistema va a ser determinante en cuanto a los resultados que obtendremos aplicando el método variacional, ya que su influencia sobre la función a optimizar, $E_{var}(\beta)$, es muy significativa.

2.5. Interpretación del método variacional en los casos $\omega = 0$ y frontera C-D

Por el momento, hemos logrado calcular la función de onda para el estado fundamental a través del método variacional con mucha precisión si $\omega \neq 0$. Pero todavía está incompleto el estudio de este problema para el caso $\omega = 0$ en el sentido que se explicaba en la sección 2.3. ¿Por qué hay una buena concordancia entre las energías del nivel fundamental calculadas por el método exacto pero no entre las respectivas funciones de onda, como parece indicar el solape entre ellas?

La respuesta a esta pregunta puede darse de nuevo desde el estudio llevado a cabo en la sección 2.4. En la figura 8 aparecen las gráficas que nos interesan, con las etiquetas “ $\alpha = 0; \omega = 0$ ”, “ $0 < \alpha < 4/5; \omega = 0$ ”, “Frontera (punto) C-D-E”, “ $4/5 < \alpha < 1; \omega = 0$ ” y “ $\alpha = 1$ ”. Son todas las que recorren el eje de abscisas de la figura 5 para $\alpha = [0, 1]$. Todas ellas son simétricas con respecto al eje de ordenadas, y apreciamos lo siguiente:

- Si $0 \leq \alpha < 4/5$, existen dos mínimos locales (simétricos) con $|\beta| \neq 0$.
- Si $4/5 \leq \alpha \leq 1$, existe un solo mínimo local con $\beta = 0$.

En el segundo de los casos, los solapes, como puede apreciarse en la figura 4, son bastante buenos. Eso se debe a que el mínimo local con menor ordenada es único, de manera que sólo podemos construir una función de onda variacional dada por (12), siendo el valor de β igual a 0.

No ocurre lo mismo, sin embargo, con el primero de ellos: en ese caso, siempre hay dos mínimos locales que tienen la misma ordenada. ¿Cuál de sus abscisas será la que debemos introducir en (12)? No hay que elegir una y descartar la otra, sino que lo lógico sería pensar que el estado del sistema será una superposición de los respectivos a $\beta > 0$ y $\beta < 0$, que son (ya normalizados):

$$|\psi_{\beta>0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!(1+\beta^2)^N}} (s^+ + |\beta|t^+)^N |0\rangle \quad (18)$$

$$|\psi_{\beta<0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!(1+\beta^2)^N}} (s^+ - |\beta|t^+)^N |0\rangle \quad (19)$$

donde hemos designado por $|\beta|$ al valor absoluto de la abscisa para la cual se da cualquiera de los mínimos. Definiendo un estado variacional $|\psi_\beta\rangle \equiv |\psi_{var}\rangle$ por (12), conviene percatarse de lo siguiente:

$$|\langle\psi_{\beta_1}|\psi_{\beta_2}\rangle|^2 = \left[1 - \frac{(\beta_1 - \beta_2)^2}{(1 + \beta_1^2)(1 + \beta_2^2)}\right]^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \delta_{\beta_1, \beta_2} \quad (20)$$

Es decir, los estados $|\psi_{\beta>0}\rangle$ y $|\psi_{\beta<0}\rangle$ son ortogonales en el límite termodinámico.

Para el estado fundamental podemos transcribir lo anterior del siguiente modo:

$$|\psi_{exac}\rangle = c_1|\psi_{\beta>0}\rangle + c_2|\psi_{\beta<0}\rangle \quad (21)$$

¿Cómo son los coeficientes c_1 y c_2 ? Atendiendo a la simetría del problema ($E_{var}(\beta) = E_{var}(-\beta)$), podría parecer que $|c_1|^2 = |c_2|^2$, pero no es así. Hay que atender para comprenderlo a un resultado fruto del cálculo exacto, y es que en el caso $\omega = 0$, como se comentó en la sección 2.1, existe una degeneración doble de los niveles que tienen $E < 0$. Es por ello por lo que el estado del sistema respectivo a una energía (como puede ser la del fundamental) no está unívocamente determinado, sino que podemos hacer una elección u otra del mismo siempre que nos encontremos dentro del subespacio respectivo a ese autovalor. Matlab aplica el algoritmo de Gram-Schmidt obteniendo para el estado fundamental dos autovectores ortonormales de la energía, que designaremos por $|\psi_{exac,1}\rangle$ y $|\psi_{exac,2}\rangle$. Podemos expresarlos, según (21), del siguiente modo:

$$|\psi_{exac,j}\rangle = c_{1,j}|\psi_{\beta>0}\rangle + c_{2,j}|\psi_{\beta<0}\rangle \quad \text{con } j = \{1, 2\} \quad (22)$$

Dada la indeterminación comentada previamente de $|\psi_{exac,1}\rangle$ y $|\psi_{exac,2}\rangle$, no podemos asegurar que $|c_{i,j}|^2 = 1/2$ para $\{i, j\} = \{1, 2\}$. Sin embargo, sí será cierto lo siguiente, dada la ortonormalidad de $|\psi_{exac,1}\rangle$ y $|\psi_{exac,2}\rangle$, por una parte, y de $|\psi_{\beta>0}\rangle$ y $|\psi_{\beta<0}\rangle$ (según (20)), por otra:

$$|c_{1,j}|^2 + |c_{2,j}|^2 = 1 \quad \text{con } j = \{1, 2\} \quad (23)$$

de manera que:

$$|c_{i,j}|^2 \leq 1 \quad \text{para } \{i, j\} = \{1, 2\} \quad (24)$$

Hecho este comentario, pasemos a analizar directamente la gráfica del solape que aparece en la figura 4. A la hora de hacer los cálculos, hemos tomado como $|\psi_{exac}\rangle$ uno de los dos autovectores respectivos a la energía fundamental que proporcionaba Matlab, es decir, $|\psi_{exac,1}\rangle$; como $|\psi_{var}\rangle$, por el contrario, hemos tomado por defecto (18). Tendremos, pues, aplicando (22) y (24), lo siguiente:

$$S \equiv |\langle\psi_{exac}|\psi_{var}\rangle|^2 = |\langle\psi_{exac,1}|\psi_{\beta>0}\rangle|^2 = |c_{1,1}|^2 \leq 1 \quad (25)$$

En definitiva, hemos sido capaces de predecir que **en el caso** $\omega = 0$, en el que la conveniencia de la aplicación del método variacional parecía dudosa, **el solape S determinado por nuestros cálculos no tiene por qué aproximarse a 1**, como puede verse en (25). Es más, sabemos que para el estado fundamental, debido a su degeneración, no existe una función de onda única, sino que es válida toda aquella dada por una combinación lineal de cualquiera de las bases de su subespacio degenerado, como pueden ser $|\psi_{exac,1}\rangle$ y $|\psi_{exac,2}\rangle$ o $|\psi_{\beta>0}\rangle$ y $|\psi_{\beta<0}\rangle$. Queda, pues, completamente justificado el empleo del método variacional en estas circunstancias, con el conocimiento de que con él obtendremos un buen valor de energía pero seremos incapaces (al igual que ocurre con el método exacto) de calcular una única función de onda para el estado fundamental.

Tener en cuenta consideraciones parecidas a las precedentes puede ayudarnos a explicar también el descenso que sufre el solape (figura 4) en la zona cercana a $\alpha = 0.8$. Para ello, hay que recurrir al gráfico que aparece en la figura 9 etiquetada como “**frontera C-D**”. De nuevo, apreciamos cómo hay dos mínimos locales que tienen la misma ordenada, y por lo tanto sería razonable afirmar que el estado fundamental (en este caso sin degenerar) será combinación lineal de los respectivos a cada uno de los mínimos; análogamente a (21):

$$|\psi_{exac}\rangle = c_1|\psi_{\beta=0}\rangle + c_2|\psi_{\beta\neq 0}\rangle \quad (26)$$

Como en esta ocasión no está presente la simetría de la que hablábamos ($E_{var}(\beta) = E_{var}(-\beta)$) cuando estudiábamos el caso $\omega = 0$, esperamos que en principio no se cumpla $|c_1|^2 = |c_2|^2$. Como antes, queda garantizado $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ en virtud de $|\langle\psi_{exac}|\psi_{exac}\rangle|^2 = 1$ y de (20), y por lo tanto $|c_j|^2 \leq 1$ para $j = \{1, 2\}$. En la figura 4 se ha tomado como $|\psi_{var}\rangle$, para $\omega = 0.5$ y $\alpha \simeq 0.8$, la función de onda respectiva al mínimo que se da para $\beta \neq 0$, que resulta ser la que tiene mayor solape con la exacta. **Se verifica de nuevo que el solape se aleja de 1:**

$$S \equiv |\langle\psi_{exac}|\psi_{var}\rangle|^2 = |\langle\psi_{exac}|\psi_{\beta\neq 0}\rangle|^2 = |c_2|^2 \leq 1 \quad (27)$$

El cálculo de la energía del estado fundamental será, sin embargo, completamente correcto, pese a sufrir con el método variacional de cierto desconocimiento sobre la función de onda correspondiente al menor autovalor de E .

Hemos conseguido, por lo tanto, explicar cualitativamente las gráficas que aparecen en la figura 4 y legitimar absolutamente el empleo del método variacional con nuestra función de onda de prueba como medio de calcular la energía del estado fundamental (resultado que aparece reflejado en la figura 3).

2.6. Fases del sistema en el estado fundamental

Hemos visto en la sección 2.3 (en concreto, en la figura 4) que para el caso $\omega \neq 0$ el solape entre la función de onda exacta y la variacional dada por (12) es muy cercano a 1. Por lo tanto, en adelante y para ese caso podremos tomar como función de onda del estado fundamental la que hallábamos con el método variacional.

Hay dos situaciones en las que la función de onda describe dos estados del sistema completamente diferentes. Una de ellas corresponde a $\beta \neq 0$, en la que, como mencionábamos previamente, hay una superposición de los estados s y t . La otra se da para $\beta = 0$, y corresponde a $|N0\rangle$ (como puede deducirse de (12)), de manera que no encontramos partículas en el nivel t . Nos hallamos, pues, ante dos fases diferentes del sistema para el estado fundamental.

La cuestión que inmediatamente se nos plantea es cómo saber en qué fase se encuentra el estado fundamental dado el valor del par (α, ω) . Simplemente hay que tener en cuenta dos

observaciones. Primera, que el valor de β será igual a la abscisa del mínimo local con menor ordenada de $E_{var}(\beta)$, como se dijo en la discusión previa a (14). Y segunda, que sabemos, en virtud del estudio llevado a cabo en la sección 2.4, cuándo dicho valor de β será igual a 0 y cuándo no. Simplemente observando las gráficas presentadas en ese apartado, podemos construir completamente el diagrama de fases para el estado fundamental de nuestro sistema, que se presenta en la figura 10.

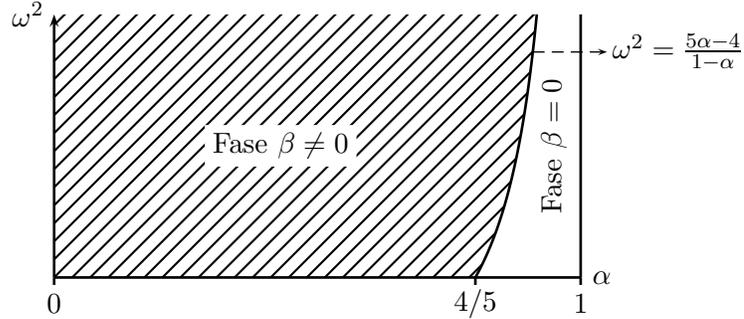


Figura 10: Diagrama de fases para el estado fundamental. Nota: la región dada por $4/5 \leq \alpha \leq 1$, $\omega = 0$ y también la dada por $\alpha = 1 \forall \omega$ están incluidas dentro de la fase $\beta = 0$, como puede verse en la sección 2.4. Las dadas por $0 < \alpha < 4/5$, $\omega = 0$, por $\alpha = 0 \forall \omega$ y por $\omega^2 = \frac{5\alpha-4}{1-\alpha}$, $\alpha \in (4/5, 1)$ pertenecen, por el contrario, a la fase $\beta \neq 0$ (ídem).

2.7. Parámetros de orden y regiones del espectro

Una vez que conocemos qué fases puede tomar el estado fundamental, podemos encontrar parámetros de orden que nos permitan determinar en cuál de ellas estamos; es decir, magnitudes físicas, que podríamos medir en el laboratorio, cuyos valores medios manifiesten las diferencias entre dichas fases.

Hay múltiples candidatos que pueden realizar esta función. Dos de los más evidentes son $\langle n_t \rangle$ y $\langle n_s \rangle$, es decir, el número medio de bosones en el nivel t y en el s , respectivamente. Es obvio que en la fase $\beta \neq 0$ tendremos $\langle n_t \rangle \neq 0$ y $\langle n_s \rangle \neq N$. Por el contrario, en la fase $\beta = 0$ se cumplirá $\langle n_t \rangle = 0$ y $\langle n_s \rangle = N$. Podemos verlo al calcular explícitamente esos valores medios (a los que designaremos por $\langle \cdot \rangle_{var}$) empleando para ello la función de onda variacional, $|\psi_{var}\rangle$, dada por (12):

$$\langle n_t \rangle_{var} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} N \quad (28)$$

$$\langle n_s \rangle_{var} = \frac{1}{1 + \beta^2} N \quad (29)$$

Los valores medios de los parámetros descritos previamente se caracterizan porque son claramente diferentes en los casos $\beta = 0$ y $\beta \neq 0$, es decir, en las distintas fases. Con este criterio,

podemos encontrar otros, como los que listamos a continuación:

$$\langle n_t^2 \rangle_{var} = \frac{(1 + N\beta^2)\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} N \quad (30)$$

$$\langle n_s^2 \rangle_{var} = \frac{N + \beta^2}{(1 + \beta^2)^2} N \quad (31)$$

$$\langle n_t n_s \rangle_{var} = \frac{\beta^2}{(1 + \beta^2)^2} N(N - 1) \quad (32)$$

$$\langle s^\dagger t + t^\dagger s \rangle_{var} = \frac{2\beta}{1 + \beta^2} N \quad (33)$$

El interés físico de los parámetros de orden no sólo radica en la determinación de la fase en que se encuentra el estado fundamental. Éstos pueden también darnos idea de cómo son los estados excitados, y es de esperar que en las diferentes regiones de los espectros que aparecen en la figura 1 manifiesten un comportamiento dispar. Para calcularlos para todos los niveles tendremos que emplear, obviamente, la función de onda exacta $|\psi_{exact}\rangle$, ya que la variacional sólo nos sirve para estudiar el fundamental. Como se dijo previamente, dicha función de onda se calcula diagonalizando directamente el hamiltoniano con un programa en Matlab. Designaremos los resultados fruto de esos cálculos por $\langle \rangle \equiv \langle \rangle_{exact}$. Las representaciones de algunos de ellos aparecen en las figuras 11, 12, 13 y 14 para el caso $\omega \neq 0$.

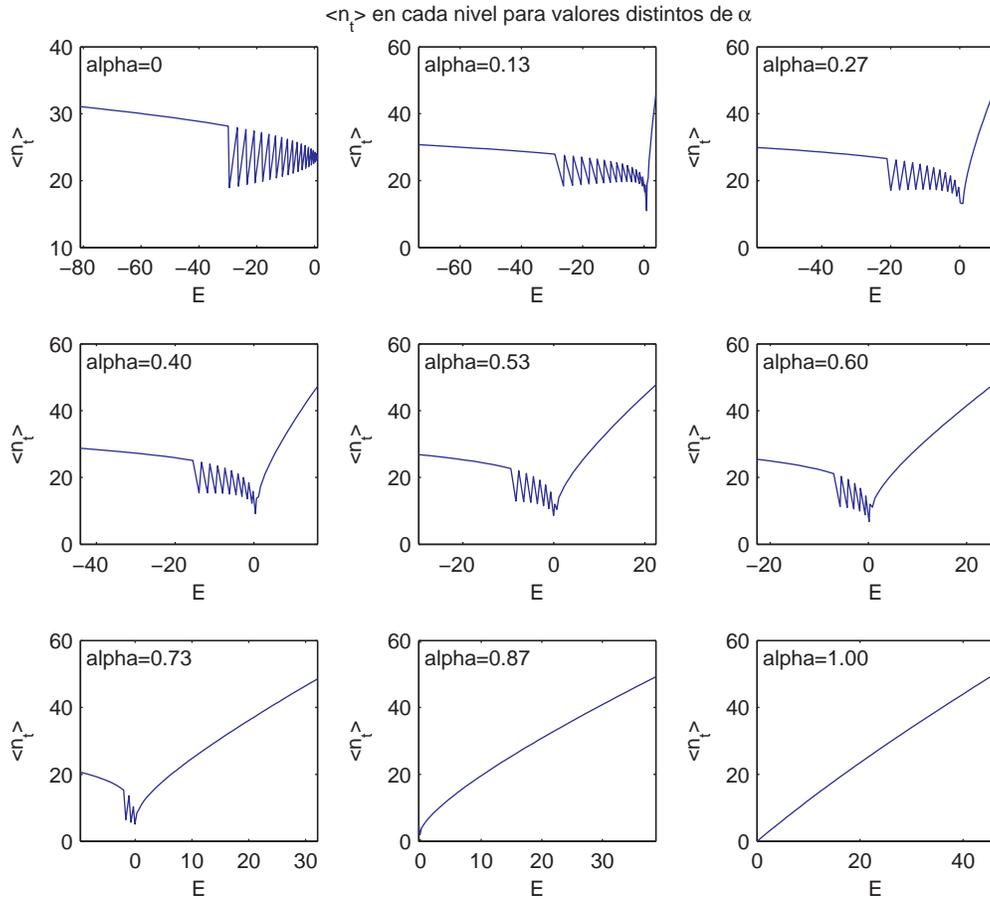


Figura 11: Representación del parámetro de orden $\langle n_t \rangle_{exact}$ para todos los autoestados de la energía para $\omega = 0.5$, $N = 50$ y distintos valores de α .

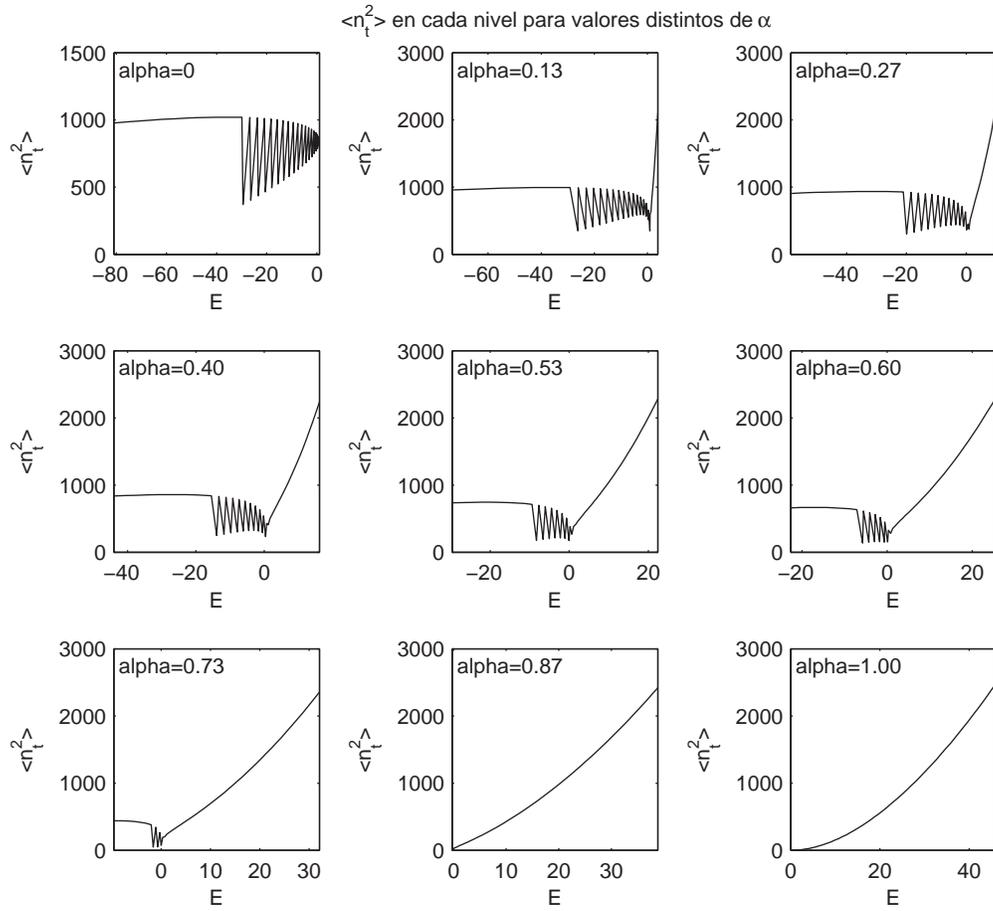


Figura 12: Representación del parámetro de orden $\langle n_t^2 \rangle_{exact}$ para todos los autoestados de la energía para $\omega = 0.5$, $N = 50$ y distintos valores de α .

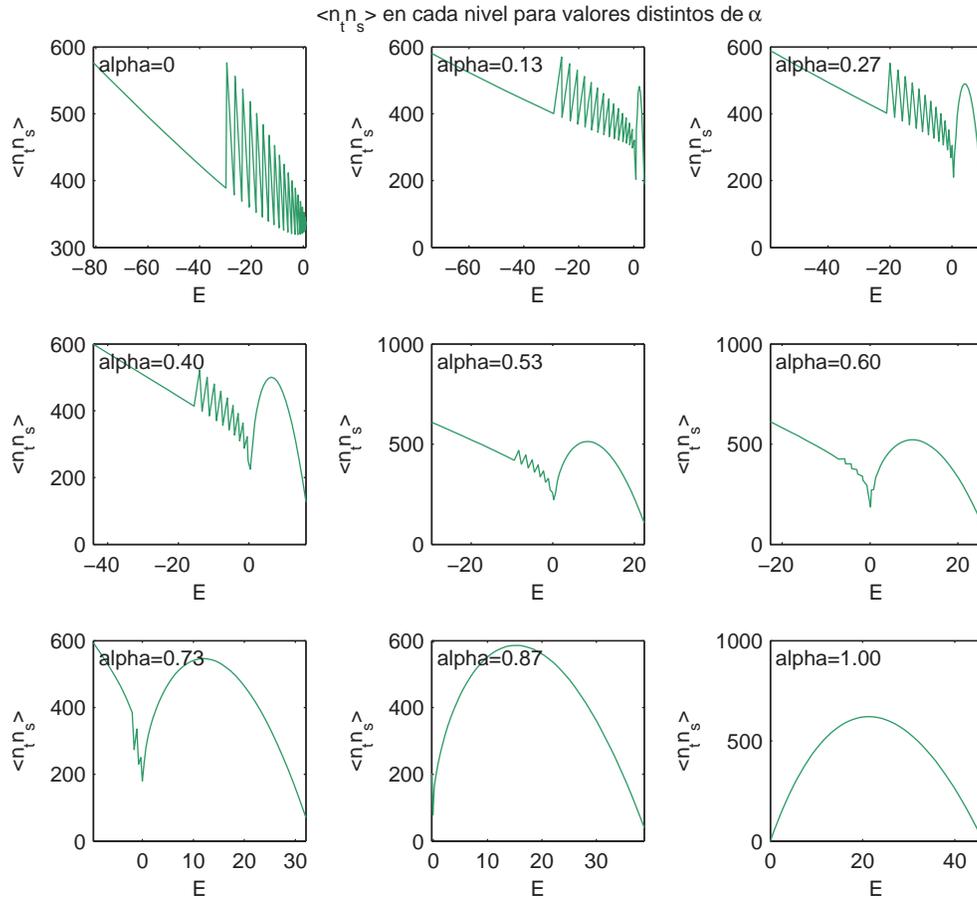


Figura 13: Representación del parámetro de orden $\langle n_t n_s \rangle_{exac}$ para todos los autoestados de la energía para $\omega = 0.5$, $N = 50$ y distintos valores de α .

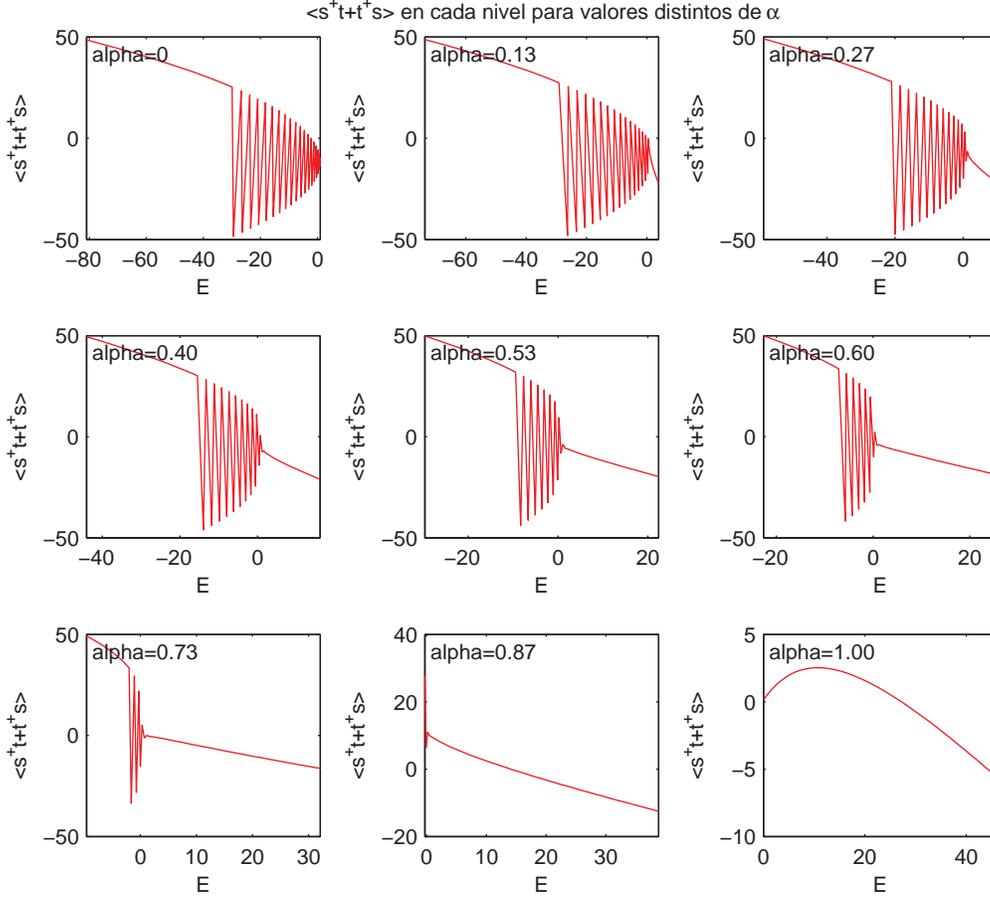


Figura 14: Representación del parámetro de orden $\langle s^\dagger t^\dagger t s \rangle_{exact}$ para todos los autoestados de la energía para $\omega = 0.5$, $N = 50$ y distintos valores de α .

Observamos que, dependiendo del valor de α y el rango de E que consideremos, las gráficas presentan un comportamiento u otro. Lo que debemos hacer es relacionar esto con las diferentes regiones del espectro que se comentaron en la sección 2.1. Es inmediato asociar a la zona con $E < 0$ y sin cruce de niveles un comportamiento suave de los parámetros de orden; a la de $E < 0$ con cortes entre ellos, un aspecto de rápidas oscilaciones con la energía; y a la de $E > 0$, de nuevo, un comportamiento suave pero diferente al de la comentada en primer lugar. Lo anterior revela, pues, que no sólo encontramos diferencias en la apariencia del espectro en las distintas regiones de la figura 1, sino que éstas también presentan notables disparidades en cuanto a los valores de magnitudes con un profundo significado físico, como son los parámetros de orden.

Hemos analizado en este apartado el caso $\omega \neq 0$, y, como veremos en las figuras 15 y 16, ocurre lo mismo si $\omega = 0$. Es decir, en regiones del espectro con aspecto diferente (que ahora serán dos), encontramos disimilitudes en el comportamiento de los parámetros de orden. Como no hay cruces de niveles en el espectro bajo estudio ahora, apreciamos unas gráficas suaves de los parámetros de orden frente a la energía, con un pico que tiene lugar en la transición de una zona a otra.

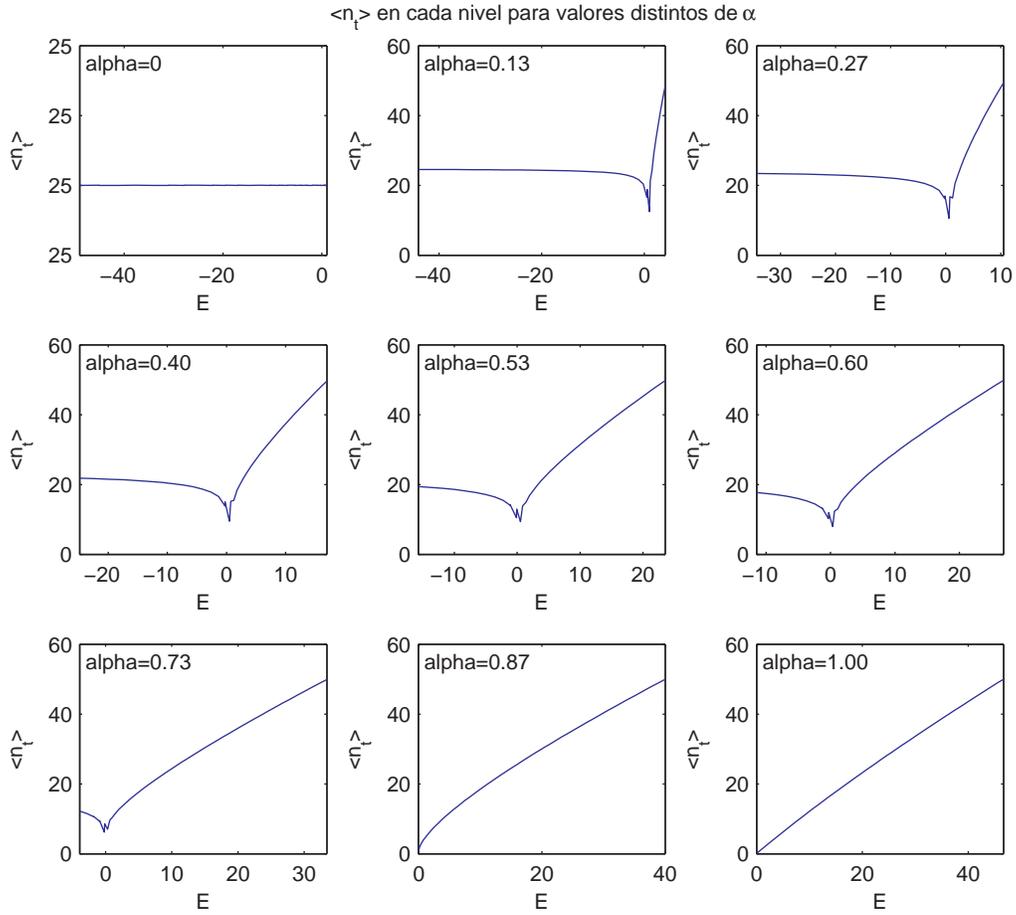


Figura 15: Representación del parámetro de orden $\langle n_t \rangle_{exact}$ para todos los autoestados de la energía para $\omega = 0$, $N = 50$ y distintos valores de α .

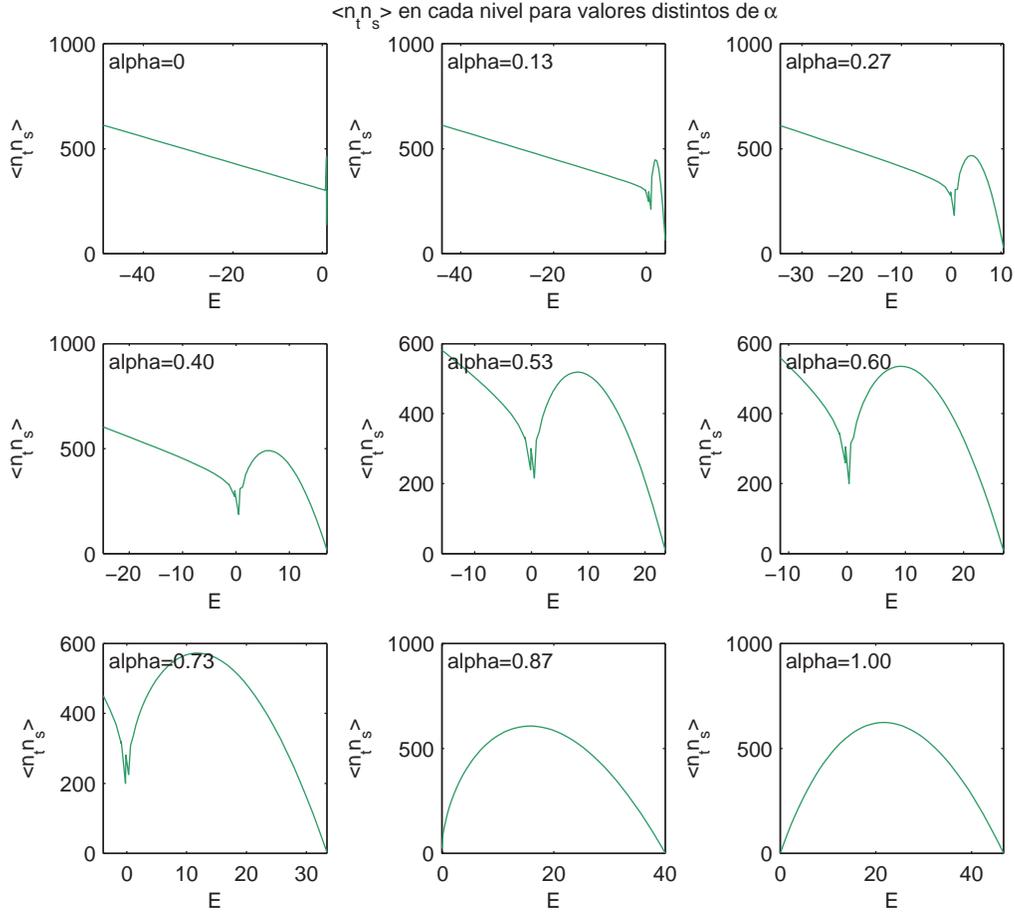


Figura 16: Representación del parámetro de orden $\langle n_t n_s \rangle_{exact}$ para todos los autoestados de la energía para $\omega = 0$, $N = 50$ y distintos valores de α .

2.8. Estudio de los estados excitados

Hemos caracterizado completamente en las secciones anteriores el estado fundamental, que es para lo que sirve, en principio, el método variacional. Conocemos cuál es su energía y cómo es su función de onda para todos los valores posibles de los parámetros.

Para hacerlo, hemos estudiado la forma de la energía variacional. Cabe destacar que, en el caso $\omega \neq 0$, en las regiones A, B, C y E de la figura 5, $E_{var}(\beta)$ tiene dos mínimos locales con ordenada diferente. Sería lógico pensar que quizás podría extraerse información sobre los estados excitados a partir del que tiene la mayor ordenada, ya que el otro se ha empleado para inquirir sobre el estado fundamental. No sería así para $\omega = 0$ o la frontera C-D, ya que los dos mínimos tienen la misma energía y, como se comentó en la sección 2.5, de ambos se extrae información sobre el estado fundamental.

Particularizando, pues, para $\omega \neq 0$, el estado respectivo al valor de β (que designaremos por β') para el que se da el mínimo local con mayor energía será:

$$|\psi'_{var}\rangle = (s^\dagger + \beta' t^\dagger)^N |0\rangle \quad (34)$$

Veamos cuál es su energía, dibujándola dentro del espectro que aparece en la figura 1, en la figura 17.

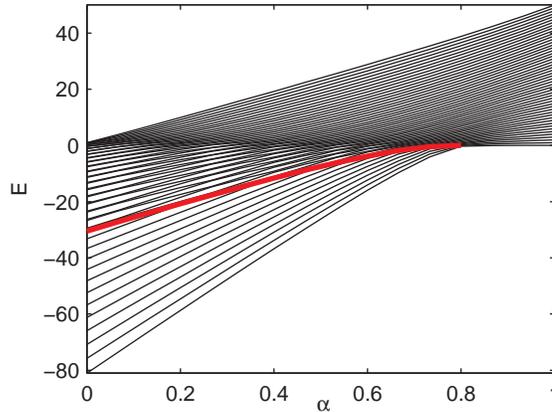


Figura 17: Espectro de energías para $\omega = 0.5$ y $N = 50$ donde incluimos, destacada en rojo, la energía del estado variacional definido en (34). Sólo se ha trazado la curva para $\omega^2 > \frac{5\alpha-4}{1-\alpha}$, ya que en caso contrario no hay dos mínimos locales con diferente ordenada, y no podemos definir $|\psi'_{var}\rangle$ por dicha fórmula.

Por lo que parece, la energía de ese estado separa dos regiones del espectro de las que hablábamos en la sección 2.1, que son, para $E < 0$, aquella en la que no se producen cruces de niveles y aquella en la que están más juntos y se cortan. En consecuencia, el segundo mínimo local que posee $E_{var}(\beta)$ (es decir, el de mayor ordenada) cobra ahora un sentido físico íntimamente relacionado con las diferentes zonas del espectro, y, en consecuencia, con una conducta dispar de los parámetros de orden en función de la energía, como se vio en la sección 2.7.

Es importante destacar, sin embargo, que la función de onda definida por (34) no es la respectiva a un nivel excitado, puesto que, como puede verse en la figura 17, la línea roja no se superpone a ninguna de las que había previamente en el espectro, sino que se cruza con ellas. Es decir, con el método variacional (considerando también mínimos de la energía variacional con mayor ordenada) sólo podemos obtener la función de onda del estado fundamental, pero no de ninguno de los excitados.

Es interesante representar los niveles de energía para cierto valor de α , ω y N superpuestos a la curva de energía variacional correspondiente. Eso es lo que hacemos en la figura 18. En ella, observamos cómo tenemos dos pozos simétricos para el caso $\omega = 0$, en tanto que son asimétricos y con diferentes alturas los respectivos a $\omega \neq 0$. Esta disimilitud entre ambas gráficas parece acarrear consecuencias importantes, que analizaremos a continuación.

Conviene, en primer lugar, tener en cuenta si hay degeneración en los niveles. No es así en el caso $\omega \neq 0$: cada nivel corresponde a un solo estado. Sin embargo, cuando $\omega = 0$ los niveles con $E < 0$, es decir, los que están *dentro de los dos pozos simétricos*, son doblemente degenerados, en tanto que no ocurre lo mismo con el resto. Es importante percatarse de esto para cerciorarnos de que en ambos casos el número de autoestados de la energía que hemos calculado es igual a $N + 1$ (que es la dimensión del hamiltoniano).

Analicemos también la estructura de los niveles. Cuando $\omega \neq 0$ y la energía es lo suficientemente pequeña como para que nos encontremos dentro de uno solo de los pozos (como es el caso de los primeros niveles), el espectro está formado por un conjunto de energías prácticamente equidistantes, que nos recuerda al de un oscilador armónico.

¿Qué ocurre cuando, por el contrario, nos situamos en una zona en la que encontramos un doble pozo? Conviene primero atender al caso $\omega = 0$, en el que contamos con la simetría $E_{var}(\beta) = E_{var}(-\beta)$ descrita con anterioridad. El espectro es de nuevo muy similar al de un

oscilador armónico, pero los niveles están doblemente degenerados. Si, por el contrario, nos situamos en la zona de doble pozo respectiva a $\omega \neq 0$, esa degeneración se rompe y los niveles, manteniendo la estructura de la equidistancia que hemos comentado, se separan ligeramente, de modo que observamos un espectro análogo al anterior pero con un pequeño desdoblamiento.

Cuando $E > 0$, situándonos por encima de los pozos en ambos casos, los espectros son muy similares. Los niveles están más próximos entre sí para valores más pequeños de energía y posteriormente van separándose, sin seguir en principio ningún patrón relativo a algún sistema físico de interés, como el del oscilador armónico que comentábamos con anterioridad.

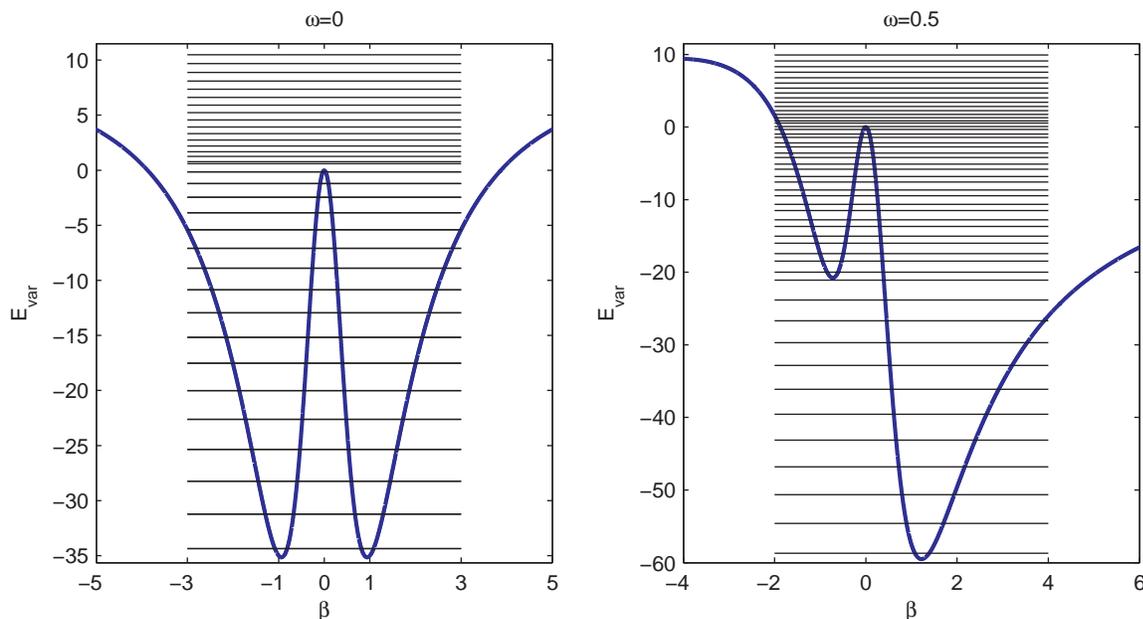


Figura 18: Izquierda: curva de $E_{var}(\beta)$ y espectro para $\alpha = 0.2$, $\omega = 0$ y $N = 50$. Derecha: ídem pero con $\omega = 0.5$.

Convenría hacer memoria ahora sobre lo comentado acerca de las gráficas de los parámetros de orden en la sección 2.7. Para el caso $\omega = 0$, como decíamos, observamos que las figuras tienen dos partes suaves, siendo la de menores energías la respectiva a la zona del doble pozo de la figura 18 y la de mayores la correspondiente a la región sobre ellos. Para $\omega \neq 0$, sin embargo, apreciamos en las gráficas una parte suave asociada a energías bajas (zona de un solo pozo), otra con fuertes oscilaciones (región de dos pozos asimétricos) y otra suave, para las energías mayores, en la que nos encontramos sobre ambos pozos. Si centramos nuestra atención sobre las energías intermedias, situándonos en los dos pozos, podemos encontrar cierto sentido a las oscilaciones mencionadas. De entre cualquier par de niveles desdoblados de esa región, el inferior da un valor de cualquier parámetro de orden muy diferente al superior. Si de las representaciones sólo tomásemos los niveles desdoblados de mayor energía, observaríamos que la curva obtenida sería suave; ocurriría lo mismo tomando sólo los menos energéticos. Y una de estas últimas curvas, resultado de obviar uno de los miembros (que tiene más o menos energía que el otro) de todas las parejas desdobladas, presentaría **continuidad con la curva suave** respectiva a las menores energías (es decir, a un solo pozo) del espectro, descrita con anterioridad. Así puede comprobarse en la figura 19, donde representamos esta situación. Podríamos **asociar**, pues, esa selección de niveles desdoblados **al más profundo de los pozos**. El resto lo asignaríamos al de menos profundidad.

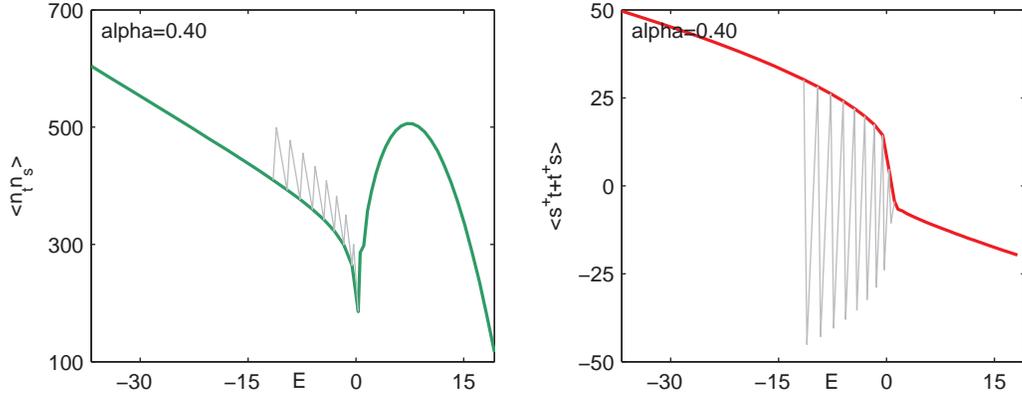


Figura 19: Parámetros de orden $\langle n_t n_s \rangle$ y $\langle s^\dagger t + t^\dagger s \rangle$ para $\alpha = 0.40$, $\omega = 0.5$ y $N = 50$ (gráficas extraídas directamente de las figuras 13 y 14). En la región correspondiente a los dos pozos, sólo consideramos un nivel de cada pareja desdoblada (el de mayor o menor energía que el otro para todos los casos). El resultado es la curva a color, en tanto que la curva gris contiene el resto de valores, que han sido ignorados.

La discusión anterior nos lleva irremisiblemente a pensar en la identificación de cada uno de los estados con un pozo u otro. Si los pozos son simétricos ($\omega = 0$), es razonable pensar desde esta perspectiva que habrá una degeneración doble para estados con energías que caigan dentro de ellos, en tanto que si son asimétricos ($\omega \neq 0$) no es sorprendente que haya una pequeña diferencia en las energías de los estados asociados a cada uno.

Si extrapolamos estas consideraciones a la región D, que presenta un solo pozo, vemos que siguen siendo correctas. Lo que nuestros razonamientos predirían sería que el espectro en este caso debería estar constituido por un conjunto de niveles equidistantes y no degenerados, tanto más similar al de un oscilador cuanto más simétrico fuese nuestro pozo. Puede comprobarse la veracidad de todo esto en la figura 20.

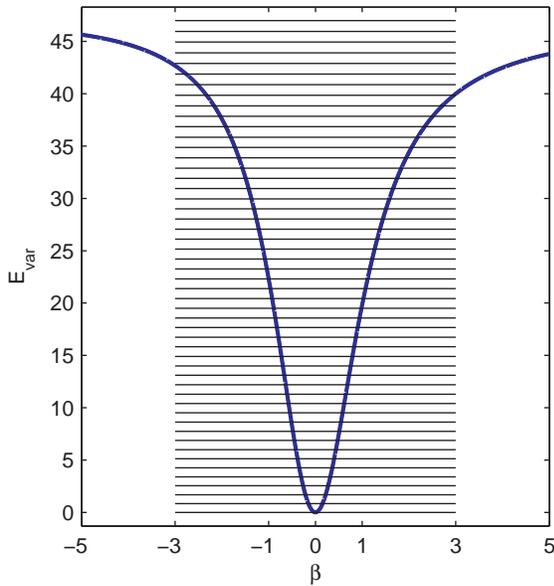


Figura 20: $E_{var}(\beta)$ y espectro para la región D (véase figura 5) en la que hay un solo pozo. Éste es ahora muy parecido al de un oscilador armónico debido a la simetría casi completa del mismo. Los niveles no están degenerados.

Esta sección nos permite llegar a una conclusión: la forma de la energía variacional parece

transcender la mera aplicación del cálculo de la energía del estado fundamental y de la función de onda correspondiente. Nos proporciona información sobre múltiples aspectos de los estados excitados, como pueden ser la degeneración de niveles, el comportamiento de varios parámetros de orden o la estructura de los espectros, cuyas características únicamente podían manifestarse previamente al estudio que hemos llevado a cabo mediante los resultados que arrojaba el cálculo numérico en casos particulares. Tras este análisis, contamos con un mejor conocimiento del sistema, que se ampara en nuestra capacidad de predecir cualitativamente numerosas de sus propiedades, al margen de la trabajosa resolución exacta, cuyo tiempo de cálculo aumenta ostensiblemente conforme N se hace mayor.

2.9. Fases del sistema para los estados excitados

Ya hemos caracterizado fases diferentes para el estado fundamental, y además hemos visto que hay regiones del espectro (que abarcan los niveles excitados) que presentan comportamientos muy diferentes cuando calculamos el valor de ciertas magnitudes con un significado físico relevante, así como también se caracterizan por hacer patentes diferencias muy claras en la estructura de niveles, como se vio en el apartado 2.8.

Comprobaremos en esta sección que esas regiones son, como podría haberse intuido, fases diferentes. Atendamos para ello a la definición que proporcionamos previamente, según la cual una transición de fase se veía manifestada por un comportamiento no analítico de ciertas magnitudes.

Cualitativamente, si tenemos en cuenta el aspecto de los espectros presentes en la figura 1, apreciamos que, para valores de α y ω dados, el número de partículas N sería una magnitud cuya primera derivada con respecto a la energía mostraría posiblemente discontinuidades. Es decir, un comportamiento no analítico. La magnitud que vamos a representar y analizaremos será, por lo tanto, la densidad de niveles ρ , que se define del siguiente modo:

$$\rho = \frac{dN}{dE} \quad (35)$$

Dos gráficas que confirman lo anterior se presentan en la figura 21. En ellas, se ve que para $\omega = 0$ hay sólo un salto infinito, en tanto que hay uno finito y otro infinito para $\omega \neq 0$. Tenemos, en consecuencia, una transición de fase λ para $E = 0$ y una transición de primer orden para una energía $E < 0$ si $\omega \neq 0$. El hecho de que las transiciones queden reflejadas tan ostensiblemente nos permite diferenciar sin lugar a dudas tres fases diferentes, que son las respectivas a las regiones del espectro de las que hablábamos previamente, tan claramente identificables cualitativamente en la figura 1, y en las que los parámetros de orden presentaban un comportamiento tan diferente, como se estudió en la sección 2.7. **Las regiones A, B y C de la figura 2 son, pues, fases excitadas.**

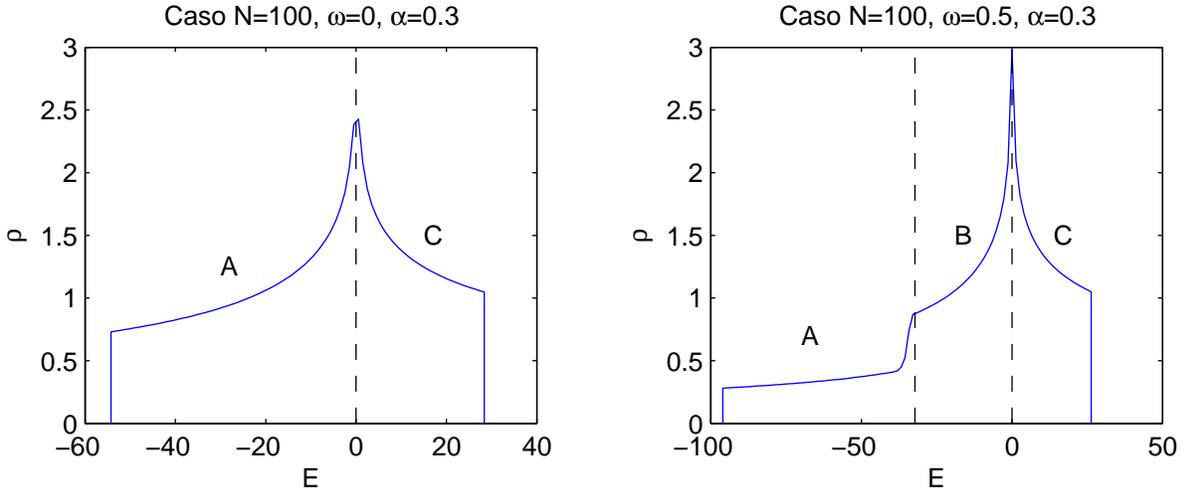


Figura 21: Densidad de niveles para los casos $\omega = 0$ y $\omega \neq 0$ para $\alpha = 0.3$. Se han marcado con líneas discontinuas las energías $E = 0$ y la de la frontera entre las regiones A y B, habiéndose calculado esta última como se explicó al introducir (34) y la figura 17. Las letras A, B y C hacen referencia a las regiones de la figura 2.

Las gráficas presentadas en la figura 21 ilustran los saltos en la densidad de niveles ρ para un caso muy concreto del espectro, que es $\alpha = 0.3$. Podemos corroborar que ocurre lo mismo en cualquier otro punto del mismo, atendiendo a la figura 22.

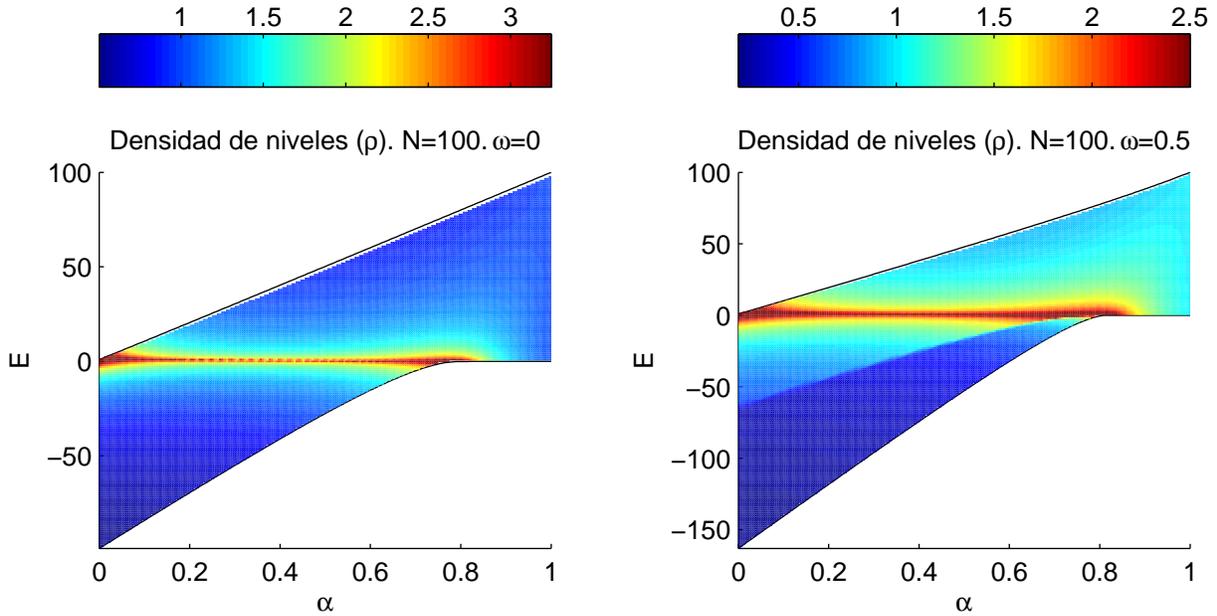


Figura 22: Densidad de niveles representada en una escala de colores para los casos $\omega = 0$ y $\omega \neq 0$ para todo el espectro. Se ve claramente dónde se produce el salto finito para $E < 0$ y el salto infinito para $E = 0$. Las regiones A, B y C de la figura 2 quedan evidenciadas en las dos gráficas.

Al término de esta sección, debemos tener en mente que las fases tanto del fundamental

como de todos los excitados de nuestro sistema han quedado completamente delimitadas en el espectro. La caracterización de nuestro sistema en este sentido ha sido completa, y ahora es momento de hacer algunas indagaciones sobre cómo influyen la naturaleza y las propiedades del sistema en su evolución temporal, y en la aplicación, sólo justificada para ciertos estados iniciales respectivos a algunas de las fases (como se verá posteriormente), de la Física Estadística para describir correctamente los estados de equilibrio de nuestro sistema.

3. Evolución temporal y termalización

El estudio que hemos llevado a cabo hasta ahora caracteriza nuestro sistema en un instante concreto, pero cabe preguntarse cómo evoluciona temporalmente. Esto, a su vez, sería relevante a la hora de determinar tanto si el valor de las magnitudes de interés físico relajan a uno de equilibrio cuando ha transcurrido un tiempo suficientemente largo como si, en tal caso, hay correspondencia entre las predicciones que arroja la Física Estadística y las que proporciona la resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Esta cuestión es de suma importancia desde el momento en el que se comienzan a plantear las bases de la Física Estadística. Todas las conclusiones que se desprendan en el seno de este ámbito sólo tendrán sentido si se alcanza el equilibrio, es decir, si hay una relajación de ciertas magnitudes físicas a valores estacionarios. En lo concerniente a la Física Clásica, el problema desemboca en el enunciado de la hipótesis ergódica (que afirma que el promedio temporal de una magnitud es igual al llevado a cabo sobre la región del espacio de las fases determinada por la colectividad bajo empleo), aplicable cuando la no linealidad de las ecuaciones de evolución temporal da lugar al caos, garantizándose la llegada a un estado de equilibrio y su independencia con respecto a las condiciones iniciales. Por el contrario, la Física Cuántica no permite hacer un análisis análogo de este tema, ya que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es lineal. El hecho de que se produzca relajación y no haya memoria del estado inicial entonces está por dilucidar, y es la cuestión que abordaremos a continuación en el caso particular del sistema que nos atañe.

3.1. Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Sea T el operador de evolución temporal que cumple $|\psi(t)\rangle = T|\psi(t_0)\rangle$, donde t_0 es el instante inicial y t un tiempo posterior. La ecuación de Schrödinger para T es la siguiente:

$$HT = i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} \quad (36)$$

Y, puesto que $H \neq H(t)$, podemos integrarla de la manera siguiente:

$$T = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0) \right] \quad (37)$$

Con esto, conociendo la representación de un estado cualquiera en la base de energías ($|E_n\rangle$) en el instante inicial (que designaremos por un conjunto de valores a_n), es muy sencillo determinar cómo evolucionará éste en el tiempo, como se ve a continuación:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n a_n |E_n\rangle \implies |\psi(t)\rangle = \sum_n a_n \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0) \right] |E_n\rangle \quad (38)$$

3.2. Elección de $|\psi(t_0)\rangle$

Tenemos que precisar un estado inicial concreto para determinar cómo evoluciona temporalmente, y con ello poder predecir cómo se comportarán los parámetros de orden que nos resulten de interés.

Es lógico, en vistas al estudio llevado a cabo previamente que caracterizaba regiones (o fases, según vimos en la sección 2.9) diferentes del espectro (reflejadas en la figura 2), que sería provechoso poder tomar $|\psi(t_0)\rangle$ de tal manera que nos situásemos en cualquier zona que quisiésemos del mismo. Por supuesto, queda descartado el tomar un autovector de la energía, ya que sólo evolucionaría modificándose su fase y no podríamos abordar las cuestiones que nos proponemos. En otras palabras, en ese caso el sistema estaría relajado a un estado estacionario desde el instante inicial, lo que no entra dentro de nuestros intereses.

Una buena propuesta para $|\psi(t_0)\rangle$ sería una función de onda (ya normalizada) análoga a la variacional que tomábamos en (12):

$$|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi(\beta(E))\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!(1 + \beta(E)^2)^N}} \left(s^\dagger + \beta(E)t^\dagger \right)^N |0\rangle \quad (39)$$

donde la relación $\beta(E)$ viene dada implícitamente por (16), y depende de α , ω y N . Fijados, pues, estos parámetros, encontramos el valor de β que nos sitúa unívocamente en un punto del espectro, en la región que deseemos. Esto facilita mucho la tarea que nos proponemos, consistente en analizar la evolución temporal de todas las zonas del espectro.

Podemos expresar (39) de otra manera, desarrollando el binomio de Newton que aparece en ella. Tendremos:

$$|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi(\beta(E))\rangle = \frac{1}{\sqrt{(1 + \beta(E)^2)^N}} \sum_{j=0}^N \sqrt{\frac{N!}{j!(N-j)!}} \beta(E)^j |Nj\rangle \quad (40)$$

Pero lo que nos interesa es tener $|\psi(t_0)\rangle$ expresado en la base de energías, para poder aplicar entonces (38). Siendo M la matriz de cambio de base (calculada diagonalizando el hamiltoniano), que cumple

$$|Nj\rangle = \sum_{n=1}^{N+1} M_{j+1 n} |E_n\rangle \quad j = \{0, 1, \dots, N\}, \quad (41)$$

podemos escribir:

$$|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi(\beta(E))\rangle = \sum_n \left[\frac{1}{\sqrt{(1 + \beta(E)^2)^N}} \sum_{j=0}^N \sqrt{\frac{N!}{j!(N-j)!}} \beta(E)^j M_{j+1 n} \right] |E_n\rangle \quad (42)$$

Donde ahora se hace aplicable (38), siendo:

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{(1 + \beta(E)^2)^N}} \sum_{j=0}^N \sqrt{\frac{N!}{j!(N-j)!}} \beta(E)^j M_{j+1 n} \quad (43)$$

En consecuencia, con (39) hemos sido capaces de fijar un estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$ con el que, resolviendo (16), podemos situarnos en el punto del espectro que deseemos, y cuya evolución temporal queda completamente descrita en la imagen de Schrödinger mediante las ecuaciones (38) y (43).

3.3. Elección de una magnitud para el estudio de la evolución temporal

Conociendo ya cómo evoluciona un estado que nos interesa, lo que debemos hacer ahora es estudiar el valor medio de alguna magnitud a lo largo del tiempo. En ciertas secciones de este trabajo hemos mencionado varias de ellas, que nos fueron de utilidad para caracterizar las diferentes regiones del espectro. n_t constituía un buen ejemplo: manifestaba un comportamiento radicalmente distinto en las zonas claramente diferenciadas del mismo, y además su significado físico era evidente, describiendo el número de bosones que ocupan el nivel t .

Podemos tomar, pues, esta magnitud como referencia para analizar la evolución temporal del sistema. Su valor medio en cualquier instante t , que designaremos por $\langle n_t \rangle(t)$, será:

$$\boxed{\langle n_t \rangle(t) = \langle \psi(\beta(E); t) | n_t | \psi(\beta(E); t) \rangle} \quad (44)$$

Puesto que $n_t = t^\dagger t$, en la expresión anterior conviene expresar $|\psi(\beta(E); t)\rangle$, cuya representación en la base de las energías es conocida por nosotros (y que se dio en (43)), en la base de los números de ocupación. Esto es sencillo disponiendo de la matriz de cambio de base M mencionada previamente, proporcionada por la diagonalización del hamiltoniano, que permite escribir unos representantes en función de los otros. Así, para cualquier vector $|v\rangle$, se cumplirá $|v\rangle = \sum_n a_n |E_n\rangle$ y $|v\rangle = \sum_j b_j |Nj\rangle$, estando los coeficientes relacionados del siguiente modo: $a_n = \sum_j b_j M_{j+1 n}$.

Con lo descrito hasta ahora, ya podemos abordar el cálculo de $\langle n_t \rangle(t)$ en la región del espectro que deseamos. Los resultados obtenidos se presentarán, junto al correspondiente análisis, en los apartados siguientes.

3.4. Predicción microcanónica del valor de equilibrio para n_t

Como hemos comentado ya, nos interesa comparar los resultados que arrojará el procedimiento descrito anteriormente, en el que lo fundamental es determinar la evolución temporal de un estado, con la predicción que proporciona alguna de las colectividades de la Física Estadística.

El caso que nos ocupa es un sistema aislado, de manera que la colectividad microcanónica es la más adecuada para tratar el problema. Denotaremos en adelante por $\langle n_t \rangle_{mic}$ al valor que nos proporcionará ésta. El cálculo puede hacerse del siguiente modo:

$$\langle n_t \rangle_{mic} = \text{Tr}(\rho \cdot n_t) \quad (45)$$

donde la matriz de densidad ρ es, en la representación de la energía, y para una energía E y una ventana ΔE (que tomaremos como $\Delta E = \langle \psi(\beta(E); t_0) | H | \psi(\beta(E); t_0) \rangle$) dadas:

$$\langle E_n | \rho | E_m \rangle = \frac{\Theta(E + \Delta E - E_n) - \Theta(E - E_n)}{\sum_i [\Theta(E + \Delta E - E_i) - \Theta(E - E_i)]} \delta_{nm} \quad (46)$$

Designaremos la matriz en esta representación por $\rho_{[E]}$. La representación en la base de los números de ocupación de n_t , matriz que denotaremos por $n_{t,[Nj]}$ es trivial:

$$\langle Nj | n_t | Nk \rangle = j \delta_{jk} \quad (47)$$

Teniendo en cuenta, de nuevo, la matriz de cambio de base M entre ambas representaciones, podemos hacer el cálculo de $\langle n_t \rangle_{mic}$ de la siguiente manera:

$$\boxed{\langle n_t \rangle_{mic} = \text{Tr}(M \rho_{[E]} M^\dagger n_{t,[Nj]})} \quad (48)$$

Hemos encontrado, por lo tanto, el modo de calcular la predicción sobre el valor de equilibrio de n_t que proporciona la colectividad microcanónica, $\langle n_t \rangle_{mic}$. Ahora lo compararemos con $\langle n_t \rangle(t)$, calculado según lo descrito en las secciones precedentes.

3.5. Comportamiento de $\langle n_t \rangle(t)$ en las distintas regiones del espectro

Cuando muestreamos en todo el espectro el comportamiento de $\langle n_t \rangle(t)$, vemos que hay diferencias muy significativas en las tres regiones A, B y C que aparecen en la figura 2. En las figuras 23 y 24, mostramos gráficas características para cada una de las zonas.

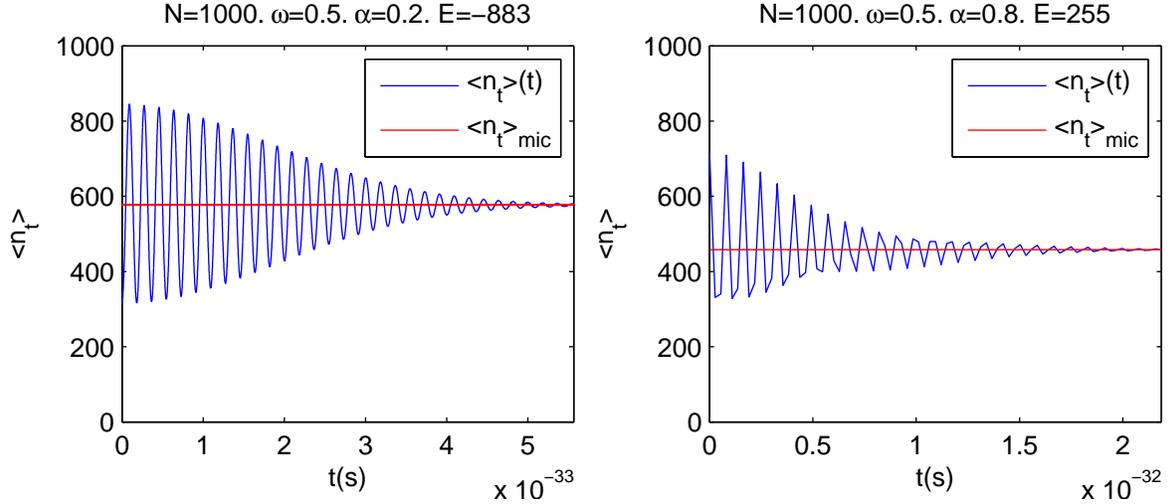


Figura 23: Gráficas características de las regiones A (izquierda) y C (derecha). Hay relajación de $\langle n_t \rangle(t)$ a $\langle n_t \rangle_{mic}$ para tiempos suficientemente largos.

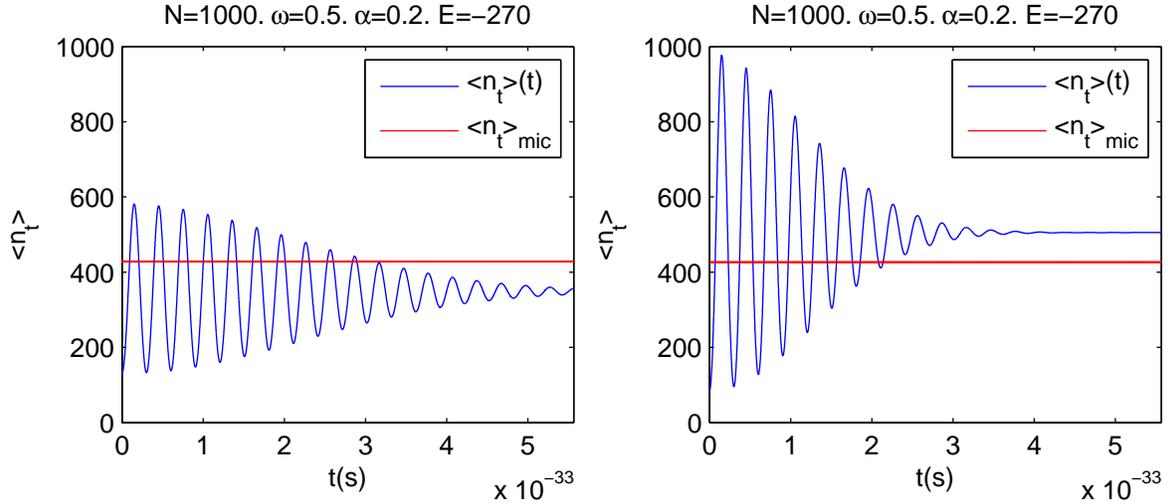


Figura 24: Gráficas características de la región B. Ambas son respectivas al mismo punto del espectro, y corresponden a valores distintos de β (reales) que dan lugar a la misma energía según (16). No hay relajación de $\langle n_t \rangle(t)$ a $\langle n_t \rangle_{mic}$, y hay memoria del estado inicial: según sea éste uno u otro para el mismo punto del espectro, la relajación se da hacia valores diferentes de n_t .

Hay diferencias muy claras entre las regiones sin cruces, que son A y C, y la región B, en la que éstos están presentes. En el último caso no hay relajación de $\langle n_t \rangle(t)$ a $\langle n_t \rangle_{mic}$, sino a otras cantidades, mientras que en el resto de ocasiones hay una concordancia excelente entre

la predicción de la colectividad microcanónica y el valor al que tiende $\langle n_t \rangle(t)$ para tiempos suficientemente largos.

Otro detalle importante es que en la región B apreciamos que hay memoria del estado inicial. Si partimos de estados diferentes (con distinta β) pero que tienen la misma energía según (16), cuando transcurre un tiempo suficientemente largo n_t relajará a valores diferentes para cada caso. No tiene sentido la aplicación de la colectividad microcanónica al sistema en tales circunstancias, ya que no puede existir dependencia del estado inicial, sino sólo sobre la energía (y, por supuesto, el resto de parámetros N , α y ω).

3.6. Recurrencias de $\langle n_t \rangle(t)$ y sus periodos

Si en las gráficas de las figuras 23 o 24 tomamos tiempos mucho mayores a los que aparecen en el eje de abscisas, lo que observamos son recurrencias, es decir, desviaciones repentinas de $\langle n_t \rangle(t)$ con respecto al valor de relajación, y cuyas oscilaciones reproducen prácticamente las que se dieron en los instantes iniciales hasta alcanzarse el valor de equilibrio. Un ejemplo de esto se muestra en la figura 25.

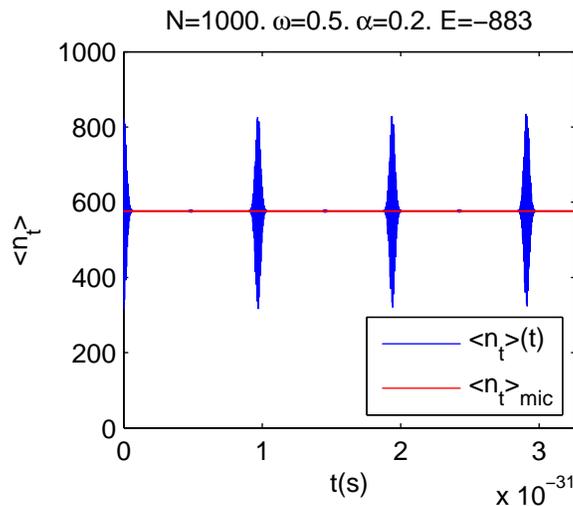


Figura 25: Ejemplo de recurrencias. Corresponde a la figura 23 (izquierda), tomando un límite de tiempo mayor en el eje de abscisas.

Para que un sistema relaje verdaderamente a un estado de equilibrio, lo que debe ocurrir es que, en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), el tiempo transcurrido entre la primera relajación y la siguiente recurrencia (que designaremos por T , y al que llamaremos simplemente *tiempo de recurrencia*) tienda a infinito. Veamos que esto es cierto en la figura 26.

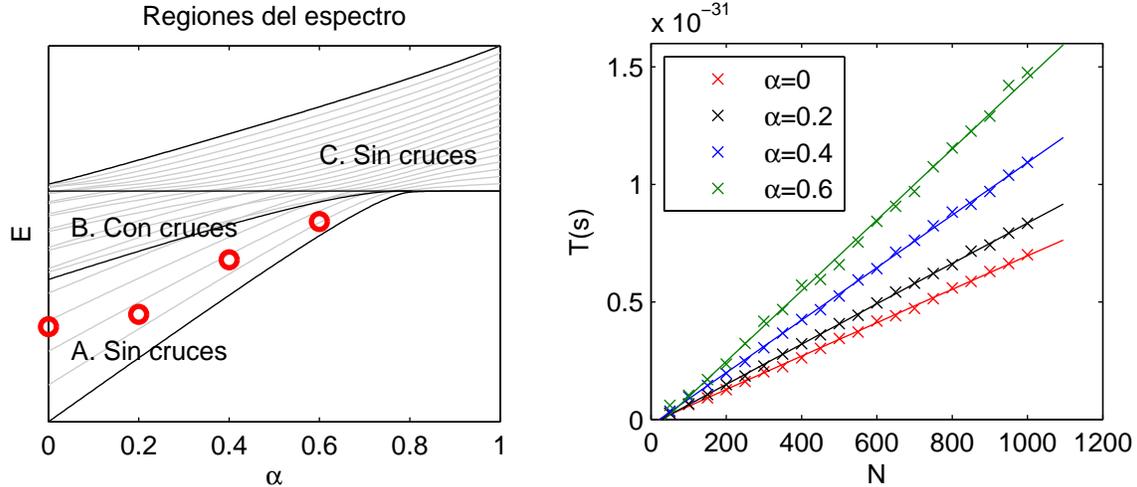


Figura 26: En el esquema de la izquierda, los círculos rojos indican en qué regiones del espectro se ha llevado a cabo un análisis de los periodos de recurrencia frente a N , cuyos resultados se muestran a la derecha.

No sólo apreciamos que hay un aumento de T conforme N se hace mayor, sino que, además, el ajuste de los resultados a una recta es bastante bueno. Hemos tomado puntos de la región A en este análisis porque las recurrencias presentaban un aspecto más regular que en las demás, de manera que ofrecían más facilidades para calcular T a través de programas de Matlab, permitiéndonos con ello trazar la gráfica de la figura 26 (derecha) con numerosos puntos. Lo mismo ocurre, no obstante, para el resto de zonas, B y C.

Hemos demostrado aquí, pues, que, pese a la aparición de recurrencias para tiempos suficientemente largos, cuando nos aproximamos al límite termodinámico éstas están infinitamente espaciadas, y, en consecuencia, podemos decir que n_t relaja permanentemente a un valor, sin desviarse de él prácticamente nunca.

3.7. Cuantificación de la desviación de $\langle n_t \rangle(t)$ con respecto a $\langle n_t \rangle_{mic}$

Hasta ahora, hemos visto cómo son las gráficas típicas de $\langle n_t \rangle(t)$ para cada zona del espectro, y hemos apreciado algunas diferencias entre las distintas fases. En adelante, pretendemos detallar con mayor profundidad cómo son las diferencias entre el valor predicho por la colectividad microcanónica y el promedio temporal de $\langle n_t \rangle(t)$, que designaremos por $\overline{\langle n_t \rangle(t)}$.

Para ello, tomemos un α , ω y N dados y representaremos para todas las energías posibles la variable $|\overline{\langle n_t \rangle(t)} - \langle n_t \rangle_{mic}|$ (promediando para todos aquellos β posibles para una misma energía, según (16)). El resultado se muestra en 27. Para las fases A y C, como comentábamos en la sección 3.5, vemos que el la desviación de $\overline{\langle n_t \rangle(t)}$ con respecto a $\langle n_t \rangle_{mic}$ tiende a 0, en tanto que no ocurre lo mismo para la región B, en la que había cruce de niveles: allí se acrecienta notablemente. Eso ocurre, por supuesto, para aquéllas zonas que no son cercanas a las regiones de transición entre unas fases y otras.

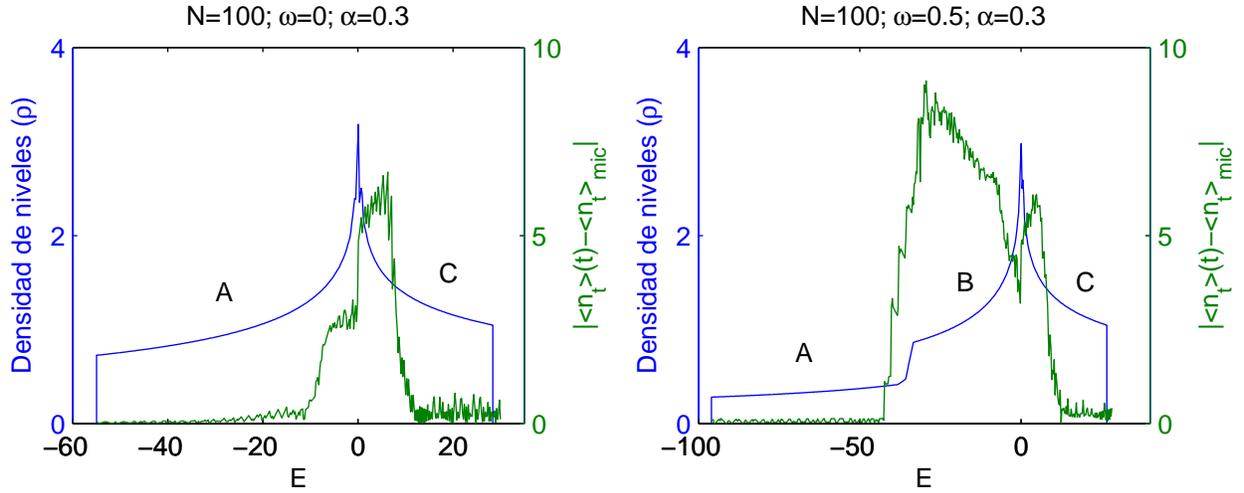


Figura 27: $|\overline{\langle n_t \rangle(t)} - \langle n_t \rangle_{mic}|$ frente a E para α , ω y N fijados. Se proporciona también la representación de la densidad de niveles, ρ , para discernir en cuál de las fases (A, B o C) nos encontramos.

Las gráficas de la figura 27 se corresponden, no obstante, a zonas muy concretas del espectro. Para confirmar lo que en esta sección hemos comentado, deberíamos hacer un análisis análogo pero que abarcase todo el espectro. Los resultados del mismo aparecen en la figura 28, donde $|\overline{\langle n_t \rangle(t)} - \langle n_t \rangle_{mic}|$ aparece representado en una escala de colores, y una vez más apreciamos cómo hay un comportamiento completamente diferente entre las diversas fases que presenta nuestro sistema, puestas de manifiesto en la figura 22. De estas gráficas se infiere que, para las fases A y C de la figura 2 hay relajación de $\langle n_t \rangle(t)$ al valor predicho por la colectividad microcanónica para tiempos suficientemente largos. No es así para la región B, donde el valor al que tiende $\langle n_t \rangle(t)$ cuando $t \rightarrow \infty$ depende del estado inicial y dista aproximadamente en 10 bosones del predicho por la Física Estadística. Llevando a cabo un análisis para sistemas con mayor número de partículas (llegando hasta $N \sim 1000$), puede apreciarse que la magnitud de este error o desviación siempre se encuentra en torno al 10% de N .

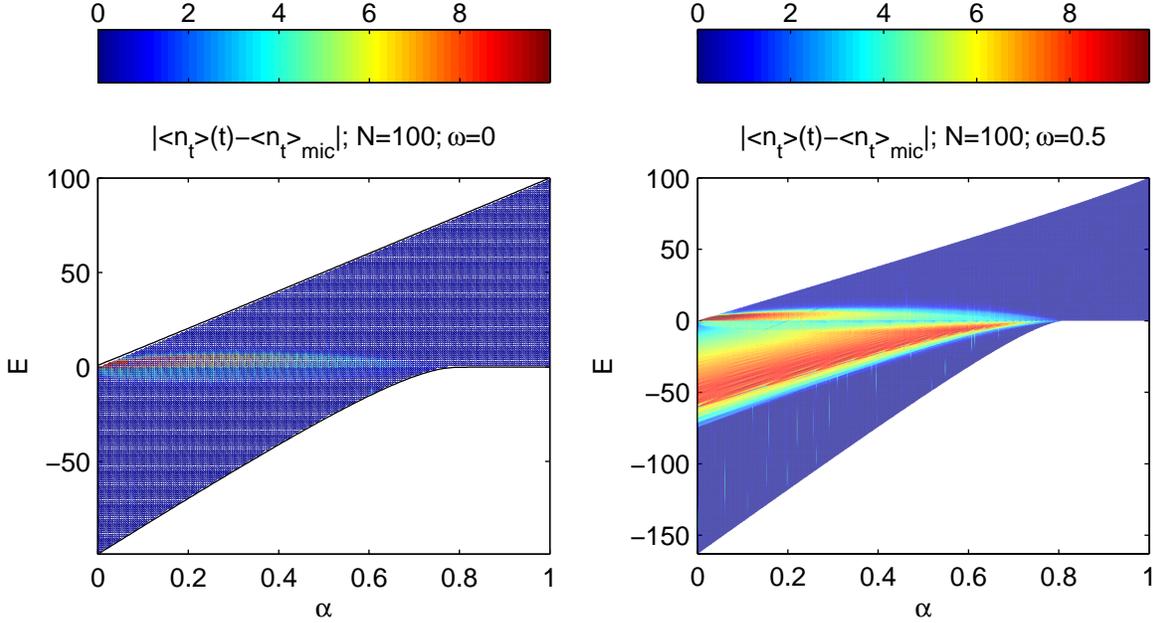


Figura 28: Representación de $|\overline{\langle n_t \rangle(t)} - \langle n_t \rangle_{mic}|$ para los casos $\omega = 0$ y $\omega \neq 0$. Conviene comparar estas gráficas con las que aparecen en la figura 22, que son las que nos indican en qué región del espectro se localiza cada fase.

Con el conjunto de secciones precedentes hemos llegado, por lo tanto, a la conclusión de que **sólo para las fases A y C de la figura 2, donde no hay cruce de niveles, el sistema relajará a los valores de n_t predichos por la colectividad microcanónica, y que hemos denotado por $\langle n_t \rangle_{mic}$.** Por el contrario, **en B habrá memoria sobre el estado inicial**, y no será fiable la información que se extrae de la Física Estadística en comparación con el comportamiento de n_t .

4. Conclusión

El presente trabajo ha indagado sobre las propiedades de un modelo de bosones st más implicadas en el estudio de este sistema desde el enfoque de la investigación de sus transiciones de fase y evolución temporal. Las motivaciones de esto atienden a la satisfacción de varios objetivos en campos diferentes: el estudio en Física Nuclear del IBM, del que es una simplificación que facilita la obtención de resultados; la caracterización en sí del modelo y sus transiciones de fase, de utilidad para el análisis de fenómenos decoherentes y su aplicación práctica a la computación cuántica, como puede verse en [5]; y un avance en el conocimiento del sistema, ineludible para el posterior tratamiento de su evolución temporal y como paso previo a emprender una investigación sobre la relajación de sistemas de muchas partículas a lo dictaminado por las predicciones de la Física Estadística.

En cuanto a la caracterización del espectro, se ha abordado por dos frentes, siendo uno de ellos la resolución exacta de la diagonalización del hamiltoniano y el otro la aplicación del método variacional. El objetivo del último era dotar de una índole analítica a la resolución, exonerándola del exclusivo carácter numérico del primero que difícilmente podría complementarse con una interpretación cualitativa y una imagen física. El estado fundamental queda así completamente descrito, siendo la concordancia de las energías proporcionadas por ambos métodos

muy buena. Además, esto ofrece una visión sobre las diferentes fases que podemos encontrar en el estado fundamental, y sobre qué magnitudes físicas son las adecuadas para su caracterización. Esos parámetros de orden también han sido objeto de análisis, permitiéndonos indagar sobre la naturaleza de los estados excitados, y es de destacar el hecho de que hasta ahora sólo una pequeña aproximación a ellos se había llevado a cabo en algunas referencias existentes sobre este modelo.

Lo que se ha podido inferir sobre esto es que, como desde el principio vaticinaban los espectros representados, en ellos hay varias regiones diferentes que se ponen claramente de manifiesto en el estudio de ciertos observables. En particular gozan de interés los cambios bruscos que se aprecian entre unas y otras y las fuertes oscilaciones presentes para ciertas zonas en todas las gráficas relativas a $\omega \neq 0$. Estos parámetros de orden no sólo merecen un estudio por establecer ciertas fronteras entre las fases en el espectro, dividiéndolo según tenga unas propiedades u otras, sino también por ser capaces de arrojar mucha más información en cuanto al estudio de las fases y la evolución temporal se refiere.

La totalidad de lo anterior ha servido para ir detallando la descripción del espectro a lo largo del trabajo, que culmina con una interpretación de las diferentes fases que lo integran fundamentada, curiosamente, en una profundización en la forma de la energía variacional que aparentemente sólo serviría para el estudio del fundamental, y que puede extrapolarse al conjunto de los excitados. Partiendo de un espectro relativamente complejo que arroja el tratamiento numérico, hemos sido capaces de ofrecer un procedimiento para predecir tanto su estructura como la forma de las gráficas de sus parámetros de orden cualitativamente, salvando la necesidad de diagonalizar matrices de grandes dimensiones para obtener esa información. Asimismo, la densidad de niveles ha sido una herramienta fundamental para delimitar rigurosamente cuáles son las fases de los estados excitados, concluyendo con esto una descripción completa de todo el espectro con la que se establece una base para emprender el estudio de otros aspectos del sistema.

Todo lo anterior se ha tomado, pues, como punto de partida para tratar el análisis de la evolución temporal en el marco del modelo *st*. A esta última parte se ha dedicado una porción significativa del trabajo. Se ha procedido calculando cómo evoluciona el número de bosones en el nivel t (que es un parámetro de orden) a lo largo del tiempo, y se ha estudiado para todas las zonas del espectro si existía una relajación hacia un valor de equilibrio. Así ocurría siempre, aunque sólo se daba la coincidencia entre éste y el predicho por la colectividad microcanónica en las fases del sistema en las que no había cruces de niveles presentes. Allí donde no existía tal concordancia, hemos visto cómo el valor de relajación dependía de las condiciones iniciales (estado del sistema en el instante inicial); es decir, hay memoria sobre el estado inicial para la región del espectro en la que se producen dichos cruces, y en tal caso deben desestimarse los resultados que proporciona la Física Estadística.

Podría recalcarse que lo referido a evolución temporal tiene un carácter novedoso y pretende ser objeto de una publicación futura. Esto se debe a que se ha observado por primera vez una relación directa entre la presencia de una transición de fase y un cambio brusco en la aplicabilidad de la colectividad microcanónica, que hasta ahora se había vinculado bien con la integrabilidad del modelo, bien con las características de los observables que entraban en juego. En otras palabras, podría decirse que hemos mostrado, por primera vez, que, en un sistema integrable y para un observable sencillo y físicamente relevante, podemos pasar de la situación de termalización (es decir, relajación a un estado de equilibrio) a la de no termalización al cruzar un punto crítico.

Sería interesante, en vistas a lo anterior, considerar que este estudio podría dar pie a nuevas investigaciones sobre el mismo tema (conexión entre puntos críticos y termalización) en otros

modelos, con el objeto de esclarecer esta cuestión más ampliamente y desde una perspectiva mucho más global y general.

A lo largo de este trabajo han quedado, pues, dilucidadas varias de las propiedades sobre el modelo st , respondiendo al interés teórico de profundizar en el conocimiento del modelo y, además, trazando algunas directrices de un futuro proyecto consistente en el estudio de la evolución temporal de sistemas cuánticos de muchas partículas.

Referencias

- [1] J. Aguilar Peris, *Curso de Termodinámica*, Alhambra Universidad, Primera Edición (1989).
- [2] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, First Edition (1998).
- [3] J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. C* **73**, 054305 (2006).
- [4] J. P. Elliott, *The interacting boson model of nuclear structure*, *Rep. Prog. Phys.*, Vol 48, pp 171-221 (1985).
- [5] P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. A* **80**, 032111 (2009).
- [6] F. Schwabl, *Advanced Quantum Mechanics*, Springer, Third Edition (2000).
- [7] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics. A Modern Development*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2000).

El abajo firmante, matriculado en el Máster Interuniversitario en Física Nuclear de la Facultad de Ciencias Físicas, autoriza a la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a su autor el presente Trabajo de Fin de Máster: "Transiciones de fase y termalización en el modelo st ", realizado durante el curso académico 2010-2011 bajo la dirección de Joaquín Retamosa Granado y Armando Relaño Pérez en el Departamento de Física Nuclear, y a la Biblioteca de la UCM a depositarla en el Archivo Institucional EPrints Complutense con el objeto de incrementar la difusión, uso e impacto del trabajo en Internet y garantizar su preservación y acceso a largo plazo. La publicación en abierto tendrá un embargo de:

- Ninguno.
- Un año.

Ángel Gutiérrez Rubio

Madrid, 27 de septiembre de 2011

Los abajo firmantes, directores de un Trabajo Fin de Master presentado en el Máster Interuniversitario en Física Nuclear de la Facultad de Ciencias Físicas, autorizan a la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a difundir y utilizar con fines académicos, no comerciales y mencionando expresamente a su autor el presente Trabajo de Fin de Máster: "Transiciones de fase y termalización en el modelo st ", realizado durante el curso académico 2010-2011 bajo nuestra dirección en el Departamento de Física Nuclear, y a la Biblioteca de la UCM a depositarla en el Archivo Institucional E-Prints Complutense con el objeto de incrementar la difusión, uso e impacto del trabajo en Internet y garantizar su preservación y acceso a largo plazo. La publicación en abierto tendrá un embargo de:

- Ninguno.
- Un año.

Joaquín Retamosa Granado

Armando Relaño Pérez

Madrid, 27 de septiembre de 2011