



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**ANÁLISIS DE LA ENTROPÍA DE ENTRELAZAMIENTO DE ESTADOS
COLECTIVOS DEL MODELO DE BOSE-HUBBARD**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAestrÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
MIGUEL ALEJANDRO PÉREZ CONTRERAS

TUTOR PRINCIPAL:
FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ
INSTITUTO DE FÍSICA

COMITÉ TUTOR:
DRA. MARCELA DOLORES GREYER GONZÁLEZ
FACULTAD DE CIENCIAS

DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ
INSTITUTO DE FÍSICA

Ciudad Universitaria, CD. MX. Agosto, 2019

JURADO ASIGNADO:

Propietario: Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez (IF, UNAM)

Propietario: Dra. Vicenta Sánchez Morales (FC, UNAM)

Propietario: Dr. Remigio Cabrera Trujillo (ICF, UNAM)

Propietario: Dr. Ricardo Méndez Fragoso (FC, UNAM)

Propietario: Dra. Sara Guadalupe Cruz Cruz (UPIITA, IPN)

La tesis se realizó en el Instituto de Física, UNAM.

TUTOR DE TESIS:
Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez
Instituto de Física.

Agradecimientos

A mis padres y mis hermanos, por ser los pilares de mi vida, por su amor incondicional. Cada uno de mis logros en esta vida será siempre gracias a ellos. A Verónica por ser mi compañera de viaje en esta etapa, por todo su cariño, por su apoyo y compartir conmigo su alegría.

A mi asesor el Dr Francisco Javier Sevilla Pérez, gracias por sus consejos, por su motivación y aliento para la realización de esta tesis. A todos los sinodales por su paciencia y correcciones para este trabajo.

A mis compañeros y amigos: Toño, Silvinha, Linda, Athziri, Yessenia, Arturo, Gaby, Lalo, Marisol, Javitt, Norberto, Ernesto, Rene y Gustavo. Gracias por todo el apoyo que siempre me brindaron, por todas esas horas de trabajo juntos.

Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca proporcionada por el Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM <IN114717 Materia activa: modelos de movimiento y fenómenos colectivos>.

Resumen

Se estudia la relación entre la entropía de entrelazamiento y la relajación del sistema a estados estacionarios de equilibrio. El sistema de estudio es un conjunto de seis bosones en interacción confinados por un potencial periódico de seis sitios descritos por el hamiltoniano de Bose Hubbard. Se calcula la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento y de los observables del sistema cuando el sistema parte de estados fuera de equilibrio, que son estados con un número fijo de partículas por sitio, se analiza el comportamiento del sistema a tiempos largos y se compara el valor de saturación de la entropía y de los observables con el valor dado por el ensemble canónico para definir si el sistema a alcanzado o no un estado estacionario que puede ser descrito por este ensemble.

Índice general

1. Introducción	1
2. Mecánica estadística cuántica	5
2.1. Operador de densidad	5
2.2. Ensemble microcanónico	7
2.3. Ensemble canónico	9
2.4. Equilibrio térmico macroscópico	11
2.5. Equilibrio térmico microscópico	12
3. Entrelazamiento cuántico	14
3.1. Entrelazamiento bipartido	15
4. Hamiltoniano de Bose Hubbard	19
4.1. Las fases superfluida y aislante Mott	23
4.1.1. $\frac{J}{U} \ll 1$: Fase Aislante Mott	23
4.1.2. $\frac{J}{U} \gg 1$: Fase superfluida	24
5. Protocolo <i>quench</i>	28

5.1. Construcción y diagonalización del Hamiltoniano	28
5.2. Evolución del estado inicial $ 1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$	31
5.2.1. Dependencia temporal del número de partículas y energía de interacción para el estado inicial $ 1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$	33
6. Entropía de entrelazamiento de Rényi en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard	38
6.1. Comparación entropía de Rényi y von Nuemann	47
6.2. Equilibrio térmico microscópico	49
6.2.1. Distribución de probabilidad del número de partículas en un sitio dado	53
6.3. Estado inicial $ 2, 0, 2, 0, 2, 0\rangle$	54
7. Conclusiones	58
A. Códigos	61
A.1. Construcción de la base	61
A.2. Elementos de matriz del Hamiltoniano	63
A.3. Vector de estado en función de tiempo	66
A.4. Matriz de densidad y entropía de Renyi	66
A.5. Matriz de densidad reducida un sitio	67
A.6. Matriz de densidad reducida de subsistemas de dos o más sitios	69
Referencias	71

Índice de figuras

4.1. Imágenes de absorción de múltiples patrones de interferencia de las ondas de materia, después de ser liberados de potenciales de profundidad a) $0E_r$, b) $3E_r$, c) $7E_r$, d) $10E_r$, e) $13E_r$, f) $14E_r$, g) $16E_r$, y h) $20E_r$ [1].	25
5.1. Niveles de energía adimensionales ($\frac{E_n}{U}$) para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$	31
5.2. Número promedio total de partículas	33
5.3. Valor esperado del número de partículas por sitio para diferentes valores del parámetro de salto, a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$ en cada una de las gráficas $\langle n_1 \rangle$, $\langle n_2 \rangle$ y $\langle n_3 \rangle$ representan los valores para el primer segundo y tercer sitio, respectivamente.	34
5.4. Desviación estándar del número de partículas	35
5.5. Valor esperado de la energía de interacción total para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$	36
5.6. Valor esperado de la energía de interacción en el primer sitio para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$	37
6.1. Valor esperado de la entropía para subsistemas conformados por el primer sitio, los dos primeros sitios y los tres primeros sitios para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ d) $J = 10$	41

6.2. Promedio temporal de la entropía para las particiones de un sitio (azul), dos sitios (verde), tres sitios (rojo).	42
6.3. Desviación estándar de la entropía de entrelazamiento para los subsistemas del primer sitio(azul), segundo sitio(verde) y tercer sitio(rojo).	44
6.4. Entropía en función del tiempo para las seis posibles biparticiones de un sitios, a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$ para el estado inicial $ 1, 1, 1, 1, 1\rangle$	45
6.5. Entropía reducida en función del tiempo para los 15 posibles subsistemas que consten de dos sitios para: a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$, para el estado inicial total $ 1, 1, 1, 1, 1\rangle$	46
6.6. Entropía reducida en función del tiempo para los 20 posibles subsistemas que consisten de tres sitios para: a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$ para el estado inicial total $ 1, 1, 1, 1, 1\rangle$	47
6.7. Entropía de entrelazamiento de Rényi y de Von Neumann para subsistemas de 1, 2 y 3 sitios para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ d) $J = 10$. 48	48
6.8. Distancia entre el promedio temporal de la entropía de entrelazamiento de Rényi y la entropía dada por la matriz de densidad reducida del ensemble canónico para las particiones de un sitio (azul), dos sitios (verde), tres sitios (rojo), estado inicial $ 1, 1, 1, 1, 1\rangle$	50
6.9. Distribución de probabilidad de partículas en un subsistema de tres por sitios, para tiempos largos $t > 10$. a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$	51
6.10. Distancia entre la matriz de densidad reducida canónica y la matriz del sistema para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ d) $J = 10$	52
6.11. Promedio temporal de la distribución de probabilidad de partículas (rojo) y distribución de probabilidad canónica (azul) para el subsistema de un sitio con, a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$	54

6.12. Valor esperado de la entropía para subsistemas de 1, 2 y 3 sitios para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$, d) $J = 10$ para el estado inicial $ 202020\rangle$	56
6.13. Promedio temporal de la entropía para las particiones de un sitio (azul), dos sitios (verde), tres sitios (rojo), estado inicial $ 202020\rangle$	57
6.14. Desviación estándar de la entropía de entrelazamiento para los subsistemas de un sitio (azul), dos sitios (verde) y tres sitios (rojo), estado inicial $ 202020\rangle$	57

Capítulo 1

Introducción

En años recientes, ha habido un gran progreso en estudios experimentales de átomos atrapados por redes ópticas a temperaturas bajas [2, 3, 4, 5] lo cual ha sido acompañado de intensivas investigaciones teóricas. Los experimentos poseen importantes características que hacen de éstos una de las herramientas más convenientes para estudiar las propiedades de sistemas de muchos cuerpos. Primero, estos experimentos permiten un alto grado de control en los parámetros del sistema en un amplio rango de valores. Segundo, la variación de los parámetros del sistema puede ser muy rápida, esto permite poner al sistema en estados iniciales fuera de equilibrio. Finalmente, los sistemas se encuentran aislados del ambiente [6]. Por todo lo anterior, es posible estudiar la dinámica cuántica de sistemas finitos y aislados del ambiente, partiendo de estados iniciales fuera de equilibrio y analizar la posible relajación de éstos sistemas a estados de equilibrio.

Lo anterior resulta ser un tema de gran interés actual, no sólo para la descripción de éstos sistemas, sino también ofrece la posibilidad de estudiar temas relacionados con los fundamentos de la física estadística, pues a pesar del gran éxito que la física estadística tiene en describir las propiedades de sistemas macroscópicos, aún no se ha alcanzado un entendimiento general de como un sistema llega a equilibrio[7].

Actualmente hay un renovado interés en la derivación de la mecánica estadística a partir de la dinámica de sistemas cerrados, desde un nuevo enfoque. En lugar de asumir

A PRIORI que el sistema está en un estado mezcla, tal como por ejemplo, en el ensemble microcanónico o canónico, se busca describir el estado individualmente a todo tiempo $|\psi(t)\rangle$ y mostrar que, bajo condiciones razonables, el sistema relaja a estados estacionarios. Se busca además definir si dichos estados estacionarios son estados de equilibrio que pueden ser descritos por los ensembles de la mecánica estadística.

Se toma entonces un enfoque individualista, por ejemplo, dado un sistema en un estado $|\psi(t)\rangle$ puro es de interés poder definir si este es un estado de equilibrio. Consecuentemente, surge la necesidad de definiciones de equilibrio térmico para sistemas individuales.

En esta dirección Goldstein y colaboradores presentan dos definiciones de equilibrio [8, 9]. Equilibrio térmico macroscópico (MATE)¹ y equilibrio térmico microscópico (MITE)². MATE es una extensión natural de la noción de equilibrio de Boltzmann para un sistema cuántico y fue formulada por von Neumann, mientras MITE es una noción puramente cuántica sin análogo clásico.

Cuando un sistema está en MATE, los valores esperados de los observables macroscópicos son aproximadamente iguales a los valores de equilibrio dados por el ensemble microcanónico, además las fluctuaciones son muy pequeñas. Esto significa que si se realiza una sola medición de una variable macroscópica es muy probable que el valor medido coincida con el valor de equilibrio. Por otra parte, cuando un sistema está en MITE, los valores esperados de cualquier variable macroscópica expresados como operador local extensivo o intensivo deben estar cercanos al correspondiente valor de equilibrio, pero sus fluctuaciones cuánticas pueden no ser pequeñas. Así, si se realiza un conjunto de varias mediciones el valor promedio coincidirá con el valor de equilibrio, pero el valor de una sola medición no necesariamente llevará al valor de equilibrio [9].

La noción de MATE tiene significado sólo para sistemas grandes ya que para estos sistemas las fluctuaciones en equilibrio de observables macroscópicos son mucho más pequeñas que el valor esperado del observable. Por el contrario la noción de MITE tiene significado incluso para sistemas pequeños, como el que se considera en este trabajo. Por tanto esta será la definición en la que nos concentraremos.

¹Del acrónimo en inglés Macroscopical Thermal Equilibrium.

²Del acrónimo en inglés Microscopic Thermal Equilibrium.

Con las definiciones de equilibrio para estados puros, el siguiente paso es estudiar la dinámica del sistema de interés y comparar para tiempos largos los estados con las definiciones dadas de equilibrio.

La configuración más simple en la cual un sistema parte de estados fuera de equilibrio es la conocida como protocolo *quench*³ que consiste en: iniciar al sistema en un estado propio de un Hamiltoniano inicial H_0 , cambiar repentinamente un parámetro del Hamiltoniano, y dejar que la dinámica sea gobernada por el nuevo Hamiltoniano.

Entre todos los modelos investigados, por mucho, el modelo de Bose-Hubbard toma una posición especial siendo un modelo paradigmático de sistemas fuertemente correlacionados [3, 10]. Este modelo puede realizarse en átomos inmersos en redes ópticas donde los parámetros pueden ser controlados con un alto grado de precisión, por ejemplo, con cambios repentinos. Esta propiedad hace a este modelo un candidato ideal para estudiar la dinámica de *quench* cuántica tanto teóricamente como experimentalmente.

Hasta ahora, en los trabajos sobre la dinámica de *quench* cuánticos, en el modelo de Bose-Hubbard, el estado del sistema antes del *quench* es siempre asumido el estado base del Hamiltoniano inicial. Esto es, el sistema se asume está a una temperatura inicial cero. Sin embargo nada impide iniciar al sistema en cualquier otro estado excitado. En este trabajo se consideran dos estados iniciales, el estado base y un estado excitado del Hamiltoniano antes del *quench*.

El objetivo de este trabajo es estudiar la relación entre la entropía de entrelazamiento y la relajación de un sistema a estados estacionarios de equilibrio. Para ello se estudia un sistema de seis bosones en interacción confinados por un potencial periódico de seis sitios, evolucionando a través del Hamiltoniano de Bose-Hubbard. Se analiza la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento de Rényi en función de los parámetros del Hamiltoniano, cuando el sistema parte de un estado inicial no estacionario. Se estudia el comportamiento del sistema a tiempos largos y se compara el valor de saturación de la entropía y de los observables, con los valores dados por el ensemble canónico, para definir así si el sistema ha alcanzado o no un estado estacionario que puede ser descrito por este ensemble.

³ Emplearemos el término en inglés *quench*, a falta de una traducción precisa en español.

La tesis está organizada de la siguiente forma; en el capítulo 2 se desarrollan los ensembles de la mecánica estadística cuántica y los conceptos de MITE y MATE.

En el capítulo 3 se presenta el concepto de entrelazamiento y su relación con el concepto de equilibrio microscópico a través de la entropía de entrelazamiento en sistemas bipartidos.

En el capítulo 4 se presenta el Hamiltoniano de Bose-Hubbard y se describen algunas de las propiedades de los sistemas descritos por este Hamiltoniano dependiendo de sus parámetros.

En el capítulo 5 se desarrolla el protocolo *quench* empleado para el sistema de estudio, se muestran la evolución de los observables; número de ocupación y energía de interacción, analizando sus fluctuaciones y su comportamiento para tiempos largos.

En el capítulo 6 se calcula la entropía de entrelazamiento de Rényi para diversos subsistemas, estudiando su comportamiento a tiempos largos y las fluctuaciones que presenta en función de los parámetros del Hamiltoniano, y del estado inicial del que parte el sistema. Por último, se compara la matriz de densidad reducida del subsistema de un sitio y la matriz de densidad reducida dada por el ensemble canónico aplicando la definición de equilibrio térmico microscópico.

Capítulo 2

Mecánica estadística cuántica

En este capítulo se dará una breve revisión de los ensembles termodinámicos, microcanónico y canónico, los cuales se obtienen a partir del postulado de máxima entropía. Estos ensembles describen el estado del sistema a partir de matrices de densidad estacionarias que resultan ser una mezcla estadística de estados. La física estadística asume que los sistemas eventualmente alcanzan estados de equilibrio que son descritos por los ensembles termodinámicos. Una pregunta de interés es si un estado puro, cuya matriz de densidad resulta ser diferente a las matrices de densidad mezcla de los ensembles, puede describir también situaciones de equilibrio. Para responder esa cuestión en la segunda sección se presentarán definiciones de equilibrio térmico macroscópico MATE y equilibrio térmico microscópico MITE dadas por Goldstein, las cuales sí permiten considerar el equilibrio de sistemas cuánticos en estados puros.

2.1. Operador de densidad

Un sistema cuántico se describe, microscópicamente, de la siguiente manera: se asocia un espacio de Hilbert al sistema, tal que los estados correspondientes son descritos por vectores de estado $|\psi\rangle$ o por operadores (matrices de densidad) $\hat{\rho}$. Los observables son operadores auto adjuntos (Hermitianos) en el espacio de Hilbert mencionado.

La evolución en el tiempo del vector de estado está determinada por la ecuación de Schrödinger

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.1)$$

donde $|\psi(t)\rangle$ denota el vector de estado al tiempo t . Si la descripción del estado se hace a través del operador de densidad $\hat{\rho}(t)$ su evolución temporal está dada por

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) + \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\rho}(t)] = 0, \quad (2.2)$$

que es llamada la ecuación de von Neumann.

Dada una base ortogonal del espacio de Hilbert $\{|\alpha\rangle\}$, el vector de estado $|\psi\rangle$ puede ser expresado como

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (2.3)$$

donde $c_{\alpha} = \langle \alpha | \psi \rangle$. Una descripción exacta del estado requiere del conocimiento de todos los c_{α} . A esta especificación de los coeficientes se define como microestado. Si se considera un conjunto de observable macroscópicos, tales como la energía total del sistema, el número total de partículas, la magnetización total, en caso de que el sistema sea magnético, etc, es posible dar una descripción del sistema empleando los valores esperados de estos observables, la especificación de estos valores se define como macroestado.

En el enfoque de ensembles de mecánica estadística introducido por Wilhem Gibbs, se busca un operador de densidad independiente del tiempo, que llamaremos de equilibrio, con el cual se obtienen valores de los observables macroscópicos, como promedios sobre el ensemble. La matriz de densidad de equilibrio debe cumplir que

$$[H, \hat{\rho}^{eq}] = 0. \quad (2.4)$$

Lo que implica que $\hat{\rho}^{eq}$ es una función del Hamiltoniano y de las constantes de movimiento (observables que conmutan con el Hamiltoniano). Esta condición no determina por completo $\hat{\rho}^{eq}$, para obtenerla se emplea el postulado de máxima entropía usando la definición de entropía dada por von Neumann,

$$S(\hat{\rho}) = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \quad (2.5)$$

El estado de equilibrio es aquel que maximiza esta entropía bajo las restricciones macroscópicas del sistema.

En lo siguiente se desarrollan explícitamente los operadores de densidad $\hat{\rho}^{eq}$, para cada uno de los ensambles. La construcción dada se puede generalizar para obtener cualquier otro ensamble y puede ser revisada en cualquier libro de mecánica estadística, por ejemplo [11, 12].

2.2. Ensemble microcanónico

Considere un sistema cerrado y aislado, con energía total constante (E) y un número fijo de partículas (N). Dado que un sistema sin interacción alguna con el ambiente no es realista y es necesariamente una idealización, hay que considerar pequeñas fluctuaciones en la energía. Consideramos un sistema con una energía en el intervalo $\Omega_{mc} = [E + \Delta E, E - \Delta E]$, donde $\Delta E \ll E$. Tómese el conjunto completo $|E_n\rangle$ de estados propios del Hamiltoniano H que describe el sistema

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad (2.6)$$

El estado del sistema puede ser desarrollado en la base de la energía como $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |E_n\rangle$.

El ensemble microcanónico está conformado entonces por todos los microestados que satisfacen la restricción macroscópica de aislamiento, es decir, tienen energía dentro del intervalo Ω_{mc} .

Obtendremos ahora el operador de densidad de este ensemble de equilibrio, que denotaremos como $\hat{\rho}^{mc}$. Empleamos el principio de máxima entropía, considerando que el operador debe estar normalizado, es decir,

$$\text{Tr}'\{\hat{\rho}^{mc}\} = 1. \quad (2.7)$$

donde Tr' indica la traza sobre los estados en el intervalo de energía Ω_{mc} .

La condición de extremo se obtiene pidiendo

$$\delta(S[\hat{\rho}] - \alpha_0(\text{Tr}'\{\hat{\rho}\} - 1)) = 0, \quad (2.8)$$

donde se ha introducido el multiplicador de Lagrange α_0 para cumplir la restricción de normalización.

Sustituyendo la expresión de la entropía 2.5 y realizando la variación con respecto al operador de densidad se tiene

$$\text{Tr}'\{\delta\hat{\rho}(-k_B(\ln \hat{\rho} + 1) - \alpha_0)\} = 0, \quad (2.9)$$

dado que la variación es arbitraria, el operador que maximiza la entropía debe cumplir

$$-k_B(\ln \hat{\rho} + 1) - \alpha_0 = 0 \quad (2.10)$$

despejando se obtiene

$$\hat{\rho} = e^{-\frac{\alpha_0}{k_B}} \hat{\mathbb{I}} \quad (2.11)$$

donde $\hat{\mathbb{I}}$ representa el operador identidad en Ω_{mc} .

Al sustituir este operador en la condición de normalización se obtiene que $e^{-\frac{\alpha_0}{k_B}} = \frac{1}{\dim \mathcal{H}_{mc}}$, donde \mathcal{H}_{can} es el subespacio de Hilbert microcanónico expandido por todos los estados propios de la energía cuyo valor de la energía E_n se encuentre en Ω_{mc} y $\dim \mathcal{H}_{mc}$ es la dimensión del subespacio.

Con todo lo anterior el operador de equilibrio del ensemble microcanónico se puede escribir como

$$\hat{\rho}^{mc} = \frac{1}{\dim \mathcal{H}_{mc}} \sum_{E_n \in \Omega_{can}} |E_n\rangle \langle E_n| \quad (2.12)$$

2.3. Ensemble canónico

Consideremos ahora un sistema que intercambia energía con un baño térmico a temperatura T . El sistema tiene fluctuaciones en la energía pero el equilibrio implica que su promedio es constante e igual a E , entonces las restricciones son

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1 \quad (2.13)$$

y

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{H}\} = E. \quad (2.14)$$

Buscaremos ahora el operador de densidad de equilibrio canónico, que maximiza la entropía bajo las restricciones 2.13,2.14, denotaremos a este operador como $\hat{\rho}^{can}$. Empleamos para ello dos multiplicadores de Lagrange α_0 y α_1 ,

$$\delta(S[\hat{\rho}] - \alpha_0(\text{Tr}\{\hat{\rho}\} - 1) - \alpha_1(\text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{H}\} - E)) = 0. \quad (2.15)$$

Sustituyendo la expresión de la entropía 2.5 y realizando la variación con respecto al operador de densidad se tiene

$$\text{Tr}\{\delta\hat{\rho}(-k_B(\ln\hat{\rho}+1)-\alpha_0-\alpha_1\hat{H})\}=0, \quad (2.16)$$

puesto que la variación es arbitraria

$$-k_B(\ln\hat{\rho}+1)-\alpha_0-\alpha_1\hat{H}=0, \quad (2.17)$$

despejando

$$\hat{\rho}=e^{-\frac{1}{k_B}(k_B+\alpha_0)}e^{-\frac{\alpha_1}{k_B}\hat{H}}, \quad (2.18)$$

sustituyendo en la restricción de normalización se obtiene que $e^{-\frac{1}{k_B}(k_B+\alpha_0)}=\frac{1}{Z}$, donde Z es llamada la función de partición $Z=\text{Tr}\{e^{-\frac{\alpha_1}{k_B}\hat{H}}\}$.

Para determinar el multiplicador α_1 se multiplica la ecuación 2.17 por $\hat{\rho}$ y se toma la traza a cada término

$$-(k_B+\alpha_0)-\alpha_1E+S(\hat{\rho})=0 \quad (2.19)$$

$$-k_B\ln Z-\alpha_1E+S(\hat{\rho})=0. \quad (2.20)$$

Recordando que para un sistema a temperatura constante y número de partículas constantes la representación termodinámica natural es la de Helmholtz, en la cual la relación fundamental es $F=F(T,N)$; la energía libre de Helmholtz satisface la relación: $F-E+TS=0$ [11]. La comparación con la ecuación 2.20 sugiere la identificación $\alpha_1=\frac{1}{T}$ y $F=-k_B\ln Z$.

El operador de densidad en el ensemble canónico es

$$\hat{\rho}^{can} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}, \quad (2.21)$$

donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Es conveniente hacer una aclaración sobre las diferencias en las fluctuaciones en la energía entre los dos ensembles presentados. En el caso del ensemble microcanónico el sistema solo puede acceder a los estados en la capa de energía definida por Ω_{can} . En cambio en el ensemble canónico el sistema puede acceder a todos los estados de energía E_n , pero la probabilidad de que acceda a cada uno está pesada por el factor de Boltzmann $e^{-\beta E_n}$.

2.4. Equilibrio térmico macroscópico

Para un sistema cuántico en un estado puro es necesario considerar dos definiciones de equilibrio, una dada por los valores de los observables macroscópicos y otra definida a través de los valores de observables microscópicos locales. Presentaremos brevemente estas definiciones dadas en [8, 9]. Veamos primero la definición de equilibrio térmico macroscópico MATE.

Consideremos nuevamente un sistema cuántico cerrado, con una energía E . Sea \mathcal{H} el espacio de Hilbert del sistema total y \hat{H} su Hamiltoniano. Como en el ensemble microcanónico, consideremos la capa de energía Ω_{can} y el subespacio \mathcal{H}_{can} que define. Consideremos además un conjunto de observables macroscópicos asociados a operadores que conmutan $\{M_i\}$ con valores propios ν_i . Dado un conjunto de valores propios $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_N)$ se define un macro espacio $\mathcal{H}_\nu \subset \mathcal{H}_{can}$. Goldstein [8] muestra que de todos los macroespacios posibles existe uno, el cual llama subespacio de equilibrio \mathcal{H}_{eq} tal que

$$\frac{\dim(\mathcal{H}_{can})}{\dim(\mathcal{H}_{eq})} \approx 1 \quad (2.22)$$

Si un estado $\hat{\rho}$ se encuentra dentro de este espacio \mathcal{H}_{eq} se dice entonces que esta en MATE. Que se encuentre en este espacio implica que los valores esperados de los observables macroscópicos son muy cercanos a los valores predichos por el ensemble microcanónico, es decir

$$\langle \psi | O | \psi \rangle \approx \langle O \rangle_{mic} = \text{Tr}\{\hat{\rho}_{can}\} \quad (2.23)$$

Esto significa que si se realiza una sola medición de una variable macroscópica es muy probable que el valor medido coincida con el valor de equilibrio, aunque el operador de densidad del estado no se acerque al operador de densidad microcanónico.

2.5. Equilibrio térmico microscópico

El concepto de equilibrio microscópico esta basado en subsistemas. Para la descripción del subsistema se hace uso del concepto de traza reducida, que consiste en ignorar la información del complemento de un sistema bipartido cerrado $S_{AB} = A \cup B$, es decir si la matriz de densidad completo es $\hat{\rho}_{AB}$, entonces el subsistema se describe a través de la matriz reducida

$$\hat{\rho}_A(t) = \text{Tr}_B\{\hat{\rho}_{AB}\}, \quad (2.24)$$

donde Tr_B indica la traza sobre todos los grados de libertad del complemento B .

De manera más precisa se dice que el estado $\hat{\rho}_{AB}$ de un sistema está en equilibrio térmico microscópico MITE si se cumple que la matriz de densidad reducida de un subsistema A es aproximadamente igual a la matriz de densidad reducida del ensemble microcanónico

$$\hat{\rho}_A \approx \hat{\rho}_A^{mic}. \quad (2.25)$$

A diferencia del caso de MATE, aquí la matriz de densidad reducida si puede ser una matriz mezcla, y esto se debe al entrelazamiento cuántico entre el sistema y su comple-

2.5. Equilibrio térmico microscópico

mento, es aquí donde esta definición no tiene contra parte clásica pues el fenómeno de entrelazamiento es puramente cuántico.

Si el sistema es lo suficientemente pequeño comparado con el resto del sistema entonces se cumplirá también que

$$\hat{\rho}_A \approx \hat{\rho}_A^{can}, \quad (2.26)$$

donde $\hat{\rho}_A^{can}$ es la matriz de densidad canónica reducida con un valor adecuado de β

Existe entonces una longitud l_0 para el tamaño del subsistema A en la cual cualquier subsistema de tamaño menor cumplirá con 2.26.

Capítulo 3

Entrelazamiento cuántico

Los sistemas cuánticos muestran propiedades ajenas para los sistemas clásicos tales como la superposición de estados cuánticos, la interferencia o el tunelamiento, efectos que pueden ser observados incluso en sistemas cuánticos de una partícula. Las correlaciones agregan una diferencia fundamental entre sistemas clásicos y cuánticos. Mientras que las correlaciones en sistemas clásicos pueden ser descritas en términos de probabilidades clásicas, en sistemas cuánticos esto no es verdad.

En los inicios del desarrollo de la mecánica cuántica, alrededor de la década de 1920, se presentó una de las discusiones más importantes con respecto a su interpretación, esta se dio entre Albert Einstein y Niels Bohr. El primero dio una interpretación donde, subyacente a las probabilidades que aparecen en las ecuaciones de la mecánica cuántica, existen variables subcuánticas o variables ocultas, que permitirán de algún modo establecer una descripción determinista del mundo cuántico. Por este motivo Einstein siempre consideró que la mecánica cuántica era una teoría incompleta. Por el contrario, Bohr consideraba que las probabilidades eran el aspecto intrínsecamente predominante en escalas atómicas.

Bajo la interpretación de Einstein, en 1935 junto con Podolsky y Rosen, publica un artículo que sería conocido posteriormente como la paradoja EPR [13], en el cual se pretende demostrar que el principio de incertidumbre de Heisenberg presenta excepciones en su aplicación y que por tanto, la mecánica cuántica era una teoría incompleta.

En el artículo se supone que si se tienen dos partículas que se dispersan luego de una colisión y viajan en direcciones opuestas muy lejanas y se realizan mediciones sobre una de ellas, es posible obtener información de las mediciones de la otra partícula indirectamente, teniendo así información de la otra sin realizar sobre ella ninguna medición.

No es posible explicar este fenómeno si se supone a la teoría cuántica como una teoría local, en el sentido de que si algo que ocurre en un lugar, no debería afectar a cualquier cosa que suceda en un lugar lejano, a no ser que se envíe una señal de un lugar a otro (con una velocidad máxima igual a la de la luz) que pueda producir un cambio en este último. Si se supone, por el contrario, una teoría no local, esto implica que ambas partículas se encuentran vinculadas. A este vínculo entre las partículas se le llamó entrelazamiento.

El entrelazamiento expresa entonces la no localidad inherente entre las partes de un sistema descrito por la mecánica cuántica. John Bell derivó un conjunto de desigualdades para mediciones de correlaciones que toda teoría local debe obedecer[14]. Una gran cantidad de experimentos realizados con sistemas cuánticos violan dichas desigualdades y por tanto muestran que el entrelazamiento es una realidad física, aunque existen estados que no violan las desigualdades de Bell y aun así estos se encuentran entrelazados. La violación de las desigualdades de Bell revela únicamente el hecho que el sistema se encuentra entrelazado pero no indica como cuantificar que tan entrelazado está.

Recientemente, ha crecido el interés por entender el entrelazamiento en sistemas cuánticos de muchos cuerpos, ya que se ha encontrado un gran impacto en diversas áreas. En materia condensada, por ejemplo, el comportamiento del escalamiento de la entropía de entrelazamiento permite distinguir entre fases que no pueden ser caracterizadas por propiedades de simetría, tales como estados topológicos de la materia [15]. La entropía de entrelazamiento puede ser usada también para probar criticalidad cuántica [16] y dinámica fuera de equilibrio [17][18].

3.1. Entrelazamiento bipartido

Existe una gran cantidad de medidas empleadas para determinar el entrelazamiento, las cuales pueden separarse principalmente en medidas de entrelazamiento bipartido y

multipartido[19]. En este trabajo nos concentraremos en el entrelazamiento bipartido de sistemas puros.

Un sistema bipartido es un sistema conformado por dos subsistemas, A y B , tal que el sistema completo es $S_{AB} = A \cup B$. Cada uno de los subsistemas tiene asociado un espacio de Hilbert \mathcal{H}_A y \mathcal{H}_B respectivamente. Por tanto el espacio de Hilbert asociado al sistema completo S_{AB} esta dado por el producto tensorial $\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Cualquier estado puro $|\psi_{AB}\rangle$ que describe al sistema completo en el espacio de Hilbert \mathcal{H}_S es llamado separable si y sólo si puede ser escrito como un producto de dos vectores correspondientes a los espacios de Hilbert de los subsistemas, es decir,

$$|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle. \quad (3.1)$$

Cuando esta separación no es posible, se dice que el estado está entrelazado. En general, si el estado es escrito en una base formada por el productos de las bases de los subsistemas $|e_A^i\rangle \otimes |e_B^j\rangle$, es decir, se escribe como

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=0}^{d-1} \sum_{j=0}^{c-1} D_{ij} |e_A^i\rangle \otimes |e_B^j\rangle, \quad (3.2)$$

donde d es la dimensión del espacio de \mathcal{H}_A y c la del espacio \mathcal{H}_B , el estado es escrito como un producto si y solo si la matriz D_{ij} es de rango 1¹.

Una manera de determinar si un sistema bipartido se encuentra entrelazado o no es a través las matrices de densidad reducidas de los subsistemas A y B . Como se menciona en el capítulo anterior hay que realizar la operación de traza parcial sobre todos los grados de libertad de B y A , respectivamente

$$\hat{\rho}_A(t) = \text{Tr}_B\{\hat{\rho}(t)\}, \quad (3.3)$$

¹El rango de una matriz se define como el número de columnas linealmente independientes.

$$\hat{\rho}_B(t) = \text{Tr}_A\{\hat{\rho}(t)\}. \quad (3.4)$$

Al obtener la traza, la información del complemento del subsistema es irrelevante ya que no se encuentra disponible. Se tienen entonces dos casos, que la matriz de densidad reducida sea pura o que sea una mezcla.

Para un estado puro, la matriz de densidad es un proyector, es decir, $\text{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1$ mientras que para una mezcla $\text{Tr}\{\hat{\rho}^2\} < 1$.

Si el operador de densidad reducido del subsistema A resulta ser puro, entonces el sistema completo no se encuentra entrelazado, si por el contrario el operador representa un estado mezclado, el sistema completo se encontrará entrelazado.

Para mostrar esto último, consideremos un sistema bipartido puro no entrelazado, es decir

$$\rho_{AB} = |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle \langle\psi_A| \langle\psi_B|, \quad (3.5)$$

tomemos la base de estados $|e_B^n\rangle$ del subsistema B y realizemos la traza parcial,

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B\{\rho_{AB}\} = \sum_n \langle e_B^n | \psi_B \rangle \langle e_B^n | \psi_B \rangle |\psi_A\rangle \langle\psi_A|, \quad (3.6)$$

$$\hat{\rho}_A = |\psi_A\rangle \langle\psi_A|. \quad (3.7)$$

Por lo hemos llegado a que el estado del subsistema $\hat{\rho}_A$ es puro. Esto implica que si la matriz de densidad reducida no es pura, entonces el estado completo está entrelazado. Como se puede observar el entrelazamiento está relacionado directamente con el grado de pureza del subsistema, por ello resulta útil emplear una medida de entrelazamiento que sea función de la pureza. Una medida que cumple esta relación y que ha ganado importancia rápidamente en la física de materia condensada es la entropía de Rényi, debido a que puede ser usada para extraer información del espectro de entrelazamiento lo cual da un conocimiento más completo sobre el estado cuántico [20]. La definición general de la entropía de orden n de Rényi es

$$S_n(\hat{\rho}_A) = \frac{1}{1-n} \ln(\text{Tr}\{\hat{\rho}_A^n\}). \quad (3.8)$$

De la ecuación 3.8, podemos ver la entropía de Rényi de segundo orden (n=2) y la pureza están relacionadas por

$$S_2(\hat{\rho}_A) = -\ln(\text{Tr}\{\hat{\rho}_A^2\}). \quad (3.9)$$

Otra de las motivaciones de usar esta entropía es que se ha mostrado que puede ser medida experimentalmente en sistemas de bosones [21, 22], teniendo así una forma directa de comparar los resultados teóricos con experimentos.

Capítulo 4

Hamiltoniano de Bose Hubbard

El sistema a estudiar corresponde a un conjunto de seis bosones, inmersos en una red óptica de seis sitios, con interacción sólo entre partículas dentro del mismo sitio de la red. En esta sección se deriva el Hamiltoniano del sistema especificando las aproximaciones usadas, también se describen brevemente algunos resultados experimentales para este sistema.

Para obtener el Hamiltoniano de Bose Hubbard, se parte de la expresión general en segunda cuantización para un sistema de bosones con interacción mutua [23]

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{x}^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{op}(\vec{x}) \right) \hat{\psi}(\vec{x}) \\ & + \frac{1}{2} \int d\vec{x}^3 d\vec{x}'^3 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}') U(\vec{x} - \vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}'), \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})$ y $\hat{\psi}(\vec{x})$ son los operadores de campo para bosones, que crean y aniquilan partículas en la posición \vec{x} y cuyas reglas de conmutación son

$$[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi(\vec{x})] = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}) \quad (4.2)$$

$$[\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{x})] = [\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x})] = 0. \quad (4.3)$$

El primer término está asociado a la energía de cinética del sistema y al potencial de confinamiento $V_{op}(\vec{x})$, donde el potencial es generado experimentalmente por la interferencia de haces de luz contrapropagantes [24], que se puede expresar como $V_{op}(\vec{x}) = \sum_i^3 V_{op} \sin^2(k_l x_i)$, con $k_l = \frac{2\pi}{\lambda}$ y λ la longitud de onda del haz de luz. La amplitud V_{op} es usualmente expresada en unidades de la energía de “recoil” $E_r = \frac{\hbar k_l^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a_{red}^2}$, donde $a_{red} = \lambda$. La energía de “recoil” está dada por el cambio en la energía cinética de los átomos asociados con la emisión o absorción de un fotón con momento k_l [24].

El segundo término del Hamiltoniano corresponde a la interacción entre las partículas. Si se considera un gas diluido y a bajas temperaturas, el potencial es aproximado por un potencial de contacto [25].

$$U(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (4.4)$$

donde a_s representa la longitud de dispersión de onda s .

Dado que el potencial externo de atrapamiento es periódico, los campos pueden ser expandidos en términos de funciones de Bloch $\phi_{nk}(\vec{x})$ las cuales forman una base, y tienen la misma periodicidad de la red, donde n etiqueta el índice de la banda de energía y $k = |\vec{k}|$ el momento correspondiente. Se introduce la base de Wannier

$$W_n(\vec{x} - \vec{x}_j) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k} \in BZ} \phi_{nk}(\vec{x}) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_j)} \quad (4.5)$$

en términos de la base de Bloch, donde \vec{x}_j es la posición del sitio j -ésimo de la red, BZ representa la zona de Brillouin y V el volumen de las celdas de la red.

Si la brecha de energía entre la primera y segunda banda de energía es más grande que la escala de energía de las interacciones y de las fluctuaciones térmicas, se puede considerar

solo la contribución de la primer banda, es decir $n = 0$ [26]. Bajo esta aproximación los operadores de campo son:

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) = \sum_{j=1}^M W_0^*(\vec{x} - \vec{x}_j) \hat{b}_j^\dagger, \quad (4.6)$$

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \sum_{j=1}^M W_0(\vec{x} - \vec{x}_j) \hat{b}_j, \quad (4.7)$$

donde $\vec{x}_j = j\vec{a}_{red}$, \hat{b}_j^\dagger y \hat{b}_j representan operadores de creación y aniquilación en el sitio j de la red y M el número total de sitios. En adelante usaremos la expresión $W(\vec{x})$ sin subíndice para referirnos a la función de Wannier con $n = 0$.

Usando las expansiones de $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})$ y $\hat{\psi}(\vec{x})$ en 4.1 tenemos que:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c) + \frac{1}{2} \sum_{ijlm} U_{ijlm} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_m, \quad (4.8)$$

donde

$$J_{ij} = \int d\vec{x}^3 W^*(\vec{x} - \vec{x}_i) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{op}(\vec{x}) \right) W(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad (4.9)$$

y

$$U_{ijlm} = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d\vec{x}^3 W(\vec{x} - \vec{x}_i) W(\vec{x} - \vec{x}_j) W(\vec{x} - \vec{x}_l) W(\vec{x} - \vec{x}_m). \quad (4.10)$$

Como se prueba en la referencia [27] las funciones de Wannier decaen exponencialmente y son ortogonales tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x}^3 W^*(\vec{x} - \vec{x}_i) W(\vec{x} - \vec{x}_j) = \delta_{x_i x_j} \quad (4.11)$$

El valor de los parámetros anteriores, J_{ij} y U_{ijlm} se puede obtener en su forma asintótica

empleando la relación de ortogonalidad y la aproximación de pozos profundos, es decir, $V_{op} > 6E_r$. Bajo esta aproximación, el potencial puede aproximarse por un potencial armónico cercano a $x = 0$, y las funciones de Wannier como funciones Gaussianas

$$V_{op} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{a_{red}}\right) \approx \frac{V_{op}\pi^2}{a_{red}^2} x^2 \quad (4.12)$$

para cada dirección

$$W(x) = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad (4.13)$$

donde $x_0 = \left(\frac{\hbar^2 a_{red}^2}{2\pi^2 m V}\right)$.

Con estas expresiones se obtiene que el término de interacción U_{ijlm} y la amplitud de salto J_{ij} tienen la forma asintótica aproximada

$$U_{ijlm} = \begin{cases} \sqrt{8\pi} \frac{a_s E_r}{a_{red}} \left(\frac{V_{op}}{E_r}\right)^{\frac{3}{4}} \equiv U & \text{si } i = j = l = m \\ 0, & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (4.14)$$

$$J_{ij} \approx \begin{cases} \frac{4E_r}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_{op}}{E_r}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-2\sqrt{\frac{V_{op}}{E_r}}} \equiv J, & \text{si } j \in \Omega_i \\ 0, & \text{si } j \notin \Omega_i \end{cases} \quad (4.15)$$

donde Ω_i es el conjunto de primeros vecinos de i .

Notamos entonces que el Hamiltoniano depende simplemente de dos parámetros, U y J , y se escribe como

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^M \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (4.16)$$

donde $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ y $\langle ij \rangle$ denota que la suma se realiza sobre sitios vecinos de la red.

4.1. Las fases superfluida y aislante Mott

Este Hamiltoniano es el modelo más simple de bosones en interacción en una red óptica, fue introducido por Fisher y colaboradores en 1989 [10] donde mostraron que este sistema presenta una transición de fases entre un estado aislante Mott, y uno superfluido. Esta transición fue predicha por Fisher empleando técnicas de campo medio y la teoría de transiciones de fase de segundo orden de Landau.

En la fase aislante, la interacción hace que las partículas se localicen en los sitios de la red y por el contrario, en el estado superfluido, las partículas están deslocalizadas sobre todos los sitios de la red y pueden moverse libremente por la red. En lo siguiente describiremos las características de estas dos fases y presentaremos algunos resultados del diagrama de fases.

4.1.1. $\frac{J}{U} \ll 1$: Fase Aislante Mott

Si la interacción entre las partículas en los sitios de la red es dominante $\frac{J}{U} \ll 1$ y el número de partículas N es conmensurable con el número de sitios M , el estado base es un aislante Mott. El caso extremo es cuando el coeficiente $J = 0$, esto es el Aislante Mott ideal. El estado es un producto de estado de Fock con el mismo número de partículas n_0 en cada sitio

$$|\phi_{AM}\rangle = \prod_{i=1}^M (\hat{b}_i^\dagger)^{n_0} |0\rangle \quad (4.17)$$

Este estado no tiene fluctuaciones en el número de ocupación, todos los sitios tiene un número n_0 de partículas. Algunas características del estado Mott son: el parámetro de orden \hat{b}_i es nulo; hay una brecha de energía en el espectro de excitaciones, debido a que la excitación mas baja es la creación de un par partícula-hueco (correspondiente en energía $n_0 U$); tiene una compresibilidad nula y las fluctuaciones en el número de partículas por sitios son suprimidas.

4.1.2. $\frac{J}{U} \gg 1$: Fase superfluida

Si el término de energía cinética o salto J es dominante, el sistema alcanza una fase superfluida, en el cual el estado de una sola partícula es deslocalizado por toda la red. Para el caso ideal de interacción nula ($\frac{U}{J} = 0$) el estado base de el sistema de muchas partículas es

$$|\phi_{SF}\rangle = \left(\sum_{i=1}^M \hat{b}_i^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (4.18)$$

En este estado, la distribución de densidad local $P(n)$ es una distribución binomial en el limite de $N \gg 1$ [28]

$$P(n) = \frac{e^{-\frac{N}{M}}}{N} \left(\frac{N}{M} \right)^n. \quad (4.19)$$

Como una comparación, en el estado Mott tenemos que la distribución es $P(n) = \delta_{n,n_0}$. La presencia de fluctuaciones en la densidad local es una de las características de la fase superfluida, no solo en el caso ideal sin interacción. Otras de sus características incluyen; ausencia de una brecha de energía en el espectro de excitaciones, compresibilidad finita y parámetro de orden finito $\langle \hat{b}_i \rangle = 0$

Posterior al trabajo de Fisher, Jaksch [29] presentó una propuesta para llevar a cabo experimentalmente el sistema empleando sistemas de átomos fríos en redes ópticas, que le permitían calcular los parámetros J y U dados anteriormente en términos de los parámetros de la red. Basado en esta propuesta experimental se daría la comprobación experimental de la transición cuántica de fase superfluido aislante Mott por Greiner en 2002 [1].

Observaron que el sistema transita de una fase en la cual los átomos están dispersos por la red a una fase en donde los bosones están localizados en cada uno de los sitios de la red. Esto fue determinado a través de un patrón de interferencia, cuando la fase macroscópica es un estado Mott se tiene máxima incertidumbre en la distribución de momentos y los picos de interferencia no son visibles (figura 4.1).

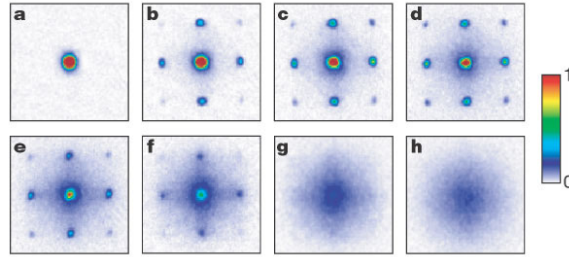


Figura 4.1: Imágenes de absorción de múltiples patrones de interferencia de las ondas de materia, después de ser liberados de potenciales de profundidad a) $0E_r$, b) $3E_r$, c) $7E_r$, d) $10E_r$, e) $13E_r$, f) $14E_r$, g) $16E_r$, y h) $20E_r$ [1].

Estos avances contribuyeron a que el sistema atrajera a un gran número de investigaciones tanto experimentalmente, teóricamente y numéricamente. Aunque estos enfoques se concentraron primeramente en las propiedades del sistema en equilibrio en cada una de las fases [24, 30].

Un tema que posteriormente llamó la atención es la dinámica del sistema cuando los parámetros del Hamiltoniano dependen del tiempo, lo cual lleva a interesantes dinámicas fuera de equilibrio [31]. Esta es un área que se ha vuelto muy activa, particularmente en lo que se conoce como protocolos *quench* cuánticos. Como ya se mencionó en la introducción, este protocolo consiste en iniciar al sistema en estados propios de un Hamiltoniano inicial y dejar que evolucione el estado bajo un Hamiltoniano diferente proveniente de un cambio repentino en el primero. Es así que este protocolo asegura que el sistema parte de un estado inicial no estacionario y estudia su dinámica. Como también se mencionó en la introducción, una pregunta de interés es saber bajo qué condiciones los estados estacionarios del sistema corresponden a estados de equilibrio.

En la literatura reciente se pueden encontrar un gran número de trabajos en donde se plantea esta pregunta en diversos sistemas incluyendo el hamiltoniano de Bose Hubbard cada uno teniendo un enfoque diferente de equilibrio y analizando diferentes observables.

El sistema que se estudia teóricamente en esta tesis (un sistema finito de seis bosones en una red de seis sitio) fue desarrollado experimentalmente en 2017 por Kaufman y colaboradores [22], donde estudiaron un gas de átomos de ^{87}Rb atrapados en un red óptica periódica, el sistema fue colocado inicialmente en un estado con una partícula por sitio.

Posteriormente se cambiaron los parámetros de tunelamiento e interacción de las partículas logrando así el protocolo *quench*, el sistema se dejó evolucionar bajo el nuevo Hamiltoniano y se realizaron mediciones de la pureza y con ello, de la entropía de entrelazamiento de Renyi de segundo orden de los subsistemas. Kaufman llega a la conclusión que la entropía de entrelazamiento tiene una saturación y que dicha saturación implica que el subsistema ha alcanzado un estado estacionario de equilibrio, aunque solo considera variaciones de los parámetros $\frac{J}{U}$ en la región superfluida es decir valores grandes, 0.64 y 2.8. Para estos valores se concluye que para tiempos largos el sistema alcanzaba un estado de equilibrio, a pesar de ser un sistema pequeño de solo seis partículas y que la matriz de densidad del sistema se asemeja a las matrices de densidad reducidas del ensemble canónico en equilibrio.

Estudios similares se han realizado con condiciones iniciales y parámetros del hamiltoniano diferentes. Uno de ellos es el realizado por S. Trotzky en 2011 [32]. En su estudio considera un gas inmerso en una red óptica y con interacción fuerte entre partículas dentro del mismo sitio de la red, por lo cual su sistema puede ser también descrito por el Hamiltoniano de Bose Hubbard. El estado inicial del que parten es un patrón de densidad con sitios alternativamente ocupados, y miden la dinámica emergente después de cambiar parámetros del Hamiltoniano en términos de densidad cuasi local, corrientes y coherencias. Para un amplio rango de valores de interacción encuentran una rápida relajación a estados con valores estacionarios de los observables medidos.

Además de los desarrollos experimentales se ha estudiado la dinámica del sistema empleando técnicas numéricas como la diagonalización exacta y grupo de renormalización de la matriz de densidad dependiente del tiempo. El *quench* se considera en tres tipos; partiendo de un Hamiltoniano con $\frac{J}{U} = 0$ y cambiando a un valor del parámetro donde $\frac{J}{U} \gg 1$ es decir alejado del punto crítico de transición del sistema en la región considerada superfluida [33]; el segundo esquema es partir de un Hamiltoniano $\frac{J}{U} = \infty$ y realizar el cambio a un parámetro $\frac{J}{U} \ll 1$ es decir partir de un estado en la región superfluida y llegar a un estado en la fase aislante [34].

En este trabajo emplearemos un esquema de diagonalización exacta que nos permite ir de un estado Mott ideal a un estado también Mott con un parámetro J finito y también a regiones superfluidas donde $\frac{J}{U} \gg 1$. Estudiaremos el sistema para un rango amplio del

4.1. Las fases superfluida y aislante Mott

parámetro adimensional $\frac{J}{U}$ determinando la relación entre la dinámica de los observables locales y el crecimiento de la entropía de entrelazamiento y de sus fluctuaciones, también extenderemos el estudio realizado por Kaufman para estados diferentes al estado base en la fase Mott.

Capítulo 5

Protocolo *quench*

En este capítulo se desarrolla el protocolo *quench* empleado para estudiar la dinámica del sistema definido en el capítulo anterior. El protocolo parte de estados iniciales propios del Hamiltoniano de Bose-Hubbard con $J = 0$, es decir en estados aislante Mott ideales. Se emplea la base de número de ocupación para la descripción de los operadores y del estado del sistema. Se especifica el método usado para la construcción de esta base y de los operadores de interés, Hamiltoniano, número de partículas, e interacción.

5.1. Construcción y diagonalización del Hamiltoniano

El sistema estudiado corresponde a un sistema de seis bosones en una red de seis sitios, cuyo Hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{J}{U} \left(\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2 + \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_3 + \hat{b}_3^\dagger \hat{b}_4 + \hat{b}_4^\dagger \hat{b}_5 + \hat{b}_5^\dagger \hat{b}_6 + h.c. \right) + \frac{1}{2} \sum_i^6 \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (5.1)$$

Se ha dividido por el factor de U todo el Hamiltoniano anterior y redefinido $\hat{H} \equiv \frac{\hat{H}}{U}$ y $J \equiv \frac{J}{U}$, para tener un Hamiltoniano sin dimensiones que facilite los cálculos numéricos y su análisis, ya que de esta forma sólo se tiene a J como parámetro de control. La base

5.1. Construcción y diagonalización del Hamiltoniano

elegida para construir los elementos de matriz de los operadores, es la base de estados propios del operador de número

$$\hat{n}_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_6\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_6\rangle, \quad (5.2)$$

donde se debe satisfacer $\sum_{i=1}^6 n_i = 6$, esto para que se conserve el número de partículas.

El número de elementos de la base, bajo la restricción de la conservación del número de partículas, corresponde al número de formas de acomodar en M sitios N partículas, por lo tanto la dimensión del espacio es $D = \frac{(N+M-1)!}{N!(M-1)!}$.

Para construir los elementos de la base de número se parte por definir el estado vacío $|0, 0, 0, 0, 0, 0\rangle$ como aquel con cero partículas en cada sitios, y aplicar los operadores de creación sobre este estado

$$|n_1, \dots, n_6\rangle = \frac{(\hat{b}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{b}_6^\dagger)^{n_6}}{\sqrt{n_1! \dots n_6!}} |0, 0, 0, 0, 0, 0\rangle \quad (5.3)$$

Así el estado $|n_1, \dots, n_6\rangle$ representa un estado con n_i partículas en el sitio i , siempre que se satisfaga la conservación del número de partículas.

Recordemos la acción de los operadores de creación y aniquilación sobre $|n_1, \dots, n_6\rangle$

$$\hat{b}_i^\dagger |n_1, \dots, n_6\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i+1, \dots, n_6\rangle, \quad (5.4a)$$

$$\hat{b}_i |n_1, \dots, n_6\rangle = \sqrt{n_i - 1} |n_1, \dots, n_i-1, \dots, n_6\rangle, \quad (5.4b)$$

con la relación de ortogonalidad $\langle n_1, \dots, n_6 | m_1, \dots, m_6 \rangle = \delta_{n_1 m_1} \dots \delta_{n_6 m_6}$

Cada uno de los elementos de la base puede ser numerado y etiquetado y darle un orden lexicográfico, donde el criterio para definir el orden es el siguiente: dados dos elementos cualesquiera $|n_1, \dots, n_6\rangle$ y $|m_1, \dots, m_6\rangle$, se compara el primer elemento de izquierda a derecha, es decir n_1 y m_1 , si $n_1 > m_1$ entonces la etiqueta asociada a $|n_1, \dots, n_6\rangle$ sera

mayor que la asociada a $|m_1, \dots, m_6\rangle$ y viceversa, en caso de que $n_1 = m_1$ se hace la comparación con los siguientes elementos n_2 y m_2 , este procedimiento se sigue para todos los elementos de la base. De esta forma el primer elemento de la base con la etiqueta $l = 1$ sera $|6, 0, 0, 0, 0, 0\rangle$ y el último elemento con la etiqueta $l = 462$, será $|0, 0, 0, 0, 6\rangle$

Con el orden lexicográfico establecido, construimos los elementos de matriz del operador \hat{n}_i los elementos del operador \hat{N} , y los elementos de matriz del Hamiltoniano \hat{H} es decir,

$$\langle n_1, \dots, n_6 | \hat{n}_i | m_1, \dots, m_6 \rangle = (\hat{n}_i)_{nm}, \quad (5.5a)$$

$$\langle n_1, \dots, n_6 | \hat{N} | m_1, \dots, m_6 \rangle = (\hat{N})_{nm}, \quad (5.5b)$$

$$\langle n_1, \dots, n_6 | \hat{H} | m_1, \dots, m_6 \rangle = (\hat{H})_{nm}, \quad (5.5c)$$

$$(5.5d)$$

donde los índices n y m en los miembros derechos de las igualdades anteriores son dados por el orden explicado anteriormente.

Notamos que la matriz asociada al Hamiltoniano tiene dos componentes, los elementos de matriz de la diagonal corresponden al término de interacción $\frac{1}{2} \sum_i^6 \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$ mientras que los miembros fuera de la diagonal corresponden al término que considera el salto entre sitios vecinos. Además esta matriz será una matriz dispersa, es decir, contendrá una gran cantidad de elementos iguales a cero, esto facilita su construcción pues solo es necesario identificar los elementos diferentes de cero y calcular sus valores.

Una vez obtenida la matriz Hamiltoniana, el siguiente paso fue obtener sus valores y vectores propios, E_n y $|E_n\rangle$, respectivamente, que satisfacen la ecuación

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle. \quad (5.6)$$

Para ello se resolvió de manera exacta la ecuación 5.6, esto se realizó usando un programa escrito en el lenguaje Python 3.0 que hace uso del paquete LAPACK ya instalado en este lenguaje, los códigos de dicho programa se muestran en el apéndice A.

5.2. Evolución del estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$

El espectro de energías del Hamiltoniano 5.1 dado por la ecuación, 5.6, para diferentes valores del parámetro J se puede observar en la figura 5.1. Donde se tiene que al incrementar el valor de J el espectro se vuelve mas disperso, cuando J es pequeño las energías tienden a agruparse alrededor de los niveles de energía del Hamiltoniano de Bose-Hubbard con $J = 0$, donde hay una degeneración para todos los niveles excitados. El espectro tiende a una estructura simétrica alrededor de la energía cero, para valores grandes de J

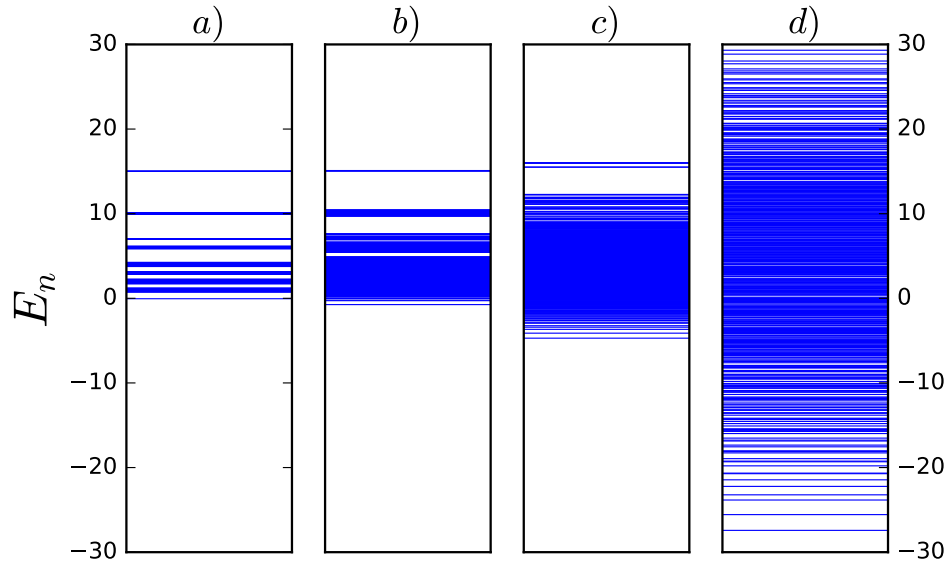


Figura 5.1: Niveles de energía adimensionales ($\frac{E_n}{U}$) para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$

5.2. Evolución del estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$

Se busca ahora la evolución temporal del sistema partiendo de un estado inicial homogéneo de una partícula por sitio. Este estado corresponde al estado base del Hamiltoniano 5.1 con $J = 0$, se deja que el estado evolucione bajo la acción del Hamiltoniano completo con $J \neq 0$.

La dinámica del sistema se obtiene a través de la acción del operador de evolución

temporal

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}t}, \quad (5.7)$$

donde t es la variable temporal sin dimensiones $t = \frac{tU}{\hbar}$.

Dado un estado inicial cualquiera $|\psi(0)\rangle$ el estado a un tiempo arbitrario se obtiene como

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U} |\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle. \quad (5.8)$$

Para obtener numéricamente la acción del operador de evolución temporal sobre el estado inicial, es conveniente escribir primero este en términos de la base de estados propios del Hamiltoniano $\{|E_n\rangle\}$, es decir,

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n C_n |E_n\rangle, \quad (5.9)$$

donde $C_n = \langle E_n | \psi(0) \rangle$. De esta forma el estado al tiempo t es

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} C_n |E_n\rangle. \quad (5.10)$$

Dado que la descripción de los operadores y de los estados se realiza en la base de número, consideramos conveniente reescribir el estado $|\psi(t)\rangle$ en esta base, para ello, basta con aplicar la transformación

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_6} D_{n_1, n_2, \dots, n_6} |n_1, n_2, \dots, n_6\rangle, \quad (5.11)$$

donde $D_{n_1, n_2, \dots, n_6} = \langle n_1, n_2, \dots, n_6 | \psi(t) \rangle = \sum_n e^{-iE_n t} C_n \langle n_1, n_2, \dots, n_6 | E_n \rangle$.

Con los vectores de estado en función del tiempo estamos en posición de obtener la evolución de los valores esperados de los operadores de interés.

5.2.1. Dependencia temporal del número de partículas y energía de interacción para el estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$

Los observables a analizar son el operador de número de partículas, tanto total \hat{N} como por sitio \hat{n}_i , la energía de interacción $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1)$ total y por sitios $\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1)$.

Se calcularon los promedios de estos observables en función del tiempo para diferentes valores del parámetro adimensional J .

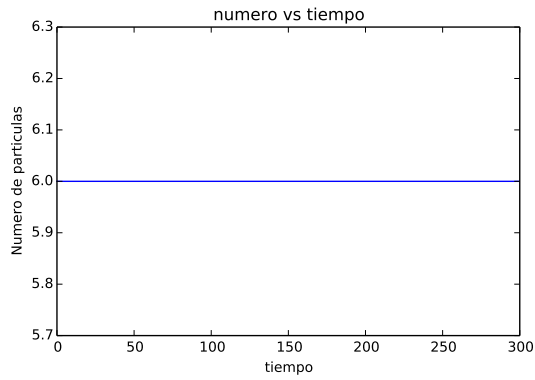


Figura 5.2: Número promedio total de partículas

El valor esperado del número total de partículas se muestra en la figura 5.2. Trivialmente se tiene un valor constante e igual a seis, esto comprueba que el sistema es cerrado y se conserva el número total de partículas durante la evolución unitaria 5.8.

El valor esperado $\langle n_i(t) \rangle$ en función del tiempo del operador de número en los sitios 1, 2 y 3 se muestra en las gráficas 5.3. Se presentan sólo los tres primeros sitios debido a la simetría que existe en el sistema respecto al centro de la red, es decir, la curva para el sitio 4 es idéntica a la curva del sitio 3, la del sitio 5 idéntica a la del sitio 2 y la del sitio 6 a la del sitio 1. Esto se puede explicar teniendo en cuenta que se parte de un estado homogéneo y el parámetro de salto J es el mismo para cada sitio, además de que los sitios que presentan el mismo comportamiento tienen el mismo número de primeros vecinos. Todos los promedios parten del valor inicial uno y oscilan alrededor de este, teniendo una amplitud y frecuencia diferente en las oscilaciones dependiendo del valor de J .

En valores de J pequeños las fluctuaciones son mínimas, esto era de esperarse ya que

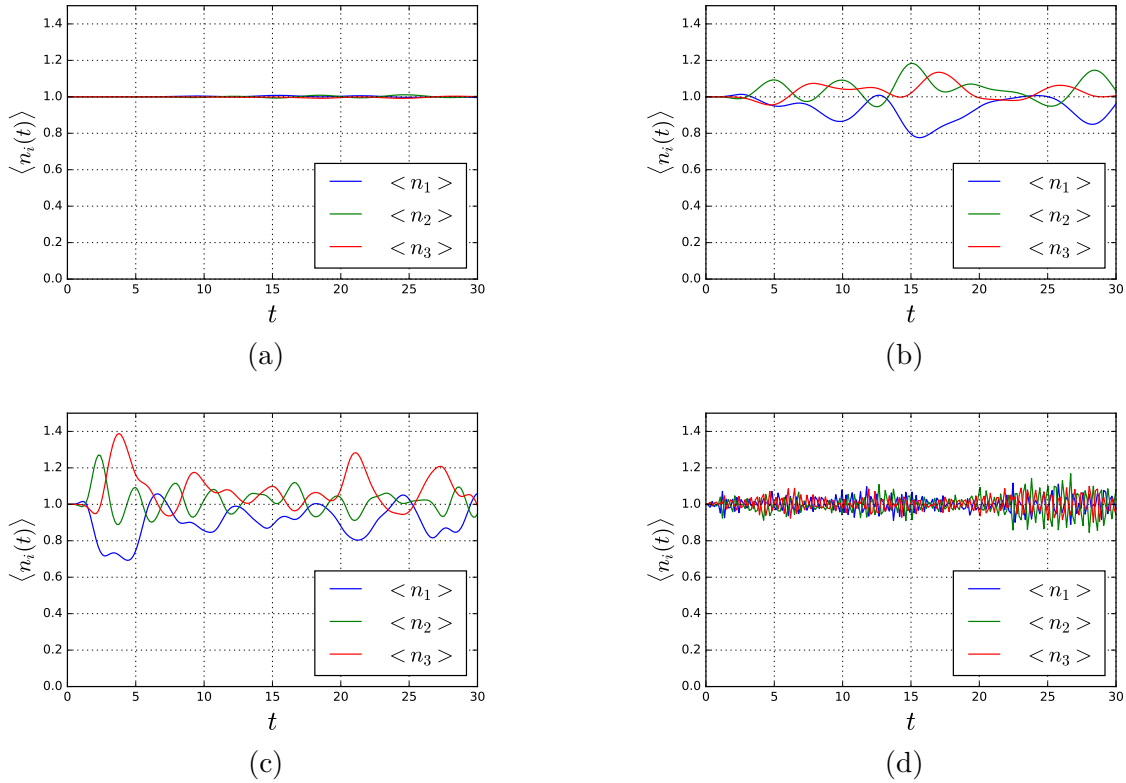


Figura 5.3: Valor esperado del número de partículas por sitio para diferentes valores del parámetro de salto, a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$ en cada una de las gráficas $\langle n_1 \rangle, \langle n_2 \rangle$ y $\langle n_3 \rangle$ representan los valores para el primer segundo y tercer sitio, respectivamente.

la interacción tiende a localizar las partículas, además de que el estado del cual parte el sistema es propio del Hamiltoniano sin interacción por tanto es de esperarse que el estado inicial sea muy parecido al estado base del Hamiltoniano con $J \neq 0$.

Para valores de J grandes, el número de oscilaciones, en el intervalo de tiempo estudiado, es mayor y estas disminuyen conforme disminuye J .

Para cuantificar las fluctuaciones del número partículas promedio en función de J , se calculó la desviación estándar de $\langle n_1 \rangle$, $\langle n_2 \rangle$ y $\langle n_3 \rangle$, definida como

5.2. Evolución del estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle \hat{n}_i(t) \rangle^2 dt - \bar{n}_i^2} \quad (5.12)$$

donde

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle \hat{n}_i(t) \rangle dt \quad (5.13)$$

es el promedio temporal de $\langle n_i \rangle$.

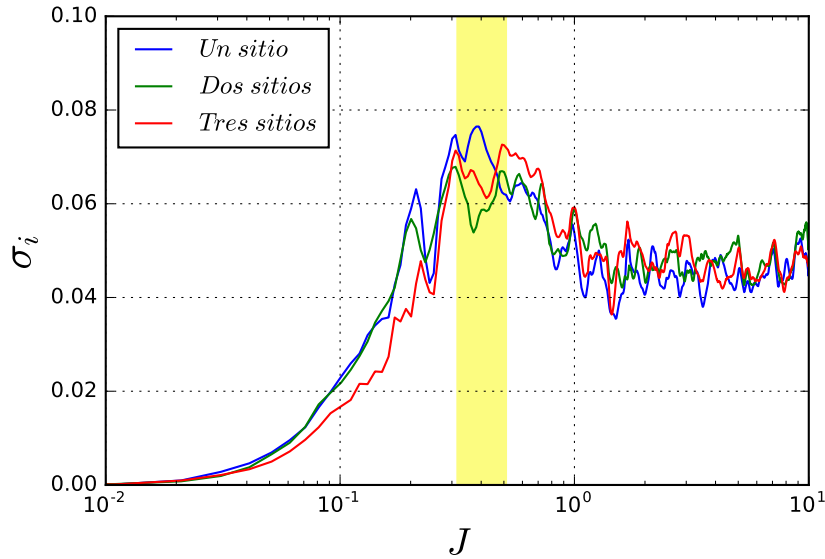


Figura 5.4: Desviación estándar del número de partículas

En la gráfica 5.4 se muestra la desviación estándar, del número de partículas en el sitio 1 (curva azul), en el sitio 2 (curva verde) y en el sitio 3 (curva roja) dada por la ecuación 6.11 tomando un intervalo de tiempo entre datos de $\Delta t_i = 0.1$ un total y con un valor de $\tau = 1000$. Se puede observar que para valores de J pequeños la desviación estándar es muy pequeña incrementando hasta un máximo de aproximadamente 0.07 teniendo este máximo alrededor del intervalo $J \approx 0.25 - 0.3$ lo cual podría indicar que después de dicho intervalo el sistema sufre un cambio significativo en el comportamiento cualitativo de los observables del sistema. También se observa que después de el máximo la desviación

disminuye y tiende a un valor constante alrededor de $0.04 - 0.05$ para valores grandes de J .

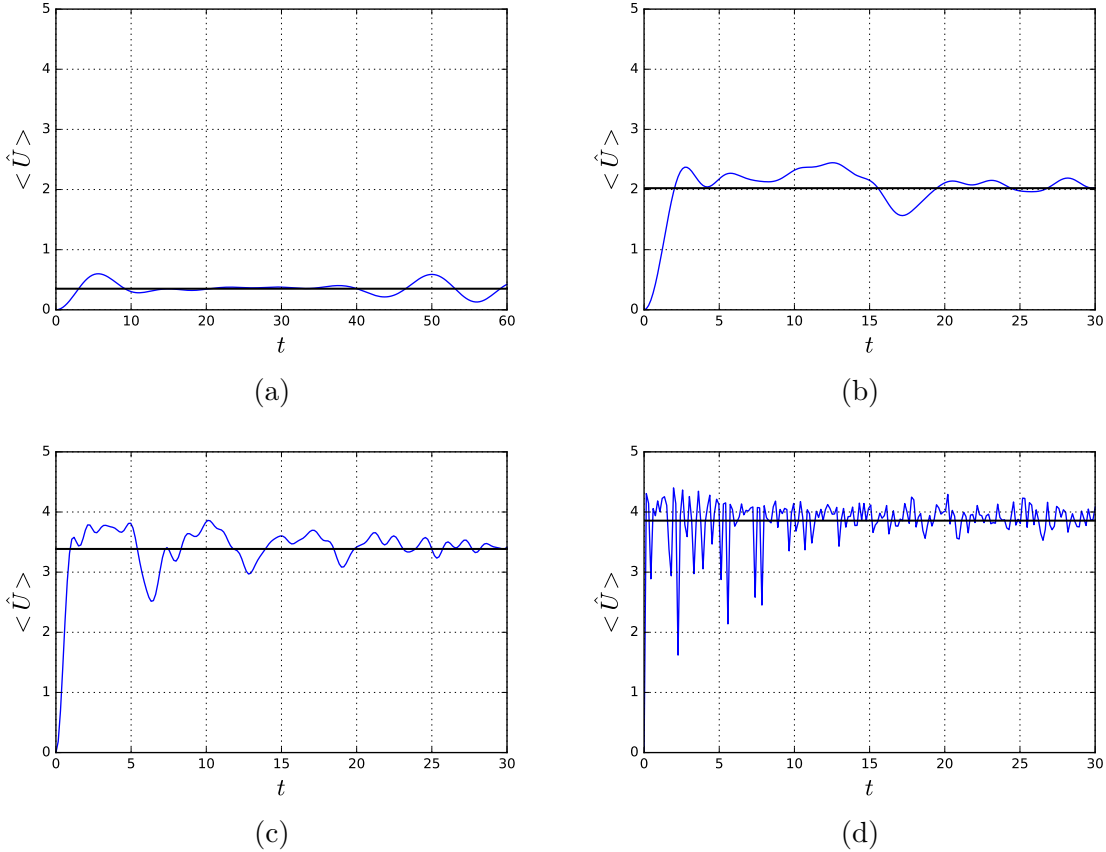


Figura 5.5: Valor esperado de la energía de interacción total para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$

En el caso de la energía de interacción, tanto total (figura 5.5) como por sitio (figura 5.6), se observa que las curvas inician en cero, como era de esperarse, ya que se parte de un estado con una sola partícula por sitio al que corresponde una energía cero. Posteriormente, al aumentar el tiempo, observamos que el valor esperado de la interacción incrementa y oscila alrededor de un valor constante. Tanto el valor de saturación como las fluctuaciones dependen del valor de J . Para valores de J pequeños el valor esperado es menor y se incrementa al aumentar J .

5.2. Evolución del estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$

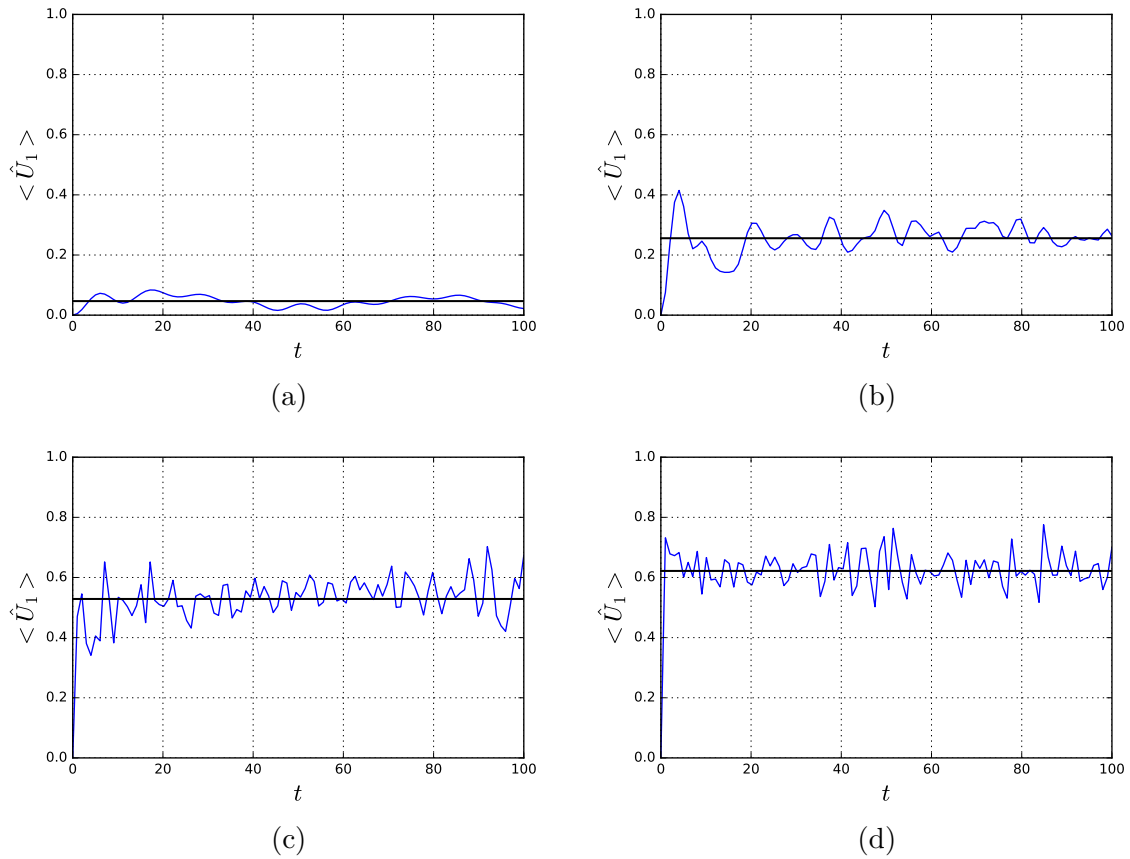


Figura 5.6: Valor esperado de la energía de interacción en el primer sitio para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$.

Capítulo 6

Entropía de entrelazamiento de Rényi en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard

En el capítulo anterior se obtuvo el vector de estado en función del tiempo, en este capítulo se empleará este estado para construir la matriz de densidad del sistema completo y con ella las matrices de densidad reducida de subsistemas. Para así calcular con estas matrices la entropía de entrelazamiento de Rényi.

La matriz de densidad para un estado puro está dada por

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (6.1)$$

Esto es válido para todo t debido a que el sistema parte de un estado puro y por tanto, seguirá siendo puro, pues la evolución está dada por un operador unitario.

Para estudiar la entropía de entrelazamiento se consideró la bipartición del sistema, es decir, el sistema total se dividió en $S = A \cup B$ y se estudiaron todas las biparticiones posibles, en lo siguiente se mostrará como se tomaron estas biparticiones y cómo se calcularon las matrices de densidad reducidas.

La base del sistema completo se puede expresar como un producto de las bases de cada sitio, $\{|n_i\rangle\}$, con la restricción de la conservación del número de partículas.

Así, la base total (de seis sitios) es de la forma $|n_1 \cdots n_6\rangle = |n_1\rangle \otimes \cdots \otimes |n_6\rangle$ y, por ejemplo, la base de un subsistema formado por los dos primeros sitios será $|n_1 n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$, de igual forma se tendrán expresiones similares para cualquier subsistema.

Como se describió en el capítulo 3, la matriz de densidad reducida al subsistema A es

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B\{\hat{\rho}\} \quad (6.2)$$

Por tanto, de manera general, los elementos de matriz de la matriz $\hat{\rho}_A(t)$ son

$$[\hat{\rho}_A(t)]_{lm} = \sum_c \langle l_1, l_2 | \langle c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho}(t) | c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle | m_1, m_2 \rangle \quad (6.3)$$

siendo $\langle l_1, l_2 |$ y $| m_1, m_2 \rangle$ elementos de la base del subsistema A y l y m sus respectivas etiquetas, $| c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle$ denotan elementos de la base del subespacio de B y el producto $| m_1, m_2 \rangle \otimes | c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle$ es un elemento de la base de número del sistema completo, esto último para garantizar la conservación de partículas.

Para ejemplificar la construcción de las matrices de densidad reducidas, desarrollaremos dos casos de subsistemas, uno formado por el primer sitio, y uno formado por los dos primeros sitios. Para un sitio, la matriz de densidad es

$$[\hat{\rho}_1(t)]_{lm} = \sum_{c_2, c_3, c_4, c_5, c_6} \langle l, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho}(t) | m, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle \quad (6.4)$$

donde las sumas corren sobre todos los valores de 1 a 6 con la restricción de que se conserve el número de partículas, es decir $l + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 + c_6 = m + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 + c_6 = 6$. Por lo tanto, si $l \neq m$, es imposible que se cumpla la conservación del número de partículas, lo que implica que la matriz de densidad sera una matriz diagonal.

Para el subsistema consistente de dos sitios, por el contrario, se tiene que sí existen elementos fuera de la diagonal diferentes de cero, la expresión explícita es

$$[\hat{\rho}_2(t)]_{lm} = \sum_{c_3, c_4, c_5, c_6} \langle l_1, l_2, c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho}(t) | m_1, m_2, c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle, \quad (6.5)$$

donde se debe cumplir nuevamente la conservación del número de partículas, los vectores de la base de dos sitios $|l_1, l_2\rangle$ y $|m_1, m_2\rangle$ son ordenados y etiquetados por los índices l y m respectivamente, el orden elegido es arbitrario, pero se debe conservar en todo momento. Si por ejemplo, el índice $l = 3$ y $m = 6$ etiquetan a los estados $|l_1, l_2\rangle = |3, 2\rangle$ y $|m_1, m_2\rangle = |4, 1\rangle$, entonces el elemento de matriz será

$$(\hat{\rho}_1(t))_{36} = \sum_{c_3, c_4, c_5, c_6} \langle 3, 2, c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho}(t) | 4, 1, c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle \quad (6.6)$$

$$= \langle 3, 2, 1, 0, 0, 0 | \hat{\rho}(t) | 4, 1, 1, 0, 0, 0 \rangle + \langle 3, 2, 0, 1, 0, 0 | \hat{\rho}(t) | 4, 1, 0, 1, 0, 0 \rangle \quad (6.7)$$

$$+ \langle 3, 2, 0, 0, 1, 0 | \hat{\rho}(t) | 4, 1, 0, 0, 1, 0 \rangle + \langle 3, 2, 0, 0, 0, 1 | \hat{\rho}(t) | 4, 1, 0, 0, 0, 1 \rangle \quad (6.8)$$

Con el desarrollo anterior se obtiene la entropía de Rényi de orden 2 en función del tiempo

$$S_2(\hat{\rho}_A) = -\ln [\text{Tr}\{\hat{\rho}_A^2\}] \quad (6.9)$$

para las matrices de densidad reducidas consideradas, cuando un sistema es formado por el primer sitio, los dos primeros sitios, y los tres primeros sitios, respectivamente. Es importante mencionar que dada la restricción de la conservación del número de partículas, el espacio de Hilbert del sistema completo se descompone de la siguiente forma

$$\dim(\mathcal{H}_S) = \sum_{i=0}^6 \dim\mathcal{H}_{\mathcal{A}_i} \dim\mathcal{H}_{\mathcal{B}_{6-i}}, \quad (6.10)$$

donde $\mathcal{H}_{\mathcal{A}_i}$ representa el subespacio de Hilbert del subsistema A con i partículas y $\mathcal{H}_{\mathcal{B}_{6-i}}$ el subespacio del subsistema B con $6 - i$ partículas.

Como se puede observar en la figura 6.1, tenemos nuevamente dos tipos de comporta-

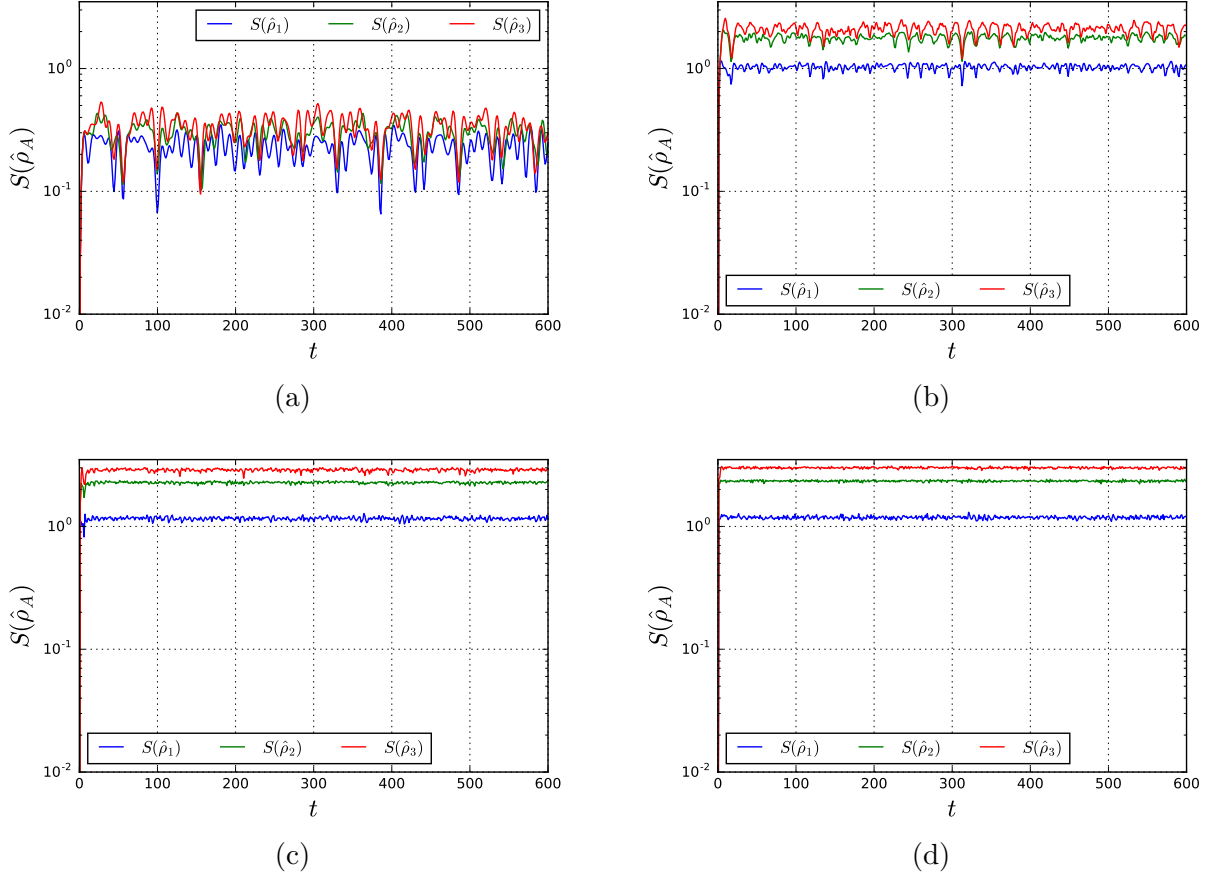


Figura 6.1: Valor esperado de la entropía para subsistemas conformados por el primer sitio, los dos primeros sitios y los tres primeros sitios para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ d) $J = 10$.

miento para la entropía de entrelazamiento de los subsistemas, en función del parámetro J . Todas las curvas inician en cero que corresponde a un estado no entrelazado puro. Posteriormente al evolucionar el estado, las partículas comienzan a transitar entre los distintos sitios del sistema, estos saltos permiten que haya más de una partícula, lo cual promueve la interacción entre los sitios de la red, esta interacción produce entrelazamiento entre los subsistemas y el resto del sistema. Esto se muestra en las curvas como un incremento de la entropía.

Se observa que después de un tiempo la entropía de entrelazamiento detiene su cre-

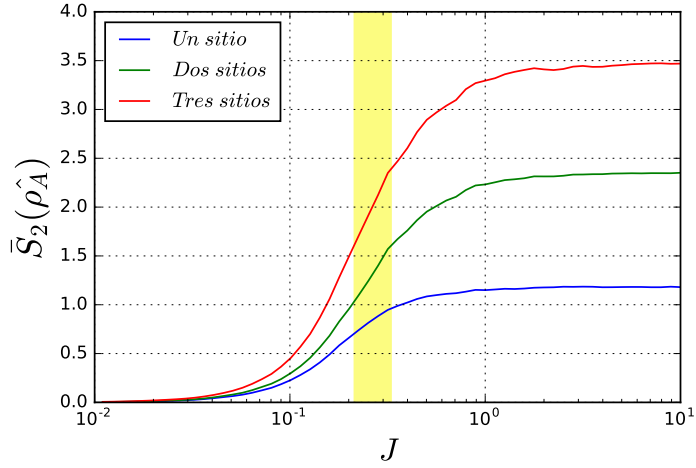


Figura 6.2: Promedio temporal de la entropía para las particiones de un sitio (azul), dos sitios (verde), tres sitios (rojo).

cimiento y comienza a oscilar alrededor de un valor de saturación constante, notamos también que al aumentar el valor de J , la entropía llega más rápido al valor de saturación y este valor aumenta. Para analizar el comportamiento del valor de saturación como función de J se realizaron gráficas del promedio temporal de la entropía para tiempos largos, es decir, se promediaron los valores de la entropía para tiempos mayores a $t = 10\frac{\hbar}{U}$ y hasta un tiempo de corte de $t = 1000\frac{\hbar}{U}$ estos resultados se muestran en la figura 6.2, en ella se tiene que la entropía crece rápidamente en función de J para valores pequeños de este parámetro y para valores grandes la curva parece llegar a un valor de saturación, al menos en el intervalo analizado. La curva tiene un cambio de concavidad en el intervalo de $J \approx 0.2 - 0.4$.

Se observa también un cambio en la amplitud de las oscilaciones alrededor del valor de saturación como función de J , para cuantificar este cambio se calculó la desviación estándar de la entropía,

$$\sigma_S = \sqrt{\frac{1}{\tau} \int_0^\tau S_2(\rho_A(t))^2 dt - (\overline{S_2(\rho_A(t))})^2} \quad (6.11)$$

donde

$$\overline{S_2(\rho_A)} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau S_2(\rho_A(t)) dt \quad (6.12)$$

es el promedio temporal

En la figura 6.3 se muestran los resultados de la desviación estándar de la entropía, en ella se puede observar un máximo en el intervalo $J \approx 0.2 - 0.4$, el cual coincide con el cambio en la concavidad, para valores de J cercanos a cero se tiene que las fluctuaciones desaparecen, mientras que para valores grandes, las fluctuaciones tienden a un valor constante alrededor de 0.05. Notamos entonces que las fluctuaciones señalan un tipo de transición entre las regiones de interacción fuerte asociadas a estados tipo Mott y la región de interacción débil asociada a una fase superfluida. El pico de las fluctuaciones es congruente con los valores reportados en la literatura donde se presenta la transición para sistemas en una dimensión con $\frac{J}{U_c} = 0.29$ [35].

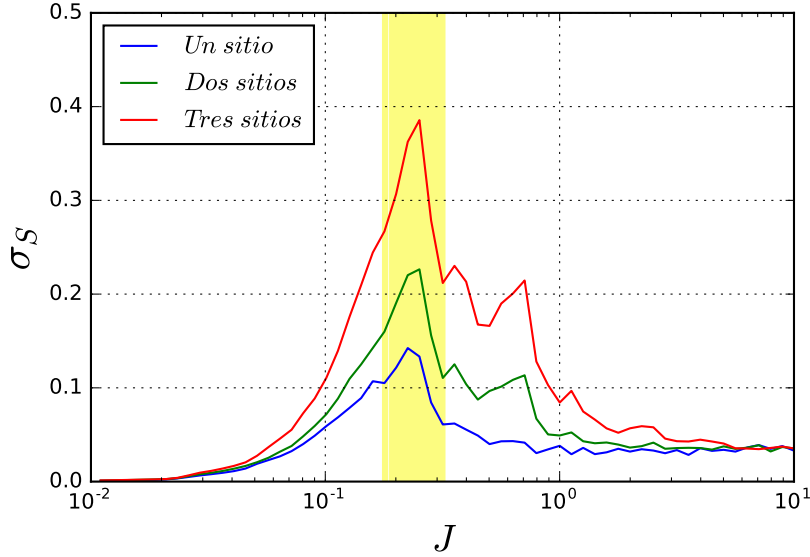


Figura 6.3: Desviación estándar de la entropía de entrelazamiento para los subsistemas del primer sitio(azul), segundo sitio(verde) y tercer sitio(rojo).

En el análisis hecho hasta este punto sólo se han considerado los subsistemas formados por el primer sitio, por los dos primeros sitios y por el tercer sitio, pero es posible considerar también otras biparticiones, como por ejemplo un subsistema formado por el segundo sitio, o uno formado por los sitios tres y cinco, etc. Para analizar si el comportamiento de la entropía depende de los sitios que se elijan como subsistema y como complemento, se calculó la entropía de entrelazamiento para todos los posibles subsistemas formados por un sitio, dos sitios y tres sitios, los resultados se muestran en las gráficas 6.4, 6.5, 6.6. Se puede observar que las curvas de la entropía con el mismo tamaño de subsistema tienen el mismo comportamiento cualitativo, y las curvas están muy cercanas entre si para todo tiempo, teniendo entonces el mismo valor de saturación. Notamos entonces que los resultados obtenidos previamente de la saturación y las fluctuaciones de la entropía de entrelazamiento serán independientes de los sitios que se tomen para formar los subsistemas.

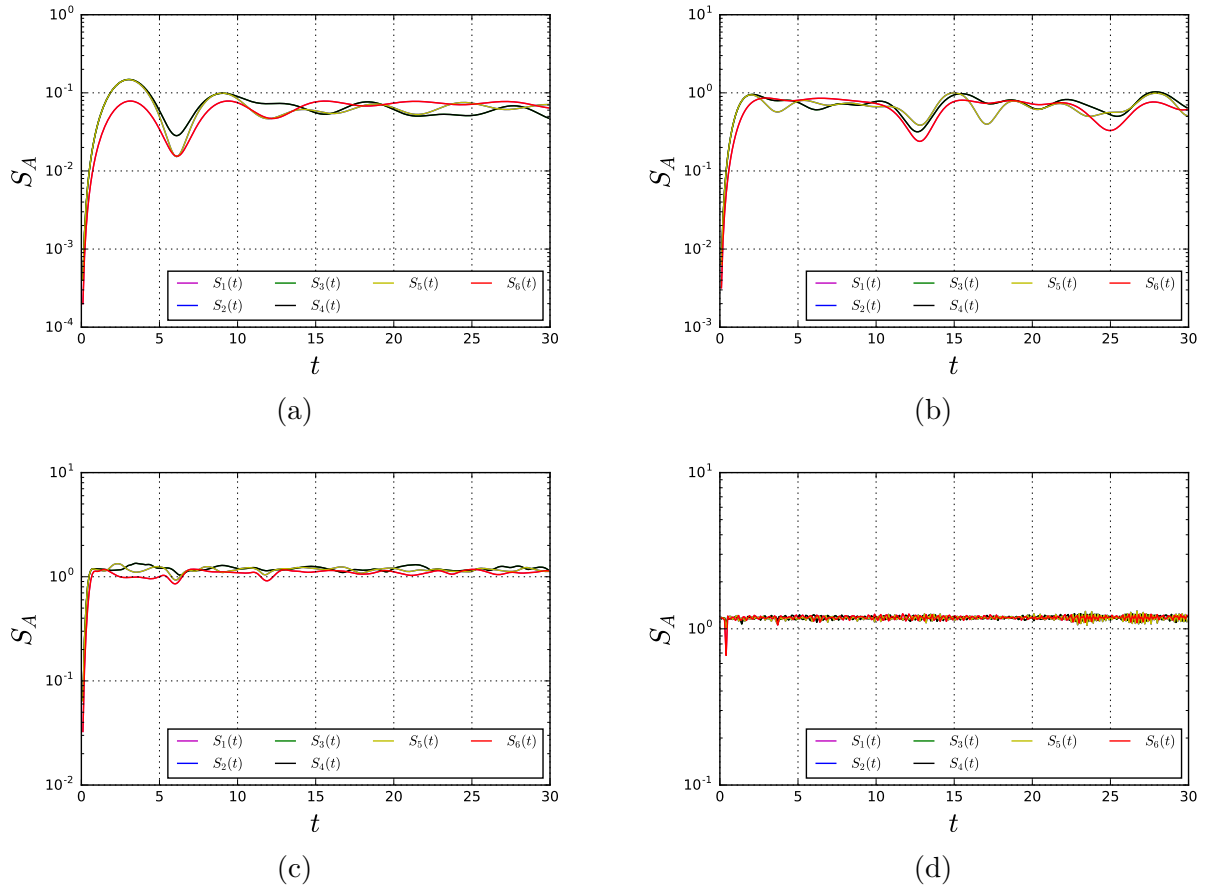


Figura 6.4: Entropía en función del tiempo para las seis posibles biparticiones de un sitios, a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$ para el estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$.

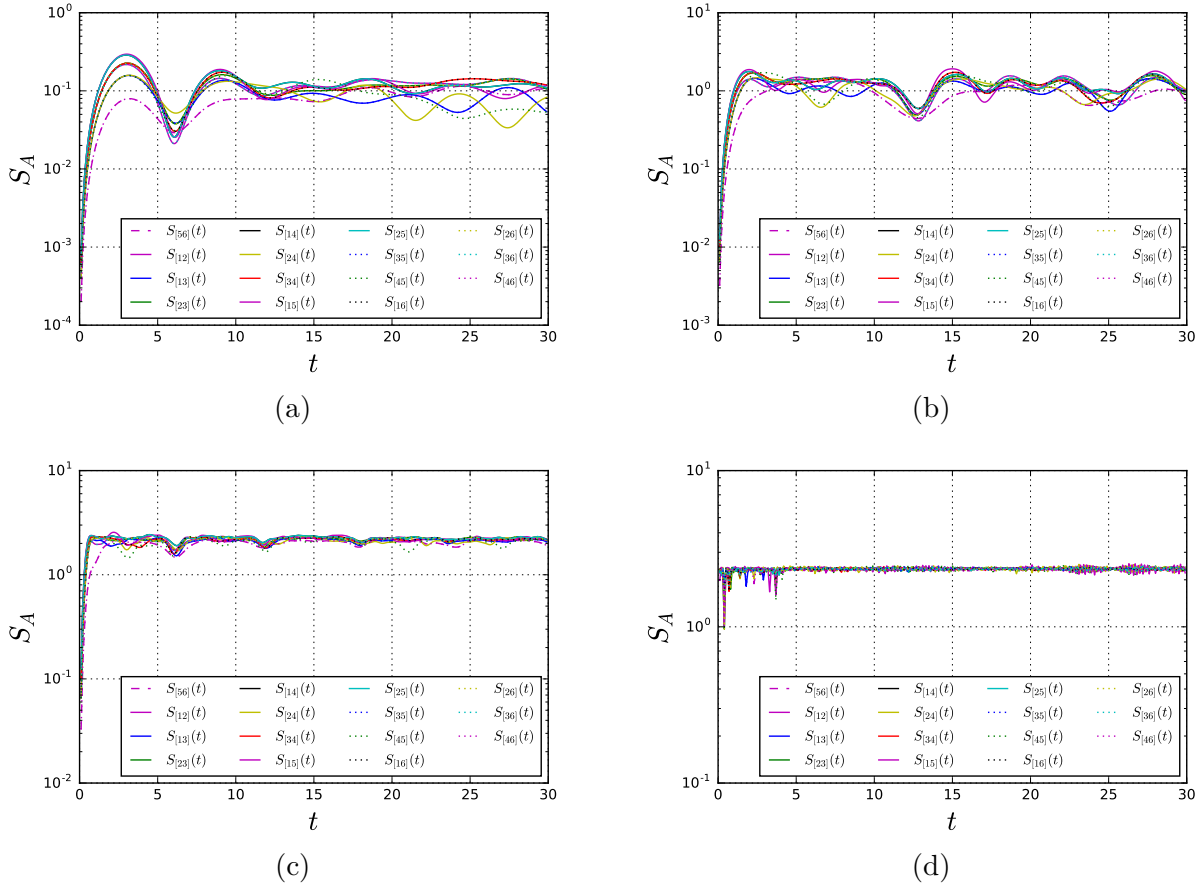


Figura 6.5: Entropía reducida en función del tiempo para los 15 posibles subsistemas que consten de dos sitios para: a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$, para el estado inicial total $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$.

6.1. Comparación entropía de Rényi y von Nuemann

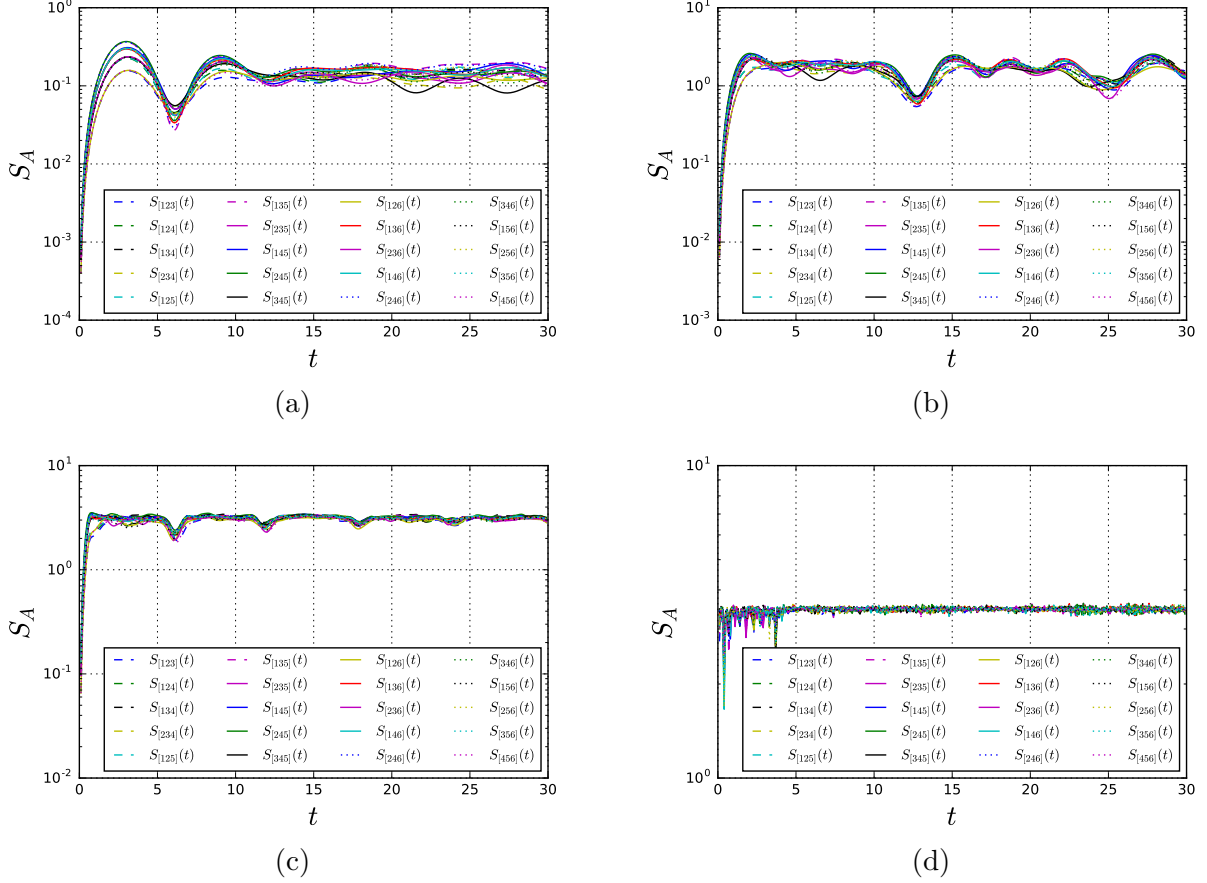
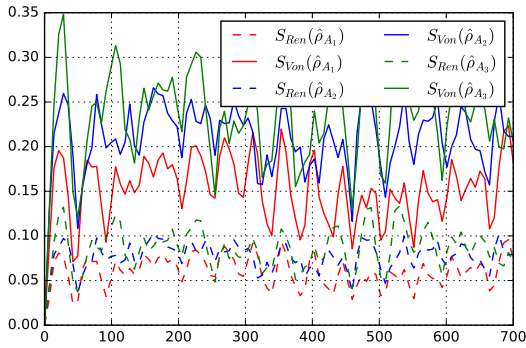


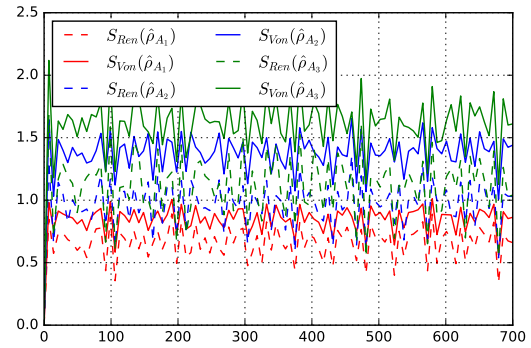
Figura 6.6: Entropía reducida en función del tiempo para los 20 posibles subsistemas que consisten de tres sitios para: a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$ para el estado inicial total $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$.

6.1. Comparación entropía de Rényi y von Nuemann

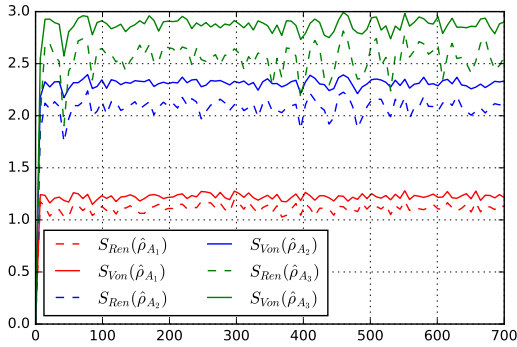
En la literatura la entropía de entrelazamiento más usada es la entropía de von Neumann, la cual también da una medida del entrelazamiento y además está conectada directamente con la entropía termodinámica, para comparar la información contenida en estas medidas de entrelazamiento calculamos la entropía de von Neumann y la graficamos junto con la entropía de Rényi para los subsistemas conformados por el primer sitio.



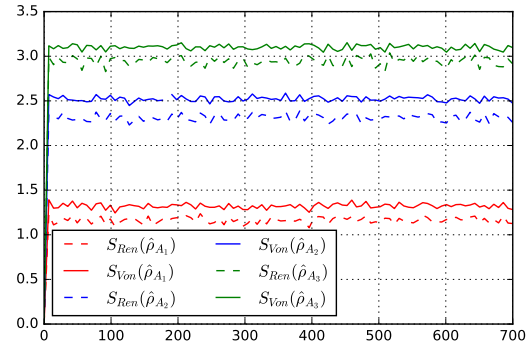
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.7: Entropía de entrelazamiento de Rényi y de Von Neumann para subsistemas de 1, 2 y 3 sitios para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ d) $J = 10$.

En la gráfica 6.7 podemos observar que la entropía de Von Neumann y de Rényi de orden dos tienen un comportamiento cualitativo muy similar, teniendo los máximos y mínimos en los mismos valores, pero la entropía de Von Neumann es siempre mayor a la de Rényi de orden dos. Por lo que podemos concluir que el análisis empleado en este trabajo entregara resultados similares si se emplea la entropía de Von Neumann. Las dos entropías tienden a saturarse, lo cual nos indica que hay una saturación del entrelazamiento a un valor estacionario.

6.2. Equilibrio térmico microscópico

Con los resultados de las secciones anteriores podemos concluir que tanto la entropía de entrelazamiento, como los observables del sistema parecen tender a un comportamiento estacionario. Lo que nos hace suponer que los subsistemas han alcanzado un estado de equilibrio. Para comprobar si el estado de los subsistemas para tiempos largos puede ser descrito por un estado de equilibrio se calculó la matriz de densidad en el ensemble canónico, asociando una temperatura efectiva a los subsistemas y se comparó con la matriz de densidad reducida en función del tiempo aplicando la definición de MITE.

El ensemble canónico describe un sistema con un número de partículas fijo en equilibrio térmico con un baño de calor a una temperatura T . El estado de sistema es entonces una mezcla estadística de estados dados por la matriz de densidad canónica

$$\hat{\rho}^{can} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z_{can}}, \quad (6.13)$$

donde Z_{can} es la función de partición canónica $Z_{can} = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}$ con $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Para determinar la temperatura se fija la restricción

$$\langle E \rangle_c = \text{Tr}\{\hat{\rho}^{can} H\} = 0 \quad (6.14)$$

ya que la energía inicial se conserva. Bajo este esquema se obtuvo la matriz de densidad canónica del sistema completo (seis sitios) y la matriz de densidad reducida para los subsistemas considerados. Se calculó la entropía de entrelazamiento con la matriz reducida canónica.

$$S_2(\hat{\rho}_A^{can}) = -\ln(\text{Tr}\{\hat{\rho}_A^{can}\}), \quad (6.15)$$

donde $\hat{\rho}_A^{can} = \text{Tr}_B\{(\hat{\rho}^{can})^2\}$. Se comparó el valor de saturación de $S_2(\hat{\rho}_A(t))$ con el valor de $S_2(\hat{\rho}_A^{can})$ para los subsistemas A calculando

$$\delta = |\overline{S_2(\hat{\rho}_A(t))} - S_2(\hat{\rho}_A^{can})|. \quad (6.16)$$

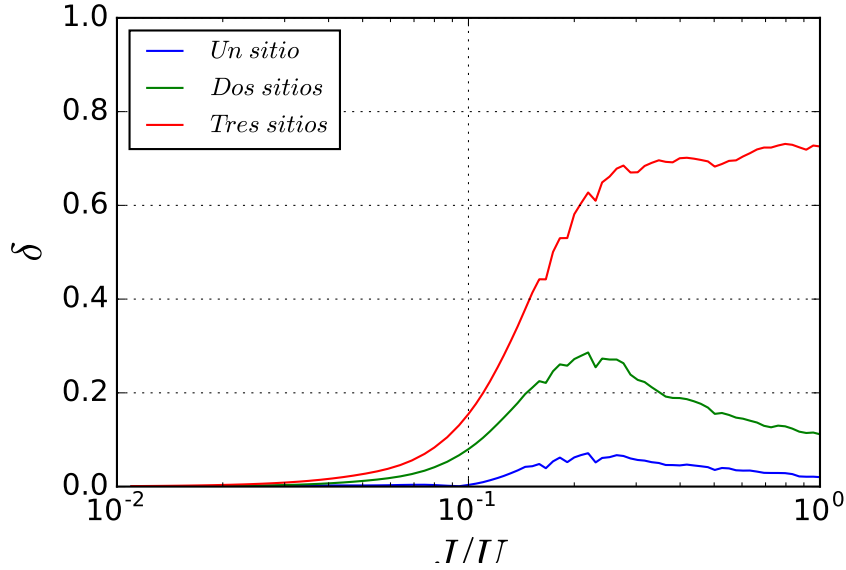


Figura 6.8: Distancia entre el promedio temporal de la entropía de entrelazamiento de Rényi y la entropía dada por la matriz de densidad reducida del ensemble canónico para las particiones de un sitio (azul), dos sitios (verde), tres sitios (rojo), estado inicial $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$.

Se puede observar en la figuras 6.9 y 6.8 que el valor de saturación en el tiempo coincide con el valor predicho por el ensemble canónico ecuación 6.15 para el subsistema de uno y dos sitios, y difiere para el de tres sitios, siempre permaneciendo por debajo de este. En el primer caso la dimensión del espacio de Hilbert del subsistema de un sitio es $D = 7$ y la del complemento es $D = 462$ por tanto es posible considerar el complemento como un baño para el subsistema la diferencia ya no es tan grande, se tiene que el subsistema tiene una dimensión de $D = 28$ y el complemento de $D = 210$, para el subsistema de tres sitios la dimensión del complemento es la misma y por tanto ya no es valido considerarlo como baño. Notamos también que la diferencia máxima se da en la misma región donde las fluctuaciones de la entropía son máximas.

Como era de esperarse la temperatura del sistema incrementa con el valor de J ya que está asociada a la energía cinética de las partículas. Tenemos que a mayor valor de J , mayor interacción entre sitios y mayor entrelazamiento, lo cual aumenta también la temperatura del sistema.

6.2. Equilibrio térmico microscópico

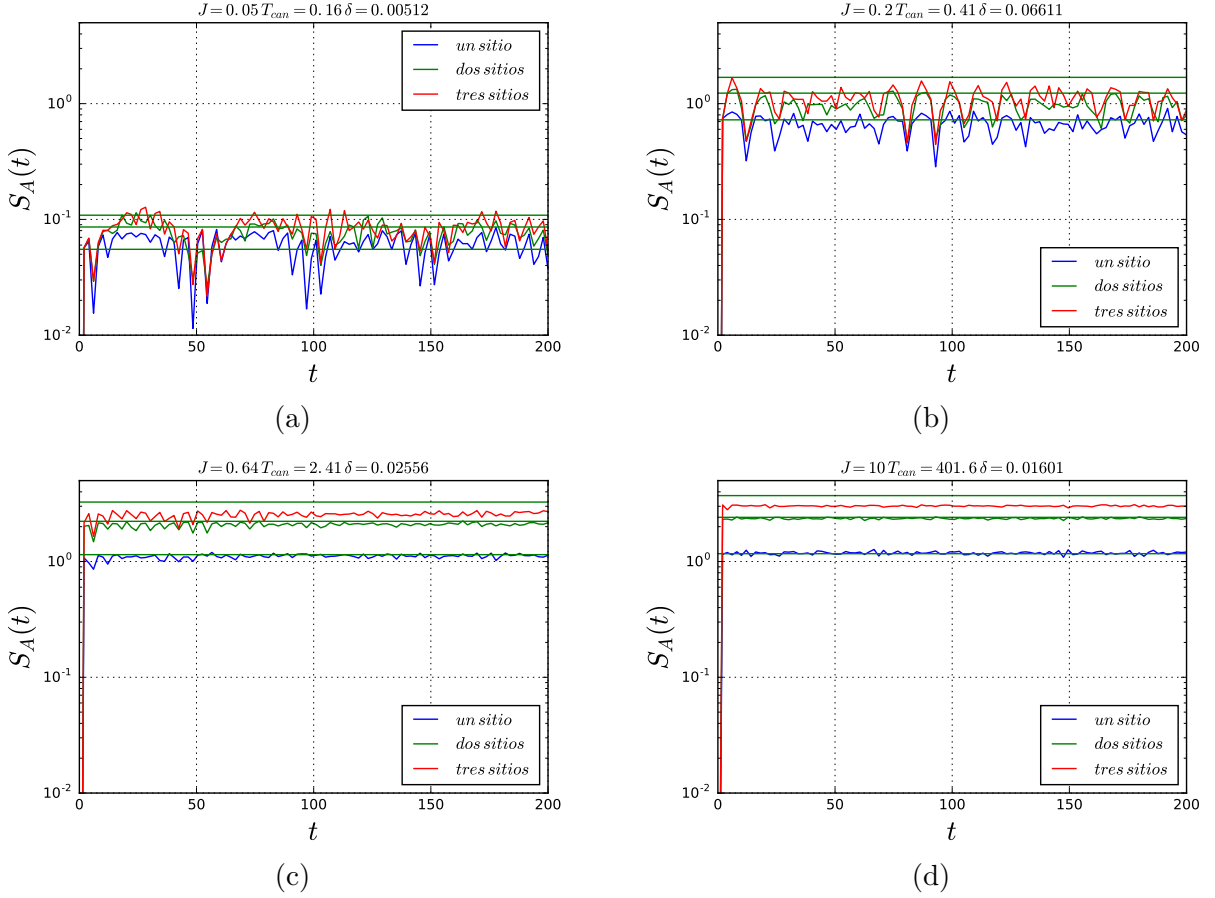


Figura 6.9: Distribución de probabilidad de partículas en un subsistema de tres por sitios, para tiempos largos $t > 10$. a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$.

Para estudiar la definición de equilibrio MITE se comparó la matriz de densidad reducida canónica con la matriz de densidad reducida el subsistema de un sitio, la comparación se hizo a través de la distancia traza entre matrices [36],

$$D(t) = \frac{1}{2} \text{Tr}\{|\hat{\rho}_A(t) - \hat{\rho}_A^{can}\| \}, \quad (6.17)$$

las gráficas de esta distancia se muestran en 6.10. Se puede observar que en general la distancia entre las matrices disminuye conforme el sistema evoluciona tendiendo a un valor constante con oscilaciones alrededor de este, siendo mayores las oscilaciones para J

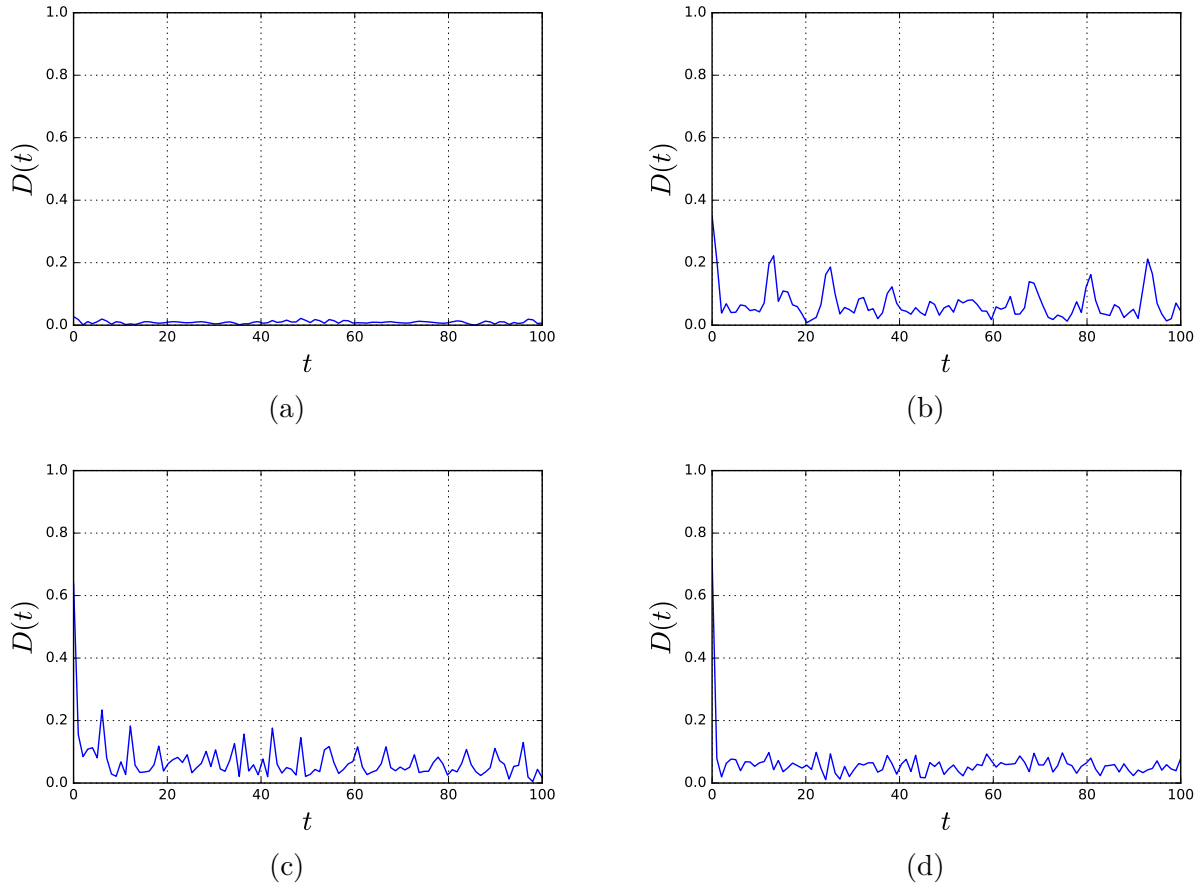


Figura 6.10: Distancia entre la matriz de densidad reducida canónica y la matriz del sistema para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ d) $J = 10$.

más grandes. Se observa también que en un inicio la diferencia es mayor y que rápidamente decae, y para valores de J pequeños la distancia no es muy grande de inicio y por tanto el decaimiento también no es muy grande, esto se puede explicar ya que para valores de J pequeños el estado inicial es muy similar al estado base del sistema final, es decir, es como si el sistema evolucionara a partir de un estado propio. Para valores mayores la diferencia entre el estado inicial y los valores propios de Hamiltoniano final es mayor de ahí la mayor diferencia entre las matrices inicialmente. Nuevamente se observa un máximo en el intervalo $J = 0.15 - 0.3$ donde las diferencias y las fluctuaciones son mayores, este podría considerarse el equivalente de la transición superfluido aislante Mott de equilibrio, aunque en esta ocasión es una transición en las propiedades dinámicas.

6.2.1. Distribución de probabilidad del número de partículas en un sitio dado

Buscando comparar las predicciones entre la matriz de densidad reducida y la matriz de densidad dada por el ensamble canónico, se calculó la distribución de partículas promedio por sitio, para tiempos largos y la distribución predicha por el ensamble canónico. Consideraremos el subsistema como el primer sitio, por tanto la probabilidad de encontrar al subsistema ocupado por un número n de partículas está dada por

$$P(n) = \left| \sum_{n_2, n_3, \dots, n_6} \langle \psi(t) | n, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6 \rangle \right|. \quad (6.18)$$

Los resultados se muestran en la figura 6.11. Para las distribuciones se realizaron promedios a tiempos largos, después de un tiempo de relajación, es decir, se promediaron las probabilidades entre un tiempo de relajación de $t = 10$ y un tiempo de corte de $t = 1000$.

Como se puede observar en las gráficas que la distribución de probabilidad dada por el ensamble canónico reproduce el comportamiento de los promedios temporales.

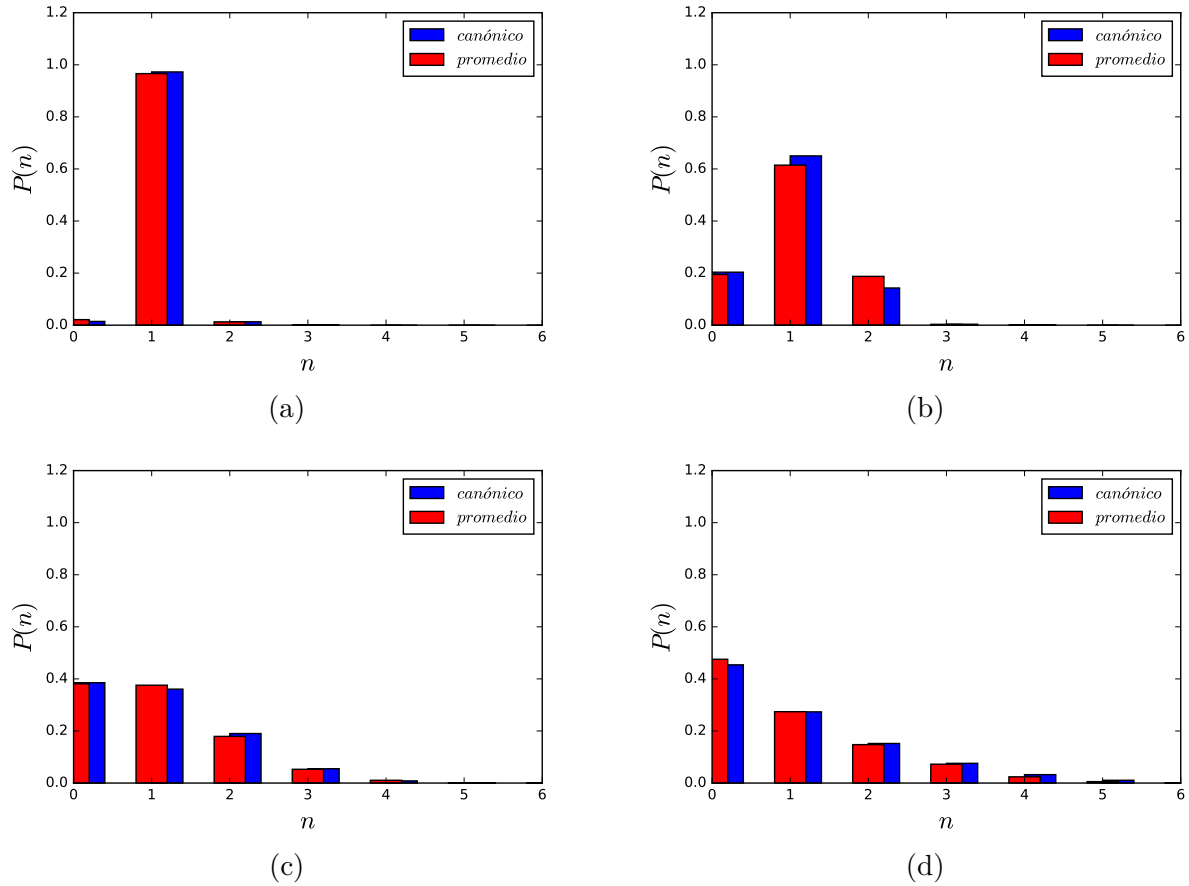


Figura 6.11: Promedio temporal de la distribución de probabilidad de partículas (rojo) y distribución de probabilidad canónica (azul) para el subsistema de un sitio con, a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$ y d) $J = 10$.

6.3. Estado inicial $|2, 0, 2, 0, 2, 0\rangle$

Con todas las herramientas desarrolladas en las secciones anteriores se estudió la dinámica de la entropía de entrelazamiento de Rényi para un sistema que parte de un estado inicial puro, correspondiente a un estado excitado de Mott, para analizar así la dependencia de la relajación con el estado inicial.

Consideremos ahora que el sistema parte del estado inicial $|2, 0, 2, 0, 2, 0\rangle$ el cual tiene una energía $E_0 = \langle 2, 0, 2, 0, 2, 0 | \hat{H} | 2, 0, 2, 0, 2, 0 \rangle = 3$ en unidades de U . Se calculó la

entropía de entrelazamiento de Rényi para diferentes valores del parámetro adimensional J , los resultados se muestran en la figura 6.12.

En ella se observa que la entropía tiende a oscilar alrededor de un valor de saturación constante para tiempos largos. Cuando el valor de J es pequeño la frecuencia de las oscilaciones es menor y conforme aumenta J la frecuencia aumenta rápidamente. Se observa además que el valor de saturación incrementa con J teniendo así un mayor entrelazamiento cuando el término de salto entre sitios es mayor. Se calculó también el valor de la entropía de entrelazamiento con la matriz de densidad reducida del ensemble canónico 6.15, donde la matriz $\hat{\rho}^{can}$ se obtiene imponiendo la condición de que la energía promedio debe ser igual a $E_0 = 3$. Se obtuvo que para J pequeña hay una mayor diferencia entre el promedio temporal de la entropía y el valor dado por el ensemble canónico, al incrementar J el valor promedio de saturación tiende a ser igual al del ensemble, siendo menor la diferencia para el subsistema de un sitio.

Como en el caso del estado $|1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$, se calcularon también los valores de saturación promedio de la entropía y la desviación estándar, los resultados se muestran en la figuras 6.13, 6.14. Podemos observar que el valor promedio de saturación aumenta conforme aumenta J y llega también a un valor de saturación en función de J . Para la desviación estándar se obtiene que estas son cercanas a cero para valores de J pequeños y para valores de J grandes tienden a un valor constante alrededor del valor de 0.05 y se tiene un máximo aproximadamente en el intervalo de $J = 0.1 - 0.3$.

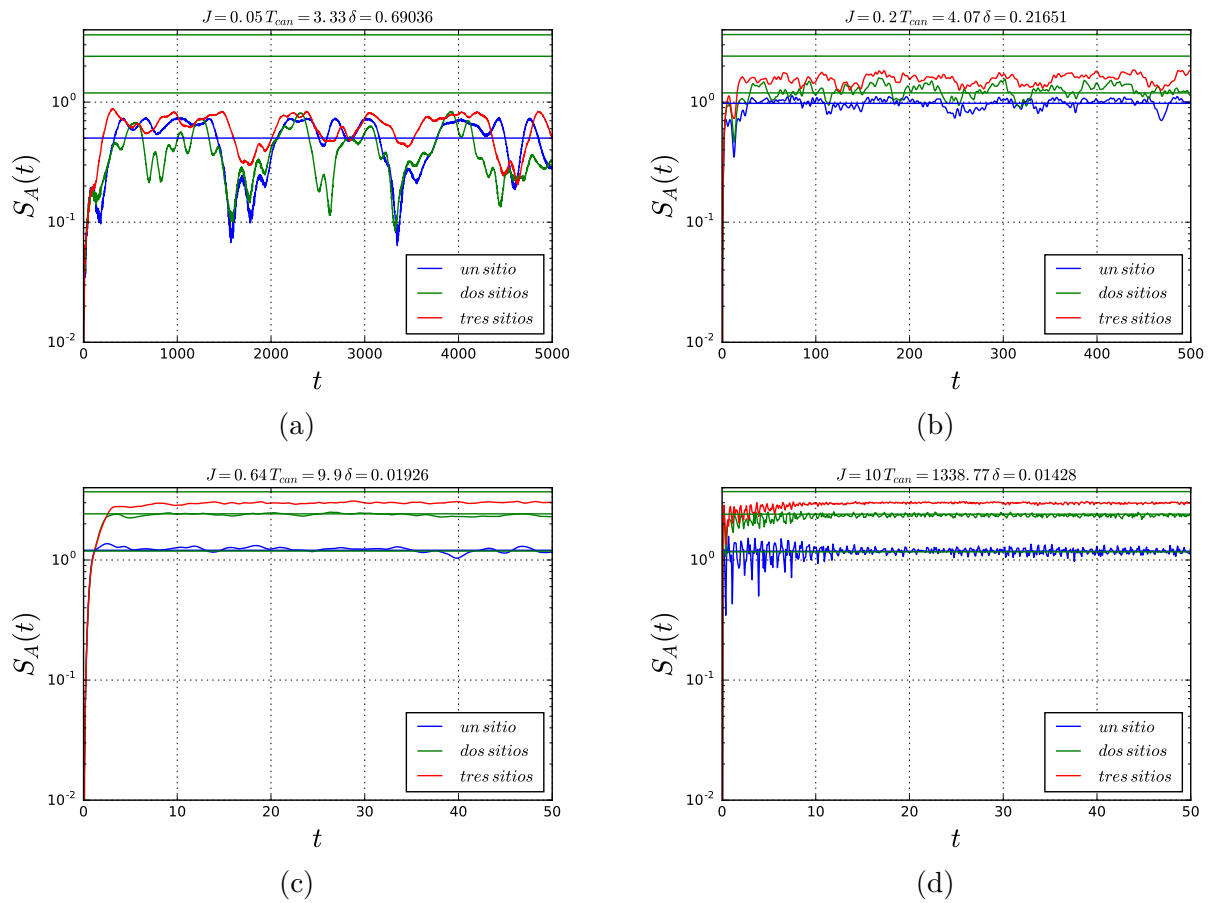


Figura 6.12: Valor esperado de la entropía para subsistemas de 1, 2 y 3 sitios para valores de a) $J = 0.05$, b) $J = 0.2$, c) $J = 0.64$, d) $J = 10$ para el estado inicial $|202020\rangle$.

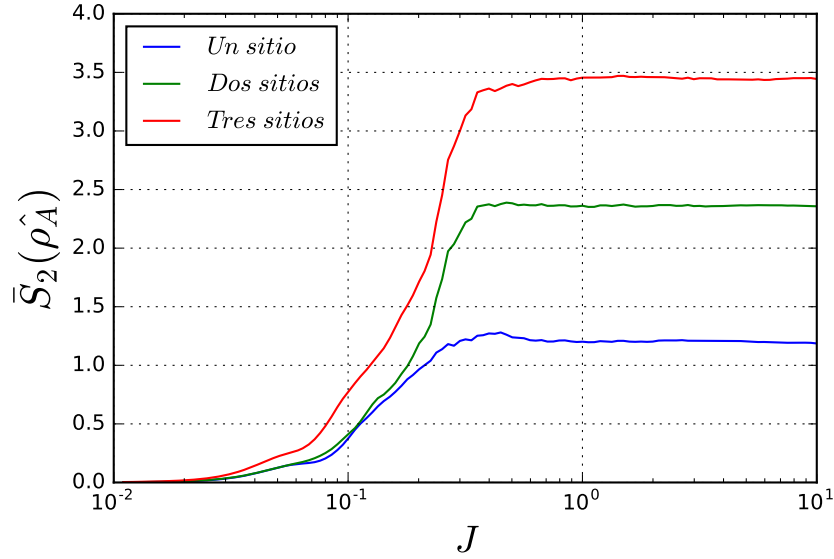


Figura 6.13: Promedio temporal de la entropía para las particiones de un sitio (azul), dos sitios (verde), tres sitios (rojo), estado inicial $|202020\rangle$.

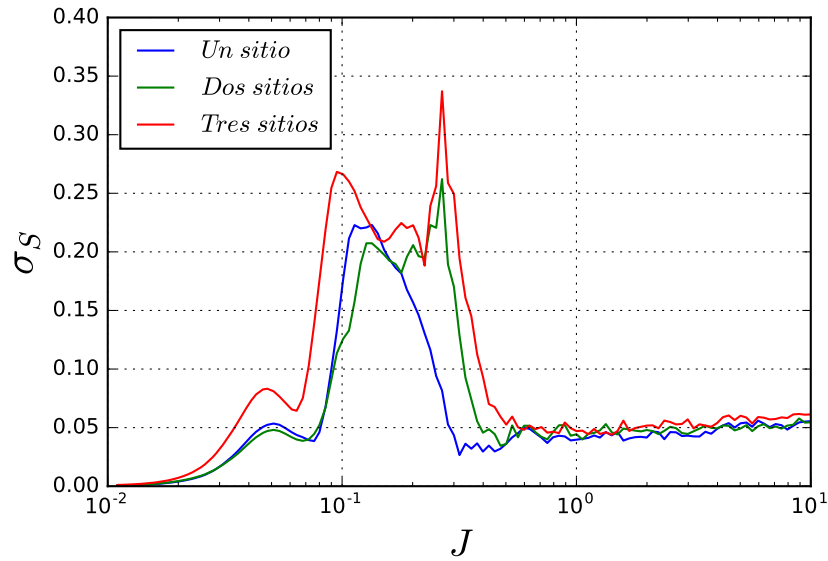


Figura 6.14: Desviación estándar de la entropía de entrelazamiento para los subsistemas de un sitio (azul), dos sitios (verde) y tres sitios (rojo), estado inicial $|202020\rangle$.

Capítulo 7

Conclusiones

Se logró obtener la dinámica de un sistema de bosones en interacción partiendo de estados iniciales fuera de equilibrio. Los estados iniciales considerados fueron estados propios del Hamiltoniano de Bose-Hubbard con el parámetro de salto $J = 0$, se realizó un cambio instantáneo a un Hamiltoniano con $J \neq 0$ y se dejó que el sistema evolucionara sobre este nuevo Hamiltoniano, realizando así lo que se conoce en la literatura como un protocolo *quench*.

Se obtuvo el vector de estado y la matriz de densidad en función del tiempo, esto a través de la acción del operador de evolución temporal, el cual se calculó con los valores y vectores propios del Hamiltoniano final, los cuales se obtuvieron con diagonalización numérica. Este método permitió explorar la dinámica del estado del sistema para tiempos cortos y tiempos largos.

Con la matriz de densidad en función del tiempo se calculó la evolución del valor esperado de observables de interés; el número de partículas y la energía de interacción, en cada uno de ellos tanto total como por sitio, se observó que cuando el estado inicial correspondía al estado con una partícula por sitio, cada uno de los observables llegaban a un estado estacionario y tenían fluctuaciones alrededor de este, el valor de las fluctuaciones y el valor de saturación depende del valor de J final, encontrándose que las fluctuaciones tenían un máximo alrededor de $J = 0.2 - 0.4$ y decaían a cero para J menores a dicho

intervalo y para J mayores decaían a un valor de 0.04

Se calculó la entropía de entrelazamiento de Rényi de segundo orden, tomando el sistema total como un sistema bipartido, $S = A \cup B$, considerando A como el subsistema a estudiar y B como el baño. Se calcularon las matrices de densidad reducidas para diferentes tamaños del subsistema A . Se encontró que la entropía de los subsistemas incrementa rápidamente en el tiempo y llega a un valor de saturación promedio, presentando fluctuaciones alrededor de este.

La saturación de la entropía indica una saturación del entrelazamiento, el cual es producto de la interacción entre el subsistema y su complemento, esto muestra que el subsistema ha alcanzado un estado estacionario, y también se refleja en la saturación de los observables como la energía de interacción por sitio.

El valor de saturación y el valor de las fluctuaciones de la entropía de entrelazamiento de Rényi depende del parámetro J . Se encontró que estas fluctuaciones presentan un máximo alrededor de $J = 0.2 - 0.4$, valor cercano al valor de transición de fases superfluido aislante Mott en equilibrio reportada en la literatura para sistemas de una dimensión [35].

Se calculó también la matriz de densidad reducida canónica, con ella se obtuvo el valor de la entropía de entrelazamiento canónica, el cual resulta ser un valor constante. Se comparó este valor con el valor de saturación para tiempos largos, encontrando que para el subsistema de un sitio la diferencia es menor comparado con subsistemas más grandes. Se encontró que la separación entre estos valores era menor a 0.06 y siendo el valor máximo de distancia en el intervalo $J = 0.2 - 0.4$ lo que coincide con el valor obtenido de las fluctuaciones de la entropía. De lo cual podemos concluir que la relajación a equilibrio de los subsistemas depende del tamaño de los mismos.

Se midió la distancia entre la matriz de densidad reducida para el subsistema de un sitio con la matriz reducida canónica, obteniéndose que esta en general disminuía con el tiempo teniendo que para todo J se encontraba menor a 0.06. Esto nos permite concluir que el entrelazamiento produce que la matriz de densidad reducida del subsistema se asemeje a la matriz de densidad reducida canónica.

Se analizó el comportamiento del sistema partiendo de un estado Mott excitado, te-

niendo un patrón alternante de sitios doblemente ocupados y sitios vacíos, teniendo que también se presenta una relajación del sistema a estados estacionarios, teniendo que el tiempo de relajación es mayor comparado con el primer estado inicial estudiado. Otra de las diferencias encontradas es que para J pequeños la diferencia entre el valor promedio de la entropía y el valor dado por el ensemble canónico incrementa.

Con estos resultados se puede concluir que para los estados iniciales considerados el sistema tiende a saturar el valor del entrelazamiento, que es cuantificado por la entropía de Rényi. Esta saturación indica que el sistema ha alcanzado un estado estacionario de equilibrio microscópico, el cual puede ser descrito aproximadamente por la matriz de densidad en el ensemble canónico. Mientras menores sean las fluctuaciones de la entropía alrededor del valor de saturación, mejor es la descripción dada por el ensemble canónico. Se muestra entonces que el entrelazamiento juega un rol crucial en el proceso de relajación a estados de equilibrio.

Apéndice A

Códigos

En este apéndice se presentan los códigos empleados para la construcción de la base de número en el espacio de Fock, la construcción del Hamiltoniano, la diagonalización del Hamiltoniano y las matrices de densidad reducidas.

A.1. Construcción de la base

Para hacer una descripción del estado y de los operadores del sistemas en términos de matrices en un espacio de dimension D es necesario asociar a cada uno de los elementos $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$ con un vector base en el espacio de vectores en R^D . Asociamos entonces el vector $(1, 0, \dots, 0)$ con el vector $|N, 0, \dots, 0\rangle$ y el vector $|0, 0, \dots, N\rangle$ con $(0, 0, \dots, 1)$, y lo mismo para cada vector de la base, respetando el orden lexicográfico.

El número de elementos de la base para un sistema de M sitios y N partículas está dado por

$$D = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!} \quad (\text{A.1})$$

Cada elemento de la base es de la forma $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$ donde $\sum_{i=1}^6 n_i = 6$. Los elementos se pueden etiquetar usando un orden lexicográfico. Para dos vectores diferentes de la base $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$ y $|m_1, m_2, \dots, m_6\rangle$ debe existir un cierto índice $1 < k < M - 1$ tal que

$n_i = m_i$ para $1 < i < k - 1$ mientras que $n_k = m_k$. Decimos $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$ es superior (inferior) a $|m_1, m_2, \dots, m_6\rangle$ si $n_k > m_k$ ($m_k > n_k$). Se tiene entonces que $|6, 0, \dots, 0\rangle$ es el vector superior a todos los vectores base mientras que $|0, 0, \dots, 6\rangle$ es inferior a todos. Teniendo el conjunto de vectores base con una estructura de orden, es posible generar todos los vectores uno por uno descendiendo del mayor $|6, 0, \dots, 0\rangle$. Dado un vector base $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$ con $n_M < N$, procedemos a obtener el siguiente vector de acuerdo a la siguiente regla: Supongamos $n_k \neq 0$ mientras $n_i = 0$ para todo $k + 1 < i < M - 1$ entonces el siguiente vector base es $|\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots, \bar{n}_6\rangle$ con

- $\bar{n}_i = n_i$ para $1 < i < k - 1$;
- $\bar{n}_k = n_k - 1$
- $\bar{n}_{k+1} = N - \sum_{i=0}^k \bar{n}_i$ y $n_i = 0$ para $i > k + 2$

Este procedimiento termina con el vector base mas bajo $|0, 0, \dots, N\rangle$. Este algoritmo lleva a un código con solo un ciclo y corriendo de 0 a D . Numéricamente, se guarda los vectores base en un arreglo de $D \times M$ dimensiones. Para hacer una descripción del estado y de los operadores del sistemas en términos de matrices en un espacio de dimension D es necesario asociar a cada uno de los elementos $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$ con un vector base en el espacio de vectores en R^D . Asociamos entonces el vector $(1, 0, \dots, 0)$ con el vector $|N, 0, \dots, 0\rangle$ y el vector $|0, 0, \dots, N\rangle$ con $(0, 0, \dots, 1)$, y lo mismo para cada vector de la base, respetando el orden lexicográfico. Generamos entonces las dos bases, en la representación de Fock y en el espacio R^D

```
def GeneraBase(N,M):
    """
    Genera la base del operador de numero de ocupacion con N particulas
    y M sitios
    """
    D=int((factorial(N+M-1))/(factorial(N)*factorial(M-1)))
    Bn=np.zeros(M)
    Bn[0]=N
    Base=np.zeros((D,M))
    Base[0]=Bn
    k=0
    l=0
```



```

while(l<D-1):

    if sum(Base[l][k+1:M-1])==0.0:
        Base[l+1]=Base[l]
        Base[l+1][k]=Base[l][k]-1
        Base[l+1][k+1]=M-sum(Base[l+1][0:k+1])

        for i in range(k+2,M):
            Base[l+1][i]=0
        l+=1
    k+=1
    if k==M-1:
        k=0
Bn=np.zeros((D,D))
for i in range(D):
    Bn[i][i]=1.
return Base, Bn

```

A.2. Elementos de matriz del Hamiltoniano

Se construye la matriz Hamiltoniana con respecto la base de número. Los elementos de matriz esta dados por

$$(H)_{nm} = \langle n_1, n_2, \dots, n_6 | \hat{H} | m_1, m_2, \dots, m_6 \rangle \quad (\text{A.2})$$

El matriz puede ser separada en dos componentes, una diagonal que corresponde al término de interacción la cual solo depende de operadores de número, y una componente con elementos fuera de la diagonal. Podemos entonces separar al Hamiltoniano como

$$\hat{H} = \hat{H}_{cin} + \hat{H}_{int} \quad (\text{A.3})$$

La parte diagonal es mas sencilla de obtener, sus elementos son simplemente

$$(H)_{nn} = \langle n_1, n_2, \dots, n_6 | \hat{H}_{int} | n_1, n_2, \dots, n_6 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M n_i (n_i - 1) \quad (\text{A.4})$$

Para la parte fuera de la diagonal una forma de construir la matriz es calcular uno a uno cada elemento, pero este procedimiento no es muy eficiente ya que la mayoría de los elementos son cero, por tanto un procedimiento más eficiente se obtiene respondiendo la pregunta de ¿cual es el renglón y la columna de los elementos diferentes de cero? Físicamente, esto es equivalente a preguntarse, dado un vector arbitrario $|m_1, m_2, \dots, m_6\rangle$ si \hat{H}_{int} actúa sobre este ¿cual es el vector base en el que lo transforma?. Para responder esta cuestión, notamos que hay $2M$ términos de salto en \hat{H}_{cin} , todos en la forma $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$. Así los elementos fuera de la diagonal son

$$(H)_{nm} = \langle n_1, n_2, \dots, n_6 | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j | m_1, m_2, \dots, m_6 \rangle = \sqrt{m_j} \sqrt{m_i - 1} \delta_{n_1, m_1} \delta_{n_2, m_2} \dots \delta_{n_6, m_6} \quad (\text{A.5})$$

De acuerdo a la expresión A.5 dado un vector cualquiera $v = |m_1, m_2, \dots, m_6\rangle$ el elemento $(H)_{nm}$ sera diferente de cero si el vector que resulta de la acción de $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ coincide con $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$

Por tanto basta entonces con etiquetar cada uno de los vectores, lo cual se hizo en la sección anterior y tener también una función $Tag(v)$ que dado un vector base v determine la etiqueta. Así la etiqueta del renglón sera la etiqueta de $|m_1, m_2, \dots, m_6\rangle$ y la etiqueta de la columna sera la etiqueta del vector $|n_1, n_2, \dots, n_6\rangle$.

El siguiente código muestra este procedimiento.

```
def HamiltonianoSparse2(Base, J, U, N, M, identificador):
    D=dimension(N, M, identificador)
    etiqueta=DicTag(Base, N, M, identificador)

    columna=[]
    renglon=[]
    datos=[]
```

```

for i in range(D):
    for m in range(M-1):
        key=Tag(Hamil(Base[i],m,m+1))
        col=etiqueta.get(key)
        if col!=None:

            columna.append(col[0])
            renglon.append(i)
            dat=-J*np.sqrt(Base[i][m+1]*(Base[i][m]+1))
            datos.append(dat)

        key2=Tag(Hamil(Base[i],m+1,m))
        col2=etiqueta.get(key2)
        if col2!=None:

            columna.append(col2[0])
            renglon.append(i)
            dat=-J*np.sqrt(Base[i][m]*(Base[i][m+1]+1))
            datos.append(dat)
    key3=Tag(Base[i])
    col3=etiqueta.get(key3)

    if col3!=None:
        columna.append(col3[0])
        renglon.append(i)
        dat=(U)*numeroInte1(Base[i])
        datos.append(dat)

#indices del renglon
row_ind = np.array(renglon)
#indices de las columnas
col_ind = np.array(columna)
# matriz dispersa
data = np.array(datos, dtype=float)

mat_coo = sp.coo_matrix((data, (row_ind, col_ind)))

H=mat_coo.toarray()
return H

```

Una vez obtenida la matriz Hamiltonina para diganalizarla se usa la función `eig()` contenida en el paquete LAPACK del lenguaje python 3.0

```
En, Vn=LA.eig(H)
```

A.3. Vector de estado en función de tiempo

Ya con el valores propios y vectores propios es posible obtener el vector de estado en función del tiempo, siendo este

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} C_n |E_n\rangle \quad (\text{A.6})$$

donde $C_n = \langle E_n | \psi(0) \rangle$ y $\psi(0)$ es el vector inicial, que para los cálculos se usa la representación en R^D , el código que construye el estado para todo t es el siguiente

```
def psit(t, En, Vn, psi0):
    psitin=np.zeros(len(En), dtype=complex)
    for i in range(len(En)):
        psitin+=np.exp(-1j*Vn[i]*t)*np.dot(Vn[0:, i], psi0)*Vn[0:, i]

    return psitin
```

A.4. Matriz de densidad y entropia de Renyi

Usando el vector de estado a todo tiempo $|\psi(t)\rangle$ se construye la matriz de densidad como

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (\text{A.7})$$

para hacer este producto se emplea la función *kron()*

```
def rhot(t, psi0, vals, ves):
    psi=psit(t, vals, ves, psi0)
    psi2=psi.conjugate()
    psiT=psi2.reshape(len(psi),1)
    psitemp=np.kron(psiT, psi)
    return psitemp
```

A.5. Matriz de densidad reducida un sitio

El cálculo de la matriz de densidad reducida a partir de la definición de sus elementos de matriz

$$(\hat{\rho}_1(t))_{lm} = \sum_{c_2, c_3, c_4, c_5, c_6} \langle l, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho} | m, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle \quad (\text{A.8})$$

tomando como subsistema al primer sitio.

Notamos que si $l \neq m$ los elementos son igual a cero debido a la conservación del número de partículas, por tanto la matriz reducida es diagonal con elementos

$$(\hat{\rho}_1(t))_{mm} = \sum_{c_2, c_3, c_4, c_5, c_6} \langle m, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho} | m, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle \quad (\text{A.9})$$

De esta forma dado el índice m basta con encontrar los elementos de matriz de $\hat{\rho}$ que contribuyen a la suma, o lo que es lo mismo encontrar las etiquetas de los elementos de la base con m partículas en el primer sitio, para esto hacemos una búsqueda elemento por elemento.

```

def Conjuntos1sitio(B,sitio):
    ro_0=[]
    ro_1=[]
    ro_2=[]
    ro_3=[]
    ro_4=[]
    ro_5=[]
    ro_6=[]

    for i in range(len(B)):
        if B[i][sitio]==0:
            ro_0.append(i)
        if B[i][sitio]==1:
            ro_1.append(i)
        if B[i][sitio]==2:
            ro_2.append(i)
        if B[i][sitio]==3:
            ro_3.append(i)
        if B[i][sitio]==4:
            ro_4.append(i)
        if B[i][sitio]==5:
            ro_5.append(i)
        if B[i][sitio]==6:
            ro_6.append(i)

    conj=[ro_6,ro_5,ro_4,ro_3,ro_2,ro_1,ro_0]

    return conj

```

La función $conjunto3(B, sitio)$ entrega un conjunto con el índice de los elementos de $\hat{\rho}$ que contribuyen cuando el subsistema tiene $m = 6, 5, \dots, 0$ partículas.

Teniendo este conjunto la matriz reducida se construye simplemente sumando los elementos de matriz de $\hat{\rho}$ dados por $conjunto3(B, sitio)$

```

def traza_parcial(t,NT,psi0,vals,ves,conj):
    ro=rhot(t,psi0,vals,ves)

```

```

roparcial=np.zeros((NT+1,NT+1),dtype=complex)
for i in range(NT+1):
    for j in conj[i]:
        roparcial[i][i]+=ro[j][j]
return roparcial

```

A.6. Matriz de densidad reducida de subsistemas de dos o más sitios

Como en el caso de un sitio se usa la definición de los elementos de matriz, usaremos de ejemplo el subsistema de dos sitios pero el código usado es válido para cualquier subsistema con mas sitios.

$$[\hat{\rho}_A(t)]_{lm} = \sum_c \langle l_1, l_2 | \langle c_3, c_4, c_5, c_6 | \hat{\rho} | c_3, c_4, c_5, c_6 \rangle | m_1, m_2 \rangle \quad (\text{A.10})$$

Dados l_1, l_2, m_1 y m_2 se buscan todos índices de los vectores $|c_3, c_4, c_5, c_6\rangle |m_1, m_2\rangle$ y $\langle l_1, l_2 | \langle c_3, c_4, c_5, c_6 |$ tales que se cumpla la conservación del número de partículas, los cuales contribuirán al elemento de matriz $[\hat{\rho}_A(t)]_{lm}$ el código que realiza esto es el siguiente

```

def elementosij(B,Bn2,tamSub,tam,s1,s2,s3,s4):
    """
    Esta funcion entrega una lista que contiene los indices de los ←
    elementos
    de matriz de la matriz reducida, (n,m) y como segunda entrada tiene ←
    los indices de
    los elementos de la matriz completa que contribuyen a cada elemento \↔
    rho_nm de
    la matriz reducida
    """
    #print tamSub
    ConjEtiq=conjuntos2a6Partes(Bn2,B,s1,s2,s3,s4,tam)
    totalij=[]

```

```

    for i in range(tamSub):
        for j in range(tamSub):
            totalij.append([i,j,elementosrho2a6partes2(i,j,B,tam,ConjEtiq,←
                s1,s2,s3,s4)])
    return totalij

def matriz2a6sitios(ro,totalij,tamSub):
    """
    Esta funcion toma la lista totalij dada por la funcion elementosij y ←
    construye
    la matriz de densidad reducida
    """
    ro2sitios=np.zeros((tamSub,tamSub),dtype=complex)
    for l in range(len(totalij)):
        for k in totalij[l][2]:
            ro2sitios[totalij[l][0]][totalij[l][1]]+=ro[k[0]][k[1]]

    #Trazaro=-1*np.log(np.trace(np.dot(ro2sitios,ro2sitios)).real)
    return ro2sitios

```

Referencias

- [1] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W Hänsch y Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, 2002.
- [2] VI Yukalov. Cold bosons in optical lattices. *Laser Physics*, 19(1):1–110, 2009.
- [3] I. Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature physics*, 1(1):23, 2005.
- [4] V. S. Letokhov. *Laser control of atoms and molecules*. Oxford University Press on Demand, 2007.
- [5] C. J. Pethick y H. Smith. *Bose–Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge university press, 2008.
- [6] M. P. Kennett. Out-of-equilibrium dynamics of the Bose-Hubbard model. *ISRN Condensed Matter Physics*, 2013, 2013.
- [7] R. Nandkishore y D. A. Huse. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 6(1):15 – 38, 2015.
- [8] S. Goldstein, D. A. Huse, J. L. Lebowitz y R. Tumulka. Thermal Equilibrium of a Macroscopic Quantum System in a Pure State. *Phys. Rev. Lett.*, 115:100402, September 2015.
- [9] S. Goldstein, D. A. Huse, J. L. Lebowitz y R. Tumulka. Macroscopic and microscopic thermal equilibrium. *Annalen der Physik*, 529(7):1600301.

-
- [10] Matthew PA Fisher, Peter B Weichman, G Grinstein y Daniel S Fisher. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Physical Review B*, 40(1):546, 1989.
- [11] R K Pathria y Paul D. Beale. *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 1996.
- [12]
- [13] A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Phys. Rev.*, 47:777 – 780, May 1935.
- [14] J. S. Bell. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, 1(3):195, 1964.
- [15] R. Horodecki, P. Horodeck, M. Horodecki y K. Horodecki. Quantum entanglement. *Reviews of modern physics*, 81(2):865, 2009.
- [16] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico y A. Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, 90(22):227902, 2003.
- [17] A. J. Daley, H. Pichler, J. Schachenmayer y P. Zoller. Measuring Entanglement Growth in Quench Dynamics of Bosons in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 109:020505, July 2012.
- [18] J. H. Bardarson, F. Pollmann y J. E. Moore. Unbounded Growth of Entanglement in Models of Many-Body Localization. *Phys. Rev. Lett.*, 109:017202, July 2012.
- [19] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh y V. Vedral. Entanglement in many-body systems. *Reviews of modern physics*, 80(2):517, 2008.
- [20] H. Li and F. D. M. Haldane. Entanglement Spectrum as a Generalization of Entanglement Entropy: Identification of Topological Order in Non-Abelian Fractional Quantum Hall Effect States. *Phys. Rev. Lett.*, 101:010504, July 2008.
- [21] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner. Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system. *Nature*, 528(7580):77, 2015.

- [22] Adam M. Kaufman, M. Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, Robert Schittko, Philipp M. Preiss, and Markus Greiner. Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system. *Science*, 353(6301):794–800, 2016.
- [23] Walter Greiner and Joachim Reinhardt. *Field quantization*. Springer, 1996.
- [24] I. Bloch, J. Dalibard y W. Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885 – 964, July 2008.
- [25] M. Ueda. *Fundamentals and new frontiers of Bose-Einstein condensation*. World Scientific, 2010.
- [26] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner y P. Zoller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3108–3111, Oct 1998.
- [27] W. Kohn. Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions. *Phys. Rev.*, 115:809 – 821, August 1959.
- [28] B. Capogrosso-Sansone, E. Kozik, N. Prokofev y B. Svistunov. On-site number statistics of ultracold lattice bosons. *Phys. Rev. A*, 75:013619, January 2007.
- [29] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3108 – 3111, October 1998.
- [30] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen, and U. Sen. Ultracold atomic gases in optical lattices: Mimicking condensed matter physics and beyond. *Advances in Physics*, 56(2):243 – 379, 2007.
- [31] B. Sciolla y G. Biroli. Quantum quenches, dynamical transitions, and off-equilibrium quantum criticality. *Physical Review B*, 88(20):201110, 2013.
- [32] S. Trotzky, Y.-A. Chen, A. Flesch, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, J. Eisert y I. Bloch. Probing the relaxation towards equilibrium in an isolated strongly correlated one-dimensional Bose gas. *Nature Physics*, 8:325, February 2012.
- [33] S. R. Clark y D. Jaksch. Dynamics of the superfluid to Mott-insulator transition in one dimension. *Phys. Rev. A*, 70:043612, October 2004.

-
- [34] C. Kollath, A. M. Läuchli, and E. Altman. Quench dynamics and nonequilibrium phase diagram of the Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 98(18):180601, 2007.
- [35] T. D. Kühner, S. R. White y H. Monien. One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbor interaction. *Physical Review B*, 61(18):12474, 2000.
- [36] Michael A Nielsen y Isaac Chuang . Quantum computation and quantum information, 2002.