



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

TERMALIZACIÓN EN SISTEMAS DE BOSONES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

JAVIER ISRAEL DE LA CRUZ MORENO

TUTOR

Dr. JORGE GUSTAVO HIRSCH GANIEVICH



Ciudad Universitaria, Ciudad de México
diciembre de 2017



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno.

De la Cruz
Moreno
Javier Israel
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
412054259

5. Datos del sinodal 3.

Dr.
Fernando
Ramírez
Martínez

2. Datos del tutor.

Dr.
Jorge Gustavo
Hirsch
Ganievich

6. Datos del sinodal 4.

Dr.
Jorge Amin
Seman
Harutinian

3. Datos del sinodal 1.

Dra.
Patricia
Goldstein
Menache

7. Datos del trabajo escrito.

Termalización en Sistemas de Bosones
99 páginas
2017

4. Datos del sinodal 2.

Dr.
Francisco Javier
Sevilla
Pérez

*A mi familia con mi más profundo aprecio,
por su apoyo inquebrantable y constante.*

A Ana por su cariño y compañía incondicional.

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi tutor el Dr. Jorge Hirsch por sus sabios consejos y su paciencia, por su tiempo y sus enseñanzas que me ayudaron a lograr mi objetivo. A mis sinodales por sus observaciones al trabajo y sus comentarios que siempre aportaron para mejorar el texto. A la UNAM por darme un hogar para conocer este gran mundo de la Física.

También quiero agradecer el apoyo a este trabajo dado a través del proyecto **PAPIIT IN109417 Caos y azar en sistemas cuánticos**.

Resumen

La comprensión de la dinámica de los sistemas cuánticos de muchos cuerpos es un problema que ha tenido un interés creciente gracias al gran número de estudios experimentales y a las técnicas de control microscópico que se han desarrollado [1–3]. Una de los grandes preguntas al respecto es cómo y cuándo estos sistemas cuánticos alcanzan estados de equilibrio térmico.

Se usa el neologismo *termalización* para referirse a que estos sistemas relajan a un estado en el que el valor de las variables macroscópicas son universales en el sentido de que no dependen de las condiciones iniciales por muy diferentes que estas puedan ser y que estos valores son predecibles por la mecánica estadística. Sin embargo, no es trivial saber qué características de la mecánica cuántica hacen posible la termalización en sistemas cuánticos cerrados de manera análoga a cómo el caos dinámico hace posible la termalización clásica, pues el caos dinámico por sí mismo no puede ocurrir en un sistema cuántico aislado [4].

En este trabajo se estudia un sistema cuántico cerrado constituido por seis átomos bosónicos colocados en un arreglo lineal de seis sitios. Sobre este sistema en particular uno podría preguntarse ¿Termaliza o no termaliza? En general, dado que la evolución es unitaria, no es posible para el sistema en su conjunto aumentar su entropía. Sin embargo, cuando analizamos la dinámica de diferentes subsistemas, considerando el resto de los componentes del sistema como su baño térmico, los subsistemas llegan a un estado de equilibrio que se puede predecir con un ensemble térmico.

En concreto, el sistema estudiado contiene seis átomos bosónicos colocados en una red óptica lineal de seis sitios, las partículas tienen interacción a primeros vecinos. El sistema es descrito por un Hamiltoniano de Bose-Hubbard en el régimen de interacciones fuertes con respecto al acoplamiento túnel ($J_x/U \ll 1$) y con un átomo por sitio como condición inicial. Al evolucionar en el tiempo se analiza numéricamente la dinámica de la entropía de entrelazamiento del subsistema con el resto del sistema y la estadística de número de ocupación encontrando que estas tienden a una distribución térmica con una temperatura efectiva ajustada al promedio temporal de dichas ocupaciones. En particular,

para el caso en el que el subsistema es un solo sitio se analiza el comportamiento de esta temperatura efectiva como función de la relación entre el acoplamiento túnel y la energía de interacción (J_x/U). En este caso se encuentra un comportamiento continuo y creciente de la temperatura efectiva para el régimen $J_x/U < 1$ y un comportamiento oscilatorio en el caso $J_x/U > 1$.

Los resultados concuerdan con los encontrados experimentalmente por K. M. Kaufman *et al.* [5] para el mismo sistema descrito en este trabajo. Como se ha propuesto en el trabajo de Kaufman y en diferentes trabajos teóricos recientes [6, 7], la entropía de entrelazamiento asume el rol de la entropía térmica en la termalización. El entrelazamiento cuántico crea entropía localmente que valida el uso de la física estadística para observables locales y además es la fuerza que impulsa la termalización en estos sistemas.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Introducción	1
1 Fundamentos Teóricos	3
1.1 Termodinámica de sistemas cuánticos cerrados	3
1.1.1 La hipótesis de termalización	6
1.1.2 Los ensembles térmicos	9
1.1.2.1 Ensemble microcanónico	10
1.1.2.2 Ensemble canónico	10
1.1.2.3 Ensemble de un solo estado	11
1.1.2.4 Ensemble diagonal	11
1.1.2.5 Ensemble gran canónico	12
1.2 Medidas del Entrelazamiento Cuántico	14
1.2.1 La entropía de von Newmann	14
1.2.2 La entropía de Rényi	15
1.3 El modelo de Bose-Hubbard	17
2 Descripción del Experimento	21
2.1 Dinámica de la entropía	25
2.2 Redes ópticas	28
2.3 Sistema de imagen de alta resolución	30
3 Metodología y Resultados	33
3.1 Planteamiento del problema	33
3.1.1 La base del espacio de Hilbert	34
3.1.2 Construcción y diagonalización del Hamiltoniano	35
3.2 Evolución y propiedades globales	37
3.3 Subsistema de un sitio	41
3.4 Subsistema de dos sitios	44
3.5 Subsistema de tres sitios	50
3.6 La temperatura efectiva y la entropía de entrelazamiento	50

4 Conclusiones	55
Apéndices	56
A La Matriz de Densidad	57
A.1 El operador de densidad reducido, la traza parcial	64
B Código Computacional	67
B.1 Construcción de la base del espacio de Hilbert	67
B.2 Operadores de creación y aniquilación y producto interior	71
B.3 Construcción del Hamiltoniano	72
B.4 Diagonalización del Hamiltoniano	74
B.5 La traza parcial	76
B.5.1 Matriz reducida de un sitio	76
B.5.2 Matriz reducida de dos sitios	79
B.5.3 Matriz reducida de tres sitios	80
B.6 Cálculo de las ocupaciones en un ensemble térmico	81
Bibliografía	87

Introducción

Aún cuando clásicamente algunos sistemas muy simples pueden exhibir un comportamiento caótico y así relajarse a un ensemble térmico, los sistemas cuánticos formalmente no lo pueden hacer. Sin embargo, trabajos teóricos y experimentales recientes y en particular, la hipótesis de termalización de auto-estados (ETH por sus siglas en inglés: *Eigenstate Thermalization Hypothesis*) que se basa en la noción de estados cuánticos altamente enredados, indican que los sistemas cuánticos también termalizan [5, 8, 10].

Una de las implicaciones más sorprendentes de la ETH es que la termalización puede ocurrir en sistemas relativamente muy pequeños, con la condición de que la dimensión del espacio de Hilbert escale exponencialmente con el tamaño del sistema. Por ejemplo, en el sistema que se realizó experimentalmente por A.M. Kaufman *et al.* [5] en el cual se prepararon seis átomos bosónicos en una red lineal de seis sitios, el espacio de Hilbert es de dimensión 462.

En el experimento realizado por Kaufman, se demostró la termalización de un sistema cuántico pequeño de bosones en interacción en una red óptica. Mediante la medición directa de la entropía de entrelazamiento de subsistemas, así como de otros observables, demostraron que después del tiempo transitorio inicial, el sistema se relaja localmente a un ensemble térmico mientras que globalmente se mantiene en un estado puro de entropía cero.

El estudio experimental de estos sistemas de muchos cuerpos ha tenido un surgimiento reciente en diferentes campos de la investigación. Esto se da como un resultado del avance en las técnicas experimentales, principalmente en el área de los átomos ultra fríos, pues estos sistemas exhiben un alto grado de aislamiento de las fuentes ambientales de decoherencia. Por lo tanto, con un alto grado de aproximación, durante la duración de los experimentos se les puede considerar como un sistema cuántico cerrado [8].

En este trabajo se estudia el sistema realizado experimentalmente por Kaufman, en el cual se tiene un arreglo lineal de seis átomos de ^{87}Rb con interacciones a primeros vecinos, descrito por un Hamiltoniano de Bose-Hubbard. El sistema tiene inicialmente un átomo por sitio. Al evolucionar en el tiempo, la

estadística de distribución de ocupaciones en un solo sitio se hace térmica, es decir que las ocupaciones pueden predecirse a partir de un ensemble termodinámico. En la tesis se realizan simulaciones numéricas de este sistema para diferentes valores de la interacción. Con esta herramienta se estudia la evolución de la estadística de ocupaciones en uno o varios sitios, la entropía de entrelazamiento entre ese sitio y el resto del sistema y su relación con la termalización.

El objetivo principal es analizar cómo llega al equilibrio dicho sistema aislado. En general, dado que la evolución es unitaria, no es posible para el sistema en su conjunto aumentar su entropía. Sin embargo, si se analiza la evolución dinámica de un subsistema, considerando el resto de los componentes del sistema como su baño térmico, es posible que el subsistema llegue a un estado de equilibrio térmico.

El estudio de la termalización en sistemas cuánticos también tiene muchas implicaciones importantes en la ciencia y las tecnologías futuras. Entender la estructura microscópica de los sistemas complejos puede proveer las herramientas necesarias para el diseño de sistemas que funcionen de forma similar o mejor que los encontrados en la naturaleza, los cuales a menudo operan eficientemente lejos de las condiciones ideales. La comprensión de las condiciones en las cuales la ETH se cumple podrían ser importantes para desarrollar nuevas tecnologías que no sufran las limitaciones termodinámicas habituales.

El contenido de la tesis está organizado de la siguiente manera, en el primer capítulo se presentan los fundamentos teóricos de la termodinámica en sistemas cuánticos cerrados, poniendo énfasis en la hipótesis de termalización de autoestados. En el capítulo dos se muestran las técnicas que fueron usadas en el experimento con seis partículas bosónicas en una red óptica de seis sitios lineales. Los resultados obtenidos de la simulación computacional del sistema se muestran en el capítulo tercero y por último en el cuarto capítulo se encuentran las conclusiones del trabajo.

Capítulo 1

Fundamentos Teóricos

Aún cuando muchos de los fundamentos de la mecánica cuántica estadística fueron formulados a la par de los de la mecánica cuántica, hace cerca de un siglo [9], el tema ha reaparecido en diferentes campos de la investigación [5, 10, 11]. Este resurgimiento ha ocurrido por el desarrollo de métodos y técnicas en la física molecular, atómica y en el área de la materia condensada, lo cual ha permitido construir, controlar y estudiar una gran variedad de sistemas cuánticos. Tales sistemas extienden nuestra habilidad para entender la mecánica cuántica de muchos cuerpos y también abren la posibilidad de usarlos para la construcción de componentes para nuevas tecnologías cuánticas.

En este capítulo se presenta una revisión de los principales avances teóricos en el estudio de la termalización de sistemas cuánticos de muchos cuerpos y se analiza brevemente el modelo de Bose-Hubbard, el cual describe la dinámica del sistema cuántico que se está estudiando.

1.1 Termodinámica de sistemas cuánticos cerrados

Muchas formulaciones de la mecánica cuántica estadística postulan que el sistema de interés está en contacto con un reservorio o baño externo, con ciertas propiedades del reservorio que se dan por hecho. Sin embargo, recientes progresos experimentales en sistemas cuánticos aislados, tal como en los gases ultrafríos de átomos neutros, motivan una reconsideración de la mecánica estadística de los sistemas cuánticos cerrados, es decir, sistemas que no están en contacto con reservorios externos [8] (ver Figura 1.1). La descripción mecánica estadística de sistemas cuánticos cerrados es importante como un punto de partida. Pues si asumimos que un reservorio o un dispositivo para medir también es un sistema cuántico, este puede ser incluido en un sistema cuántico de muchos cuerpos.

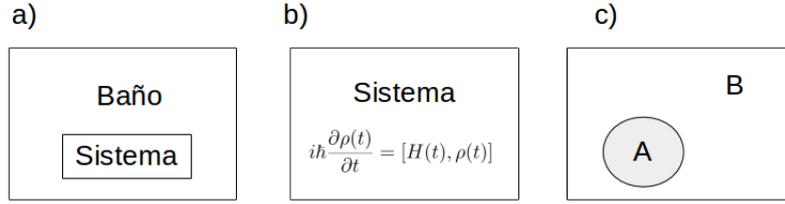


Figura 1.1: a) La mecánica cuántica estadística asume que el sistema de interés está acoplado a un reservorio con el que puede intercambiar partículas y energía. b) En este trabajo se estudia la mecánica de un sistema aislado que evoluciona unitariamente, es decir, no hay reservorio externo. c) Si el sistema se parte en un subsistema (A) y el resto, en un subsistema (B) y el subsistema (A) termaliza, entonces el resto del sistema puede actuar como un reservorio.

Cuando uno de estos sistemas cerrados es perturbado significativamente, por ejemplo con un cambio súbito en el Hamiltoniano (conocido como *quench*), se puede predecir la dinámica resultante del sistema conociendo la distribución de los estados propios del Hamiltoniano mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger [9]

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H|\Psi(t)\rangle. \quad (1.1)$$

A cualquier tiempo t , el sistema tendrá amplitudes de probabilidad que dependerán de los autoestados poblados debido al *quench* y por los valores de las energías propias del Hamiltoniano. En muchos casos, estos sistemas pueden ser extremadamente difíciles de simular, frecuentemente porque la dinámica resultante ocasiona una gran cantidad de entrelazamiento [12–15].

Aún cuando el sistema estudiado sea cerrado, en algunos casos es capaz de actuar como su propio reservorio, es decir, la dinámica es tal que para un subsistema que contiene solo una pequeña fracción de grados de libertad del sistema completo, el acoplamiento al resto del sistema imita un acoplamiento con un reservorio [16] (Figura 1.2). Si la dinámica satisface esta propiedad entonces se dice que el sistema termaliza localmente y el ensemble canónico y gran canónico dan todas las propiedades de equilibrio a largo plazo para los subsistemas.

Sin embargo, no todos los sistemas cerrados actúan como un reservorio que termalice sus propios subsistemas. Por ejemplo, los sistemas localizados identificados por Anderson [16, 17], no actúan como un reservorio para ellos mismos y por lo tanto no termalizan. En lugar de eso los estados de los subsistemas a tiempos largos están determinados por algunos detalles del estado inicial del sistema.

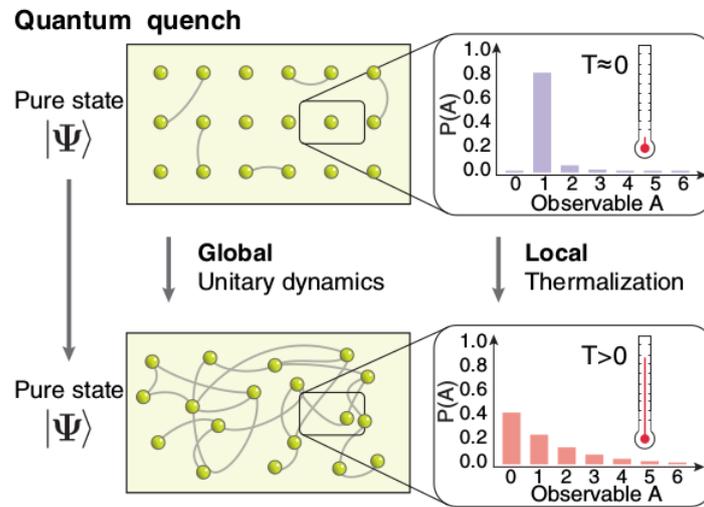


Figura 1.2: **Esquema de la dinámica de la termalización.** Un sistema cuántico aislado a temperatura cero puede ser descrito por una función de onda $|\Psi\rangle$. Los subsistemas son también puros siempre y cuando el entrelazamiento (representado por las líneas grises) sea despreciable. Si se realiza un *quench* el sistema evolucionará unitariamente, generando entrelazamiento entre todas sus partes mientras el sistema completo permanece puro (Figura tomada de [5]).

Por otro lado en mecánica estadística, cuando un sistema está en equilibrio térmico se puede caracterizar completamente por una pequeña cantidad de variables termodinámicas (temperatura, presión, potencial químico...etc. Un parámetro por cada una de las cantidades extensivas que se conservan), lo que sugiere que el proceso de llegar a equilibrio térmico está asociado con la pérdida de información de su estado inicial. Sin embargo, un sistema cuántico cerrado evoluciona unitariamente, es decir, no puede perder información, y por lo tanto toda la información cuántica debe ser preservada en el sistema para todo tiempo.

La solución a esta aparente paradoja es que la memoria de las propiedades locales del estado inicial del sistema no es borrada por la evolución unitaria, sino que se distribuye si el sistema se termaliza. La dispersión del entrelazamiento cuántico mueve la información sobre el estado inicial de modo que a largo plazo es inaccesible, ya que recuperar esta información requeriría hacer mediciones con operadores globales. Este es el proceso de decoherencia.

Por consiguiente, si consideramos un subsistema, la termalización significa que a tiempos largos, el estado del subsistema es como si este estuviera en equilibrio térmico en contacto con un baño a temperatura T , con potencial químico μ , etc., porque de hecho así lo está, con el reservorio siendo el resto del

sistema cerrado con el que está en contacto (Figura 1.1). Es esta capacidad de los sistemas cuánticos para actuar como reservorios para sus subsistemas que sustenta la mecánica estadística cuántica de equilibrio. Una de las propuestas para explicar teóricamente el proceso mediante el cual un sistema cuántico termaliza, es la hipótesis de termalización de autoestados, que se presenta en los siguientes párrafos.

1.1.1 La hipótesis de termalización

La hipótesis de termalización de autoestados (ETH del inglés *Eigenstates Thermalization Hypothesis*) es un conjunto de ideas que pretenden explicar cuándo y por qué un sistema cuántico aislado puede ser descrito usando el formalismo de la mecánica estadística, el término *termalización de autoestados* fue introducido por M. Srednicki [18] después de algunas ideas similares expuestas por J. Deutsch [19]. Básicamente, el principio en el cual se sustenta la ETH es que se debe analizar el comportamiento de los elementos de matriz de los observables del sistema en la representación de la energía para determinar si el sistema termaliza.

Suponga que se tiene un sistema cuántico aislado, sea H el Hamiltoniano del sistema, entonces un conjunto completo del espacio de Hilbert del sistema está dado por los autoestados del Hamiltoniano que cumplen con la ecuación de valores propios

$$H |n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad (1.2)$$

con E_n el valor propio del estado $|E_n\rangle$. Un estado inicial $|\psi_0\rangle$ es expresado en la base de la energía como

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |E_n\rangle. \quad (1.3)$$

Si H no depende explícitamente del tiempo, la evolución temporal del estado inicial está descrita por ($\hbar = 1$)

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi_0\rangle = \sum_n c_n e^{-i\hat{H}t} |E_n\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t} |E_n\rangle, \quad (1.4)$$

con $c_n = \langle E_n | \psi(0) \rangle$. Sea $\mathcal{O}(t)$ un observable del sistema, entonces la evolución

del valor esperado de $\mathcal{O}(t)$ es

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O}(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle \\
&= \sum_{m,n} \langle E_m | c_m^* e^{iE_m t} \mathcal{O} c_n e^{-iE_n t} | E_n \rangle \\
&= \sum_{m,n} c_m^* c_n e^{i(E_m - E_n)t} \mathcal{O}_{mn}, \\
&= \underbrace{\sum_m |c_m|^2 \mathcal{O}_{mm}}_{S_{diag}} + \underbrace{\sum_{m,n \neq m} c_m^* c_n e^{i(E_m - E_n)t} \mathcal{O}_{mn}}_{S_{off}}.
\end{aligned} \tag{1.5}$$

donde $\mathcal{O}_{mn} = \langle E_m | \mathcal{O} | E_n \rangle$.

La ETH dice que para un estado inicial arbitrario, el valor esperado de \mathcal{O} evolucionará en el tiempo hasta alcanzar el valor predicho por el ensemble microcanónico y tendrá pequeñas oscilaciones alrededor de este valor si las dos condiciones siguientes se cumplen [20].

1. El primer término, S_{diag} , toma un valor $\bar{\mathcal{O}}$ que varía ligeramente con la energía y la diferencia entre los elementos diagonales consecutivos $\mathcal{O}_{m,m}$, $\mathcal{O}_{m+1,m+1}$ es exponencialmente pequeña con el tamaño del subsistema.
2. El segundo término, S_{off} , es pequeño comparado con el término S_{diag} y es exponencialmente pequeño con el tamaño del sistema.

Respecto a la condición 1, el ensemble microcanónico predice un valor para los observables macroscópicos que depende solo de la energía promedio del sistema. Sin embargo, S_{diag} contiene términos que depende explícitamente de la distribución inicial de las poblaciones, lo cual sugiere que el valor a tiempos largos del observable \mathcal{O} depende de los detalles iniciales del sistema, más que del valor promedio de la energía.

La ETH resuelve este enigma al afirmar que el *quench* puebla, sobre todo, los estados propios que se encuentran lejos del borde del espectro, y que estos estados se aproximan a aquellos de la teoría de matrices aleatorias [5]. La ETH propone que estos estados propios se ven localmente térmicos y que el valor esperado de los observables varía ligeramente entre estados con energía cercana. Esto implica que las probabilidades exactas de la condición S_{diag} no son cuantitativamente relevantes en la suma, ya que el término $\mathcal{O}_{m,m}$ puede ser aproximadamente factorizado fuera de la suma.

Respecto a la condición 2, mientras que para tiempos cortos en comparación con la propagación en las frecuencias propias pobladas, las fases relativas de

cada componente en S_{off} son afinadas para coincidir con el estado inicial, para tiempos largos las fases relativas son aleatorias. Evidentemente, este desfase asegura que $S_{off} \rightarrow 0$, pero la escala de tiempo para este proceso viene dada por el valor "típico" de la brecha más pequeña en el espectro. En un sistema general de muchos cuerpos, este valor puede ser exponencialmente pequeño, lo que conduciría a un tiempo de termalización infinito, pero para los sistemas donde la ETH se cumple, la repulsión de niveles asegura que este valor de separación "típico" permanece finito.

Por lo tanto, la ETH afirma que los elementos fuera de la diagonal de \mathcal{O} en la base propia de la energía son despreciables en comparación con las elementos de la diagonal, de modo que este segundo término se amortigua a un valor que no influye en el estado estacionario de $\langle \mathcal{O} \rangle$ [4, 10].

La ETH es una hipótesis, no es cierta para una amplia clase de sistemas, como ya se dijo, un ejemplo son aquellos sistemas que exhiben localización de Anderson debido a la interacción de muchos cuerpos [17]. Evidenciar que en un sistema se cumple la ETH es un problema difícil de probar numéricamente porque requiere la obtención de los estados propios de muchos cuerpos del Hamiltoniano a partir de una diagonalización exacta y extrapolando al límite termodinámico. Para tener termalización de todos los estados iniciales que realmente pueden ser preparados, parece que uno no necesita que la ETH se cumpla para absolutamente todos los estados propios. Pero el escenario más simple y al parecer el más plausible es que si la ETH es cierta para un sistema dado a una temperatura dada entonces es cierta para para cualquier condición del sistema [16, 20, 21].

Mediante el formalismo de la matriz de densidad y el concepto de traza parcial se pueden conseguir varios resultados del sistema que se está estudiando. En el [Apéndice A](#) se muestran las principales propiedades de la matriz de densidad y del concepto de traza parcial. La ETH se puede expresar en este formalismo de la siguiente manera. Consideremos la base de autoestados del Hamiltoniano $\{|E_n\rangle\}$, la dinámica de $\rho(t)$ en esta base es simple: las poblaciones $\langle E_n|\rho|E_n\rangle$ son constantes, mientras las coherencias $\langle E_n|\rho|E_m\rangle$ oscilan en el plano complejo con una tasa constante dada por la diferencia de energía de los dos estados involucrados

$$\rho_{nm}(t) = \rho_{nm}(0)e^{i(E_m - E_n)t}. \quad (1.6)$$

Si el sistema completo está en el estado $|E_n\rangle$, entonces $\rho = \rho^n = |E_n\rangle\langle E_n|$, y así la matriz de densidad del subsistema A es $\rho_A^n = Tr_B(|E_n\rangle\langle E_n|)$ (donde Tr_B indica trazar sobre los estados del subsistema B), la ETH afirma que en el límite termodinámico el subsistema está en equilibrio térmico: $\rho_A^n = \rho_A^{eq}(T_n)$, es decir que la matriz de densidad es indistinguible a de una matriz de densidad térmica con temperatura T_n . Para esto se requiere que los elementos de

matriz de los operadores del subsistema entre distintos autoestados tiendan a cero suficientemente rápido en el límite termodinámico [4, 20]. Esto es necesario para asegurar que las fluctuaciones temporales de $\rho_A(t)$ se desvanezcan.

Se puede demostrar entonces que si la ETH es cierta y el estado ρ del sistema es diagonal en la base de la energía, entonces todos los subsistemas están en equilibrio térmico. Esto plantea la pregunta: ¿Cuándo la ETH es verdadera? ¿Cómo se construye un estado fuera de equilibrio? La respuesta es que los estados fuera de equilibrio tienen una estructura especial fuera de la diagonal cuando ρ está escrita en la base de estados propios de la energía. Por lo tanto, tienen patrones de coherencia especiales entre autoestados de diferentes energías [16].

En este sentido, la termalización cuántica de un estado inicial fuera del equilibrio requiere que la contribución de los elementos no diagonales de la matriz de densidad a los operadores locales se desvanezca para tiempos largos. Esto ocurre debido al desfase, aunque los términos diagonales de ρ son independientes del tiempo (en la base de la energía) los elementos fuera de la diagonal tienen fases que oscilan en el tiempo con frecuencia proporcional a la diferencia de energía entre los estados propios de la energía. Por tanto, la evolución unitaria en el tiempo comprime las fases de los términos fuera de la diagonal en ρ de manera que en tiempos largos y en el límite termodinámico sus contribuciones a cualquier observable local vienen con fases efectivamente aleatorias y por lo tanto se cancelan.

Por otro lado, en términos de la mecánica estadística, si se considera un subsistema cualquiera, conforme pasa el tiempo el subsistema cambia continuamente de un microestado a otro, de tal forma que, en un lapso razonable, todo lo que se observa es un comportamiento promediado sobre los microestados por los que pasa el subsistema. Por lo tanto, si consideramos, por un instante, un número bastante grande de subsistemas, todos siendo una copia del subsistema dado y que están caracterizados por el mismo estado macroscópico pero en todas las configuraciones posibles de los microestados, se puede suponer razonablemente que el comportamiento promedio de un sistema en este conjunto, al cuál se le llama *ensemble*, es igual al comportamiento del sistema cuando se le promedia en el tiempo, es bajo este supuesto que se desarrolla la teoría de ensembles en la mecánica estadística [22].

1.1.2 Los ensembles térmicos

Como ya se mencionó, la ETH implica una equivalencia entre los valores esperados locales de un sistema de muchos cuerpos que sufrió un *quench* y los de la matriz de densidad térmica con la misma energía promedio total que la del sistema de muchos cuerpos.

Consideremos que el sistema está inicializado en el estado $|\psi_0\rangle$, de un Hamiltoniano inicial H_0 . Al tiempo $t = 0$ se realiza un *quench* y el Hamiltoniano del sistema ahora es H_q , después de lo cual se permite que el sistema evolucione un determinado tiempo. Una forma de comprobar la termalización es calculando las predicciones para valores esperados de varios observables locales, basados en diferentes ensembles termodinámicos.

1.1.2.1 Ensemble microcanónico

El ensemble microcanónico es una mezcla estadística, con igual probabilidad, de todos los estados propios que se encuentren en un intervalo dado de energía alrededor de la energía del estado inicial $|\psi_0\rangle$. En el Hamiltoniano H_q , el estado inicial tiene una energía

$$E^0 \equiv \langle \psi_0 | H_q | \psi_0 \rangle. \quad (1.7)$$

Los estados propios de H_q , $|E_i^{(q)}\rangle$, tienen energías $E_i^{(q)}$. Entonces el ensemble microcanónico está compuesto por N_{mc} estados propios de H_q que cumplen que $|E_i^{(q)} - E^0| < \delta E$. El ensemble microcanónico puede ser representado por la matriz de densidad [22] :

$$\rho_{ij}^{mc} = \begin{cases} \frac{1}{N_{mc}} & \text{si } i = j \text{ y } |E_i^{(q)} - E^0| < \delta E \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (1.8)$$

1.1.2.2 Ensemble canónico

El ensemble canónico es una mezcla estadística de todos los estados propios en el sistema, ponderados por el factor de Boltzmann, $Exp(-E_i^{(q)}/k_B T)$. La temperatura en el factor de Boltzmann se puede fijar mediante la estipulación de que la energía media de este ensemble térmico coincide con la energía del estado inicial, es decir, T tal que

$$Tr(H_q \rho^{ce}) = \langle \psi_0 | H_q | \psi_0 \rangle. \quad (1.9)$$

Otra forma de encontrar la temperatura para la cual el ensemble canónico da la mejor aproximación a los observables del sistema, es realizando un ajuste por mínimos cuadrados no lineales de los promedio temporales de dichos observables, tal como se hace en este trabajo. En la ecuación (1.9) la matriz de

densidad térmica ρ^{ce} , tiene la siguiente forma

$$\rho_{ij}^{ce} = \begin{cases} e^{-\frac{E_i^{(q)}}{k_B T}} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (1.10)$$

En este caso el valor esperado de un operador A estará dado por

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho^{ce} A) / Z, \quad (1.11)$$

donde Z es la función de partición $Z = \text{Tr}(\rho^{ce})$.

1.1.2.3 Ensemble de un solo estado

La ETH motiva la introducción de un nuevo conjunto de ensembles para su uso en la mecánica cuántica estadística, a saber, los ensembles de un solo estado que consisten de un estado propio del Hamiltoniano del sistema completo. Cuando la ETH es cierta, todos estos ensembles dan las propiedades térmicas de equilibrio correctas de subsistemas, justo como los ensembles tradicionales de la mecánica cuántica estadística.

Los ensembles de un solo estado podrían ser vistos como el caso límite del ensemble microcanónico en el cual la ventana de energía ha sido reducida al límite en el que solo contiene un eigenestado. La recompensa de la introducción de estos nuevos ensembles y la resultante mecánica estadística de un solo estado se hace evidente cuando se consideran sistemas que no obedecen a la ETH.

El valor esperado en este caso está dado por,

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{SE} = \langle E_i^{(q)} | \mathcal{A} | E_i^{(q)} \rangle. \quad (1.12)$$

1.1.2.4 Ensemble diagonal

El ensemble diagonal es una mezcla estadística de todos los estados propios del Hamiltoniano H_q , con la ponderación dada por sus amplitudes después del *quench*.

$$\rho_{ij}^D = \begin{cases} |\langle \psi_0 | E_i^{(q)} \rangle|^2 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (1.13)$$

Este ensemble lleva toda la información sobre las amplitudes de los estados propios, pero ignora todas sus fases relativas.

1.1.2.5 Ensemble gran canónico

El ensemble gran canónico corresponde a un subsistema A en el que se intercambia energía y partículas con un baño térmico, este requiere el cálculo de la temperatura y el potencial químico para el subsistema asociado al observable de interés. El operador de densidad en este caso está dado por

$$\rho_{gc} = \frac{1}{Z} \sum_{i,N} |E_A^{N,i}\rangle \langle E_A^{N,i}| e^{-(E_A^{N,i} - \mu N)/k_B T}. \quad (1.14)$$

En donde $E_A^{N,i}$ es la energía del Hamiltoniano H_A^N del subsistema A con N partículas en donde i enumera la energía propia.

Como se dijo en párrafos anteriores, la mecánica estadística asume que el sistema de interés se encuentra en contacto con un reservorio formando así una separación bipartita del sistema completo. Una propiedad muy importante del entrelazamiento bipartita es el hecho de que ignorar información de uno de los subsistemas resulta en que el otro se convierta en una mezcla estadística de estados cuánticos [2].

Esta mezcla estadística representada en el estado del subsistema, puede ser cuantificada midiendo la pureza cuántica definida como $Tr(\rho^2)$. Mientras que para un estado cuántico puro se tiene que $Tr(\rho^2) = Tr(\rho) = 1$, para una mezcla estadística $Tr(\rho^2) < 1$ (ver las propiedades de la matriz de densidad en el [Apéndice A](#)). En el caso en el que el estado del sistema sea separable, es decir $|\psi_{AB}\rangle$ se escribe como el producto de los estados de cada subsistema (ver [Figura 1.3](#)) se cumple que

$$Tr(\rho_A) = Tr(\rho_B) = Tr(\rho_{AB}) = 1. \quad (1.15)$$

Por otro lado, si se trata de un estado entrelazado los subsistemas se vuelven menos puros en comparación con el estado del sistema completo y los operadores de densidad reducidos cumplen con las desigualdades

$$\begin{aligned} Tr(\rho_A^2) &< Tr(\rho_{AB}^2) \\ Tr(\rho_B^2) &< Tr(\rho_{AB}^2) \end{aligned} \quad (1.16)$$

Las cuales se pueden representar en términos de medidas de entropía en el sistema.

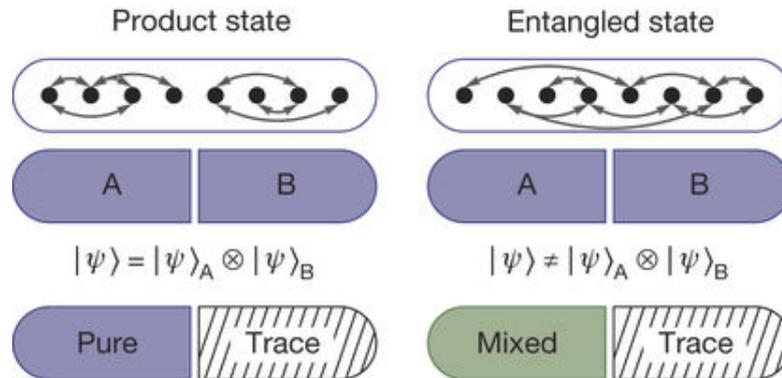


Figura 1.3: **Entrelazamiento bipartita.** Un estado cuántico general de muchos cuerpos tiene correlaciones cuánticas, representadas por las flechas, entre diferentes partes. Si el sistema se divide en dos subsistemas A y B , estos se entrelazarán cuando haya correlaciones cuánticas entre ellos (figura de la derecha). Solo cuando no hay entrelazamiento bipartita el estado del sistema se puede representar como un estado producto de $|\psi_A\rangle$ y $|\psi_B\rangle$ (figura de la izquierda). Cuando se realizan mediciones sobre un subsistema A ignorando la información del subsistema B (es decir, trazando sobre el subsistema B), el subsistema A tendrá un estado mezclado proporcional al grado de entrelazamiento con el subsistema B (figura tomada de [2]).

1.2 Medidas del Entrelazamiento Cuántico

Entender el entrelazamiento en un sistema de muchos grados de libertad es uno de los problemas más grandes que conectan a la teoría de la información cuántica con la física estadística. En los últimos años, muchas formas de medir el entrelazamiento se han propuesto y han sido calculadas en el estado base de varios sistemas de muchos cuerpos [12]. A pesar de esto, todavía no hay consenso sobre la medida correcta del entrelazamiento en el estado fundamental de un sistema de muchos cuerpos.

El entrelazamiento en un sistema bipartita se define de la siguiente manera. Un estado puro no está entrelazado si y solo si este puede ser escrito como el producto tensorial de estados puros de sus partes [13]. Además, para cada estado bipartita $|\psi_{AB}\rangle$ existen dos bases ortonormales $\{|\psi_{A,i}\rangle\}$ y $\{|\phi_{B,j}\rangle\}$ en donde $|\psi_{AB}\rangle$ se escribe como

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_{A,i}\rangle |\phi_{B,i}\rangle. \quad (1.17)$$

Donde α_i son coeficientes positivos. A esta descomposición se la llama la descomposición de Schmidt y la base particular corresponde a la base propia de los operadores de densidad $\rho_{A/B} = Tr_{B/A}(|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|)$. Es decir los operadores ρ_A y ρ_B tienen espectro común y por lo tanto los estados están igualmente mezclados.

Dado que solo los estados producto pueden conducir a una matriz de densidad pura, una medida de cuantificar el entrelazamiento en este caso es medir que tan mezclados se encuentran [13].

Formalmente una medida del entrelazamiento está definida si cumple con los requerimientos: 1) Es invariante bajo operadores unitarios locales. 2) Es continua. 3) Es aditiva, es decir, la medida del entrelazamiento de un estado producto es la suma de la entropía de cada estado. Una de las medidas que satisface estos requerimiento es la entropía de von Newmann [13].

1.2.1 La entropía de von Newmann

Dada la matriz de densidad ρ_A del subsistema A , se define la entropía de von Newmann como

$$S_A = -Tr_A(\rho_A \text{Log}(\rho_A)). \quad (1.18)$$

Para calcular S_A es conveniente expresar la matriz de densidad en la base

de sus autoestados

$$\rho_A = \sum_i r_i |r_i\rangle \langle r_i|, \quad (1.19)$$

donde r_i es el i -ésimo autovalor del autoestado $|r_i\rangle$. En este caso, como ρ_A es diagonal, tenemos que $\text{Log}(\rho_A)$ también es diagonal, con $\text{Log}(r_i)$ como su i -ésimo elemento en la diagonal. Es decir, se cumple que $\text{Log}(\rho_A) = \sum_i \text{Log}(r_i) |r_i\rangle \langle r_i|$, esta igualdad se usa en el segundo párrafo del siguiente desarrollo

$$\begin{aligned} S_A &= -\text{Tr}_A(\rho_A \text{Log}(\rho_A)) \\ &= -\text{Tr}_A\left(\left(\sum_l r_l |r_l\rangle \langle r_l|\right)\left(\sum_i \text{Log}(r_i) |r_i\rangle \langle r_i|\right)\right) \\ &= -\text{Tr}_A\left(\sum_{li} r_l \text{Log}(r_i) |r_l\rangle \langle r_l| r_i\rangle \langle r_i|\right) \\ &= -\text{Tr}_A\left(\sum_{li} r_l \text{Log}(r_i) |r_l\rangle \langle r_i| \delta_{li}\right) \\ &= -\sum_i r_i \text{Log}(r_i). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Si ρ_A representa un estado puro entonces $\rho_A^2 = \rho_A$ por lo tanto $r_i^2 = r_i$ y $r_i \text{Log}(r_i) = 0$ para todo i asumiendo que $0 \text{Log}(0) = 0$. Por lo tanto, en el caso de que el estado sea puro, la entropía de von Neumann es cero.

1.2.2 La entropía de Rényi

En general la entropía de Rényi de orden n , está definida por una matriz de densidad reducida del subsistema A como

$$S_n(\rho_A) = \frac{1}{1-n} \text{Log}(\text{Tr}[\rho_A^n]), \quad (1.21)$$

Mediante las ecuaciones (1.16) y (1.21) vemos que la pureza está relacionada con la entropía de Rényi de segundo orden ($n = 2$)

$$S_2(\rho_A) = -\text{Log}(\text{Tr}[\rho_A^2]). \quad (1.22)$$

En términos de la entropía de Rényi de segundo orden, las relaciones suficientes para demostrar entrelazamiento entre los subsistemas son

$$\begin{aligned} S_2(\rho_A) &> S_2(\rho_{AB}) \\ S_2(\rho_B) &> S_2(\rho_{AB}) \end{aligned} \quad (1.23)$$

Cuando se discute la pureza global como una entropía, se usa la formulación de Rényi en términos de la matriz de densidad global ρ en oposición a una matriz de densidad reducida ρ_A .

Es importante enfatizar que la relación termodinámica definida de la mecánica estadística con la definición de von Neumann no se aplica directamente al caso de la de entropía de Rényi. Sin embargo, ambas cantidades miden la propagación incoherente en el espacio de Hilbert asociada a la entropía, y la entropía de Rényi es accesible directamente por las mediciones [5].

1.3 El modelo de Bose-Hubbard

Como se mencionó en la [Introducción](#), el sistema que se está estudiando está descrito por un Hamiltoniano de Bose-Hubbard. Este modelo se analiza en los siguientes párrafos.

El modelo de Bose-Hubbard describe la física de un sistema de bosones interactuantes. Con este modelo se pueden estudiar diferentes sistemas físicos, tal como átomos bosónicos localizados en una red óptica o algunas clases de aisladores magnéticos cuánticos. Los bosones interactuantes pueden ser descritos por el Hamiltoniano (llamado Hamiltoniano de Bose-Hubbard)

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1). \quad (1.24)$$

El primer término es el correspondiente a la energía cinética, el cual describe el acoplamiento túnel J entre los vecinos i y j mientras que los operadores b_i^\dagger y b_i son los operadores de creación y aniquilación de una partícula del sitio i .

El segundo término describe la interacción de un sitio. En este término el operador n_i es el operador de número definido como

$$n_i = b_i^\dagger b_i. \quad (1.25)$$

Este operador tiene como valor esperado el número de partículas del sitio i .

Solo cuando dos partículas están colocadas en el mismo sitio de la red pueden interactuar con una energía U de atracción ($U < 0$) o de repulsión ($U > 0$). Un término como este describe bien la interacción entre átomos neutros ultra fríos en potenciales periódicos ya que sus interacciones son de corto alcance y no existen fuerzas de Coulomb de largo alcance entre las partículas [23].

La dimensión del espacio de Hilbert del modelo está dada por la ecuación

$$D_b = \frac{(N_b + L - 1)!}{N_b!(L - 1)!} \quad (1.26)$$

En donde D_b es la dimensión del espacio, N_b el número de bosones localizados en la red y L el número de sitios en la red. Así, para el caso del sistema en estudio $N_b = L = 6$ y $D_b = 462$.

Como lo muestra la ecuación (1.26) la dimensión del espacio crece polinomialmente cuando el número de bosones o el número de sitios se encuentra fijo,

sin embargo cuando la densidad de bosones es constante ($n_b = N_b/L = cte$) el espacio de Hilbert crece exponencialmente con el número de sitios.

$$D_b \sim \left[(1 + n_b) \left(1 + \frac{1}{n_b} \right)^{n_b} \right]^L \quad (1.27)$$

Experimentalmente, cuando se construye un sistema de bosones interactuantes que pueden ser descritos por el modelo de Bose-Hubbard el sistema exhibe dos principales estados fundamentales.

Para el caso de interacciones débiles con respecto a la energía cinética $J/U \gg 1$, el sistema forma un estado de la materia conocido como *condensado de Bose-Einstein (BEC)*, donde cada átomo está deslocalizado en la red. En este caso el sistema se puede describir como una onda y la distribución de los átomos en la red sigue una distribución de Poisson [23].

Para el caso de interacciones grandes con respecto a la energía cinética $J/U \ll 1$, el sistema entra en el estado fuertemente correlacionado de un aislador Mott, en el cual los átomos están colocados en un sitio bien localizado de la red con un número fijo de partículas por sitio (ver Figura 1.4). En este caso el sistema no puede ser descrito por una onda de materia coherente y no se puede observar un patrón de interferencia para interacciones muy grandes en los átomos.

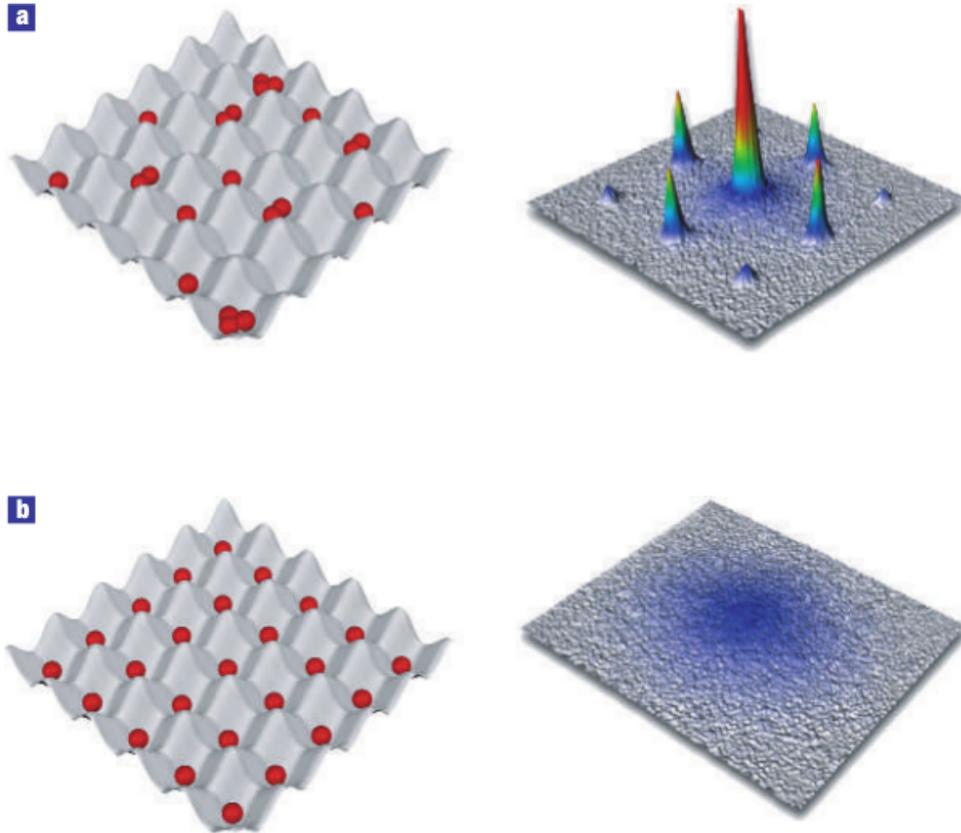


Figura 1.4: **Transición de un superfluido a un aislador de mott.** a) En el estado superfluido de un condensado de Bose-Einstein, los átomos pueden ser descritos como una onda de materia macroscópica. En este caso la fase de la onda está bien definida y el número de átomos en cada sitio fluctúa. b) En el otro límite del estado de aislador de Mott, cada sitio de la red contiene un número fijo de átomos pero la fase de la onda de materia permanece incierta. En este caso no se puede observar la interferencia de la onda y el sistema puede ser descrito por un Hamiltoniano de Bose-Hubbard. (Figura tomada de [23]).

Capítulo 2

Descripción del Experimento

En este capítulo se hace una descripción breve de las técnicas usadas en el experimento de A.M. Kaufman *et al.* [5] y se presentan algunos de los resultados que obtuvieron.

En los últimos años el uso de los gases cuánticos ultra fríos en experimentos ha tenido un gran crecimiento, esto se debe al hecho de que estos sistemas presentan un notable grado de aislamiento de las fuentes de decoherencia y disipación y por lo tanto, con un alto grado de aproximación, durante los experimentos estos se consideran como sistemas cuánticos cerrados. Con base en esto, se han realizado un gran número de experimentos para investigar temas como la dinámica cuántica coherente en redes ópticas, transiciones de fase cuánticas y termalización en sistemas cuánticos de baja dimensión, entre otros [8].

Uno de los aspectos más importantes en estos experimentos, es el desarrollo de técnicas microscópicas de medición que puedan revelar propiedades de sistemas complejos que no son accesibles por medio de mediciones estadísticas de ensembles [1].

Para el experimento se utilizó un condensado de Bose-Einstein de átomos de ^{87}Rb atrapados en una red óptica localizada en el foco de un sistema de imagen de alta resolución [1, 3]. El sistema está descrito por el Hamiltoniano de Bose-Hubbard,

$$H = -(J_x \sum_{x,y} b_{x,y}^\dagger b_{x+1,y} + J_y \sum_{x,y} b_{x,y}^\dagger b_{x,y+1} + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{x,y} n_{x,y}(n_{x,y} - 1), \quad (2.1)$$

donde $b_{x,y}^\dagger$, $b_{x,y}$ y $n_{x,y} = b_{x,y}^\dagger b_{x,y}$ son el operador de creación, aniquilación y el operador de número del sitio $\{x, y\}$. Los átomos pueden tunear entre sitios vecinos de la red a una tasa J_i y experimentar una energía de interacción por

parejas U cuando un sitio es ocupado por múltiples átomos.

Se tiene control independiente sobre las tasas de tuneleo J_x y J_y mediante el control de la profundidad de la red, lo cual puede sincronizarse para producir $J/U \ll 1$ o $J/U \gg 1$. Adicionalmente se puede sobreponer a la red potenciales arbitrarios usando un dispositivo digital colocado en el plano de Fourier del sistema de imagen [24](el cual se describe en la sección 2.3).

Para iniciar el experimento, se aisló una plaqueta de 2×6 sitios con un átomo en cada uno de los sitios como se muestra en la Figura 2.1 A. En este punto, cada sistema está en un estado producto de estados de Fock de un átomo en cada uno de los sitios constituyentes, es decir

$$|\psi(0)\rangle = |111111\rangle. \quad (2.2)$$

Repentinamente, se enciende el tuneleo en la dirección x mientras el tuneleo en la dirección y se suprime. Cada cadena es restringida a los seis sitios lineales introduciendo una barrera al final de las cadenas para prevenir el tuneleo hacia afuera del sistema. Así el Hamiltoniano del sistema después del *quench* es

$$H_q = -J_x \sum_x (b_x^\dagger b_{x+1} + b_{x+1}^\dagger b_x) + \frac{U}{2} \sum_x n_x (n_x - 1). \quad (2.3)$$

El estado inicial representa un estado altamente excitado para el Hamiltoniano y que tiene superposición significativa con un número apreciable de estados propios de la energía. Cada cadena representa una copia idéntica pero independiente de un sistema de seis partículas en seis sitios al que se le sometió a un *quench* y que evoluciona por un tiempo controlado.

En el experimento se realizaron mediciones de la pureza cuántica mediante la estadística de número de átomos de un sitio (Figura 2.1 C). Para las mediciones se realiza una operación de división de haz que interfiere las dos copias idénticas a lo largo de la cadena y permite el tuneleo en un potencial de doble pozo proyectado para un tiempo establecido. En el último paso para ambas mediciones, se levanta una barrera de potencial entre las dos copias en la dirección transversal a la cadena para medir la ocupación resultante en cada sitio de cada copia.

La capacidad para medir la pureza cuántica es crucial para evaluar el rol del entrelazamiento en el sistema. La interferencia de muchos cuerpos que se describe aquí, permite extraer cantidades que son cuadráticas en la matriz de densidad, tal como la pureza. Después de realizar la operación de división de haz, se puede obtener la pureza cuántica del sistema completo y de cualquier

subsistema simplemente contando el número de átomos de cada sitio de alguna de las cadenas (Figura 2.1 C).

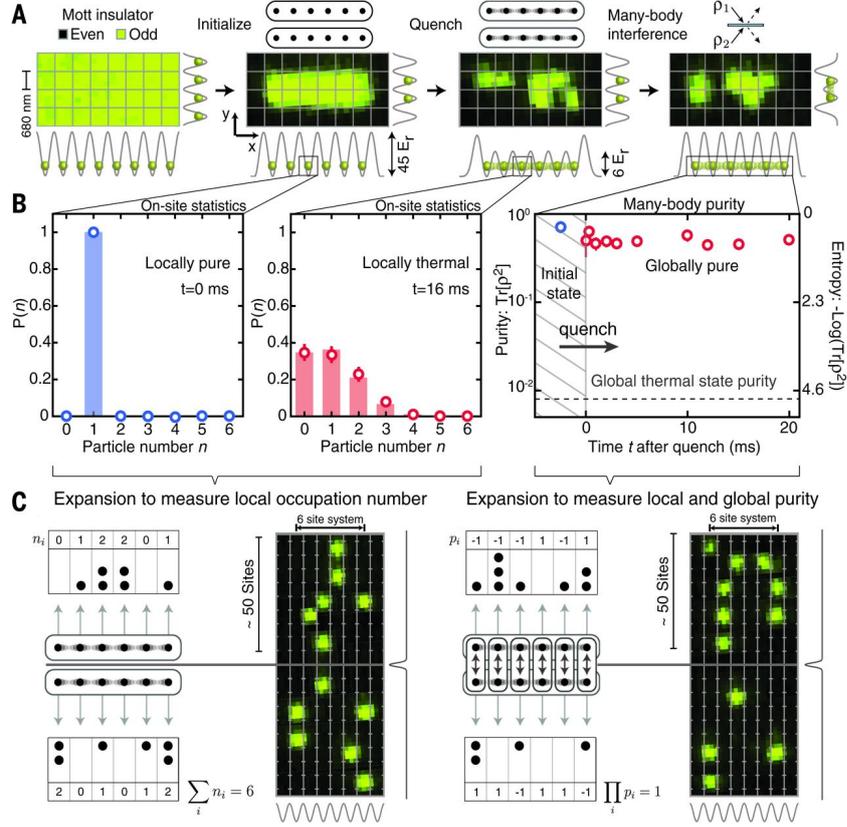


Figura 2.1: **Secuencia experimental (A)** Usando potenciales ópticos superpuestos sobre una red óptica, se prepararon copias de un sistema de Bose-Hubbard de seis sitios donde cada sitio tiene un solo átomo como condición inicial. Permitiendo un tunelaje en la dirección x se deja evolucionar el sistema, después de un tiempo determinado se detiene y se caracteriza el estado final ya sea obteniendo la estadística de número o la pureza local y global. **(B)** Se muestra la estadística de número de un sitio de la distribución inicial (en el primer gráfico, se observa el pico pronunciado sobre un átomo con fluctuaciones despreciables para los demás átomos), para un tiempo posterior se compara la predicción de un ensemble canónico (en el segundo gráfico) con la misma energía promedio que tiene el sistema cuántico después del *quench* ($J/(2\pi) = 66\text{Hz}$, $U/(2\pi) = 103\text{Hz}$). De forma alternativa, se puede medir la pureza global del sistema completo de la cual se observa una pureza alta y estática, lo cual contrasta con la pureza menor a uno del ensemble canónico, aún cuando este mismo ensemble describe exactamente la distribución de número local que se observa. **(C)** Para medir el número de átomos localmente, se permite que los átomos se expandan en tubos a lo largo de la dirección y mientras se mantienen fijos en la dirección x . En experimentos separados, se aplicó un divisor de haz permitiendo que los átomos en cada columna tunelaran en un potencial de doble pozo. La paridad de número de átomos resultante, par o impar, en cada sitio codifica la pureza global y local (tomada de [5]).

Cada corrida del experimento arroja la paridad $P^{(k)} = \prod_i p_i^{(k)}$, donde i varía en un conjunto de sitios de interés en la copia k . El operador de paridad de un sitio $p_i^{(k)}$ es $1(-1)$ cuando el número de átomos en el sitio i es par(impar). Se ha mostrado que la operación de división de haz produce $\langle P^{(1)} \rangle = \langle P^{(2)} \rangle = \text{Tr}(\rho_1 \rho_2)$, donde ρ_i es la matriz de densidad del conjunto de sitios considerados para cada copia [2, 14].

Ya que la preparación y la dinámica del *quench* para cada copia es idéntica, resulta que $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ y la paridad promedio se reduce a la pureza: $\langle P^{(k)} \rangle = \text{Tr}(\rho^2)$. Cuando el conjunto de sitios considerado comprende la cadena completa, el valor esperado de esta cantidad corresponde a la pureza del sistema completo, mientras que para conjuntos más pequeños proporciona la pureza local del respectivo subsistema.

Los datos ilustran inmediatamente el contraste entre el comportamiento global y el local y cómo se manifiesta la termalización (Figura 2.1 B). Se observa que el estado global mantiene su pureza cuántica con el tiempo, afirmando la unitariedad de su evolución después del *quench*. Esta medición global distingue claramente el estado cuántico de un conjunto térmico canónico con pureza en varios órdenes de magnitud menor. A pesar de todo se observa que localmente la estadística de número de átomos converge a una distribución de carácter térmico que puede ser modelada por el mismo ensemble térmico.

El crecimiento del entrelazamiento después de un *quench* es clave para entender cómo la entropía se forma dentro de los subsistemas de un estado cuántico puro, facilitando así la termalización. Cuando dos partes de un sistema están entrelazadas, el estado cuántico completo ρ no puede ser escrito de una forma separada con respecto a los espacios de Hilbert de los subsistemas.

Como se ha mostrado teóricamente [14, 25] y recientemente se ha observado experimentalmente [26], esto hace que los subsistemas ρ_A y ρ_B estén en una mezcla estadística de estados aunque el estado cuántico completo de muchos cuerpos sea puro [27].

El entrelazamiento del subsistema puede ser cuantificado por la entropía de segundo orden de Rényi, que es el logaritmo de la pureza de la matriz de densidad del subsistema. Mientras que la entropía de Von Neumann es usada típicamente en el contexto de la mecánica estadística, ambas cantidades crecen a medida que la matriz de densidad del subsistema se mezcla más y la entropía crece. En el caso de la entropía de Rényi, la pureza en el logaritmo cuantifica el número de estados que contribuyen a la mezcla estadística descrita por la matriz de densidad.

2.1 Dinámica de la entropía

Se estudia la dinámica de la entropía de entrelazamiento inmediatamente después del *quench* variando el tamaño del subsistema (Figura 2.2). Inicialmente, se observa un incremento aproximadamente lineal en la entropía, con pendiente similar entre los sistemas considerados (Figura 2.2 recuadro) [12]. Después de una cantidad de tiempo que depende del tamaño del subsistema, la entropía de entrelazamiento se satura y llega a un valor constante, sobre el cual hay pequeñas fluctuaciones temporales. La presencia de las fluctuaciones residuales es atribuida, en parte, al tamaño finito del sistema.

Crucialmente, los datos muestran que mientras los subsistemas adquieren entropía conforme pasa el tiempo (Figura 2.2 A-C) la entropía del sistema completo es constante y permanece así durante toda la evolución (Figura 2.2 D). La alta pureza del sistema completo permite concluir que el aumento dinámico de la entropía en los subsistemas se origina en la propagación del entrelazamiento entre los constituyentes del sistema.

Además, en analogía al crecimiento de la entropía termodinámica en un sistema térmico de la mecánica clásica, tal como un gas en un contenedor cerrado, se observa el crecimiento de la entropía local en un sistema mecánico cuántico cerrado. Sin embargo, en el caso del sistema cuántico, el mecanismo responsable de la entropía es el entrelazamiento, el cual está ausente en un sistema modelado por la mecánica clásica.

Cuando un sistema termaliza, se espera que los valores esperados de los observables locales correspondan a las predicciones del ensemble estadístico. Por analogía, si la entropía de entrelazamiento juega el rol de la entropía térmica, entonces en un estado termalizado puro esperamos un crecimiento en la entropía de entrelazamiento con el volumen del subsistema. Cuando la entropía de entrelazamiento en un estado cuántico crece linealmente con el tamaño del subsistema considerado se dice que el sistema cumple con una ley de volumen.

Las mediciones realizadas en este trabajo indican, con un alto grado de aproximación, una ley de volumen en la entropía de entrelazamiento del sistema (Figura 2.3 A). Un crecimiento lineal del entrelazamiento con el volumen ocurre cuando cada subsistema puebla incoherentemente un número de estados que escala con el tamaño del espacio de Hilbert del subsistema. Esto es porque, para el modelo de Bose-Hubbard, el espacio de Hilbert es aproximadamente exponencial en el tamaño de la red, lo cual resulta en un crecimiento lineal en $S_A = -\text{Log}(\text{Tr}[\rho_A^2])$ [5].

La flexión posterior de la entropía de entrelazamiento como función del tamaño del subsistema indica que el estado es globalmente puro. En el estado después del *quench*, la elevada pureza global es sorprendente en un estado que

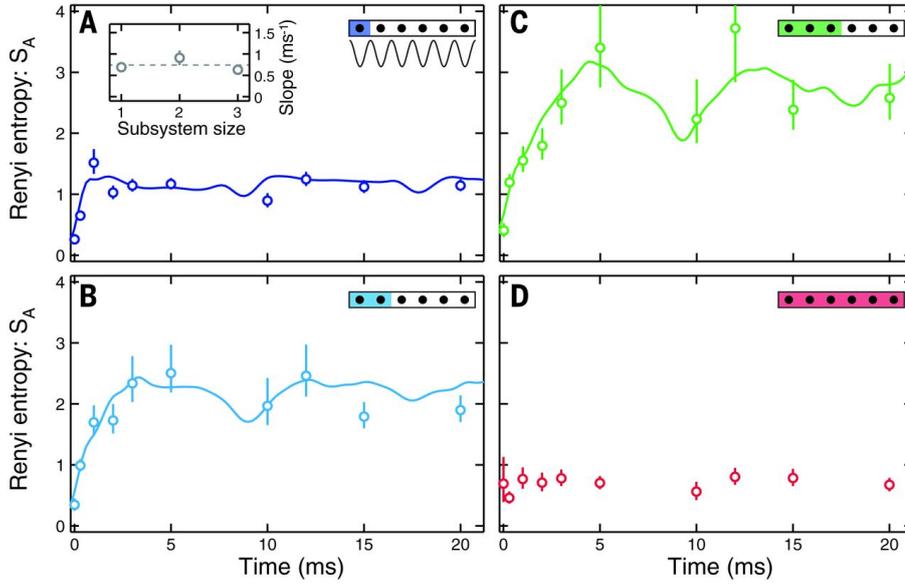


Figura 2.2: **Dinámica de la entropía de entrelazamiento.** Comenzando de un estado base con bajo entrelazamiento, el *quench* conduce al desarrollo de un entrelazamiento a gran escala entre todos los subsistemas. El sistema de seis sitios se encuentra en un estado producto con ($J/U \ll 1$) con un átomo por sitio en el régimen de interacción débil $J/U = 0,64(J/(2\pi = 66\text{Hz}))$ y en él se mide la dinámica de la entropía de entrelazamiento. A medida que se equilibra, el sistema adquiere entropía local mientras la entropía del sistema global permanece constante y a un valor dado por las imperfecciones de las mediciones. (Figura tomada de [5]).

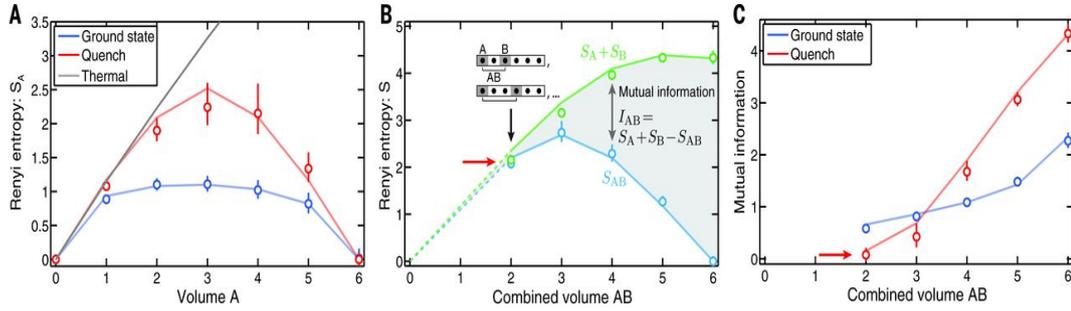


Figura 2.3: **Sistema de muchos cuerpos termalizado.** Después del *quench*, el estado del sistema alcanza un régimen termalizado con entropía de entrelazamiento saturada. **(A)** En contraste con el estado base, para el cual la entropía de Rényi solo depende ligeramente del tamaño del subsistema, la entropía de entrelazamiento crece casi lineal con el tamaño. A medida que el tamaño del subsistema se vuelve comparable al tamaño del sistema completo la entropía del subsistema se curva a cero, reflejando el estado de entropía global igual a cero. Para subsistemas pequeños, la entropía de Rényi es aproximadamente igual a la entropía térmica correspondiente a la matriz de densidad del ensemble canónico. **(B)** La información mutua $I_{AB} = S_A + S_B - S_{AB}$ cuantifica la cantidad de correlación cuántica y clásica (estadística) entre los subsistemas A y B . Para subsistemas pequeños, el estado cuántico termalizado tiene $S_A + S_B \approx S_{AB}$ debido a la ley de volumen (flecha roja), lo cual ocasiona que la información mutua sea nula. Cuando el volumen de AB se aproxima al tamaño del sistema, la información mutua crecerá debido a que $S_A + S_B$ excede a S_{AB} . **(C)** Se analiza I_{AB} como función del volumen AB para el estado base y para el estado termalizado. (Figura tomada de [5])

localmente parece estar completamente desfasado, que es el comportamiento a menudo asociado con la decoherencia inducida por el medio ambiente u otras fuentes de ruido.

Se observa que la entropía de entrelazamiento depende del volumen del subsistema y que concuerda casi cuantitativamente con la predicción hecha por un ensemble térmico. Se realizó esta comparación con un ensemble térmico canónico ρ^T con energía promedio igual a la que tiene el estado producido experimentalmente [28]. La línea gris en la Figura 2.3A es la entropía de Rényi como una función del tamaño del subsistema para este estado térmico. Aún cuando el tamaño del sistema limita la comparación sobre un gran rango de tamaños del subsistema, la pendiente inicial de la entropía de entrelazamiento con respecto al volumen del subsistema imita a la entropía térmica.

A pesar de la similitud, vale la pena enfatizar en el carácter diferente de la entropía de entrelazamiento y la térmica. La entropía de entrelazamiento (ya sea la de Rényi o la de von Neumann) está presente en el estado cuántico puro instantáneamente después de la evolución unitaria, surgiendo de la no separabilidad del estado cuántico entre el subsistema y los grados de libertad trazados.

Por otro lado, la entropía térmica de von Neumann dentro de un subsistema de un estado térmico mezclado es la entropía termodinámica de la mecánica estadística, que podría ser extraída de experimentos de flujo de calor irreversible sobre el subsistema [6]. Por lo tanto, la similitud entre las entropías de Rényi que se observan apunta a una equivalencia experimental entre la entropía térmica y la de entrelazamiento [28, 29].

2.2 Redes ópticas

Como se mencionó en la sección anterior, los átomos ultra fríos atrapados en redes ópticas son el medio mediante el cual se estudió el sistema de interés. En esta parte del trabajo se hace un breve resumen de la forma en que se crean estas redes ópticas.

Una forma de crear cristales artificiales es por medio de micro trampas ópticas creadas a partir de rayos láser contrapropagantes. Las así llamadas redes ópticas se forman por la interferencia de láseres contrapropagantes, creando un patrón de polarización espacialmente periódico en donde se pueden observar correlaciones cuánticas, transiciones de fase, superficies de Fermi etc.(ver Figura 2.4). Las trampas ópticas representan un campo moderno e interdisciplinario de investigación acelerado [23].

La interferencia entre los haces de luz forma una onda estacionaria de periodo $\lambda_L/2$ en la cual se pueden atrapar átomos. Haciendo interferir más láseres, uno puede crear redes de una, dos o tres dimensiones con potenciales periódicos. Una ventaja importante de crear trampas mediante la interferencia de láseres es que la profundidad y la geometría de la trampa está bajo control total por el experimentador. Por ejemplo, la geometría de la trampa puede ser controlada cambiando el ángulo entre los láseres incidentes formando redes ópticas muy complejas. La profundidad de la trampa puede ser modulada simplemente cambiando la intensidad del haz.

Cada potencial periódico formado por una onda estacionaria tiene la forma

$$V(x) = V_0 \sin^2(k_L x), \quad (2.4)$$

donde $k_L = 2\pi/\lambda_L$ es el vector de onda del láser usado y V_0 la profundidad del potencial usualmente dado en unidades de la energía de retroceso $E_R = \hbar^2 k_L^2 / 2m$ (con m la masa de un átomo neutro) que es una unidad natural en átomos neutros atrapados en redes ópticas.

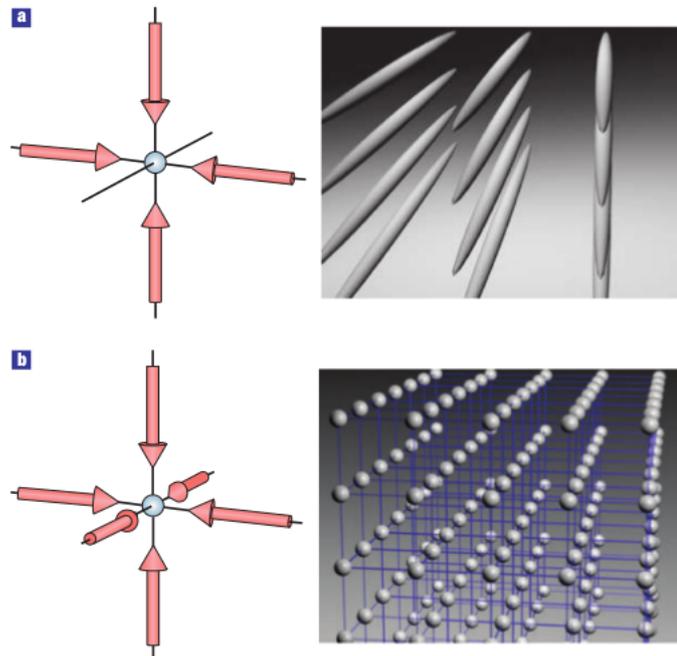


Figura 2.4: **Redes ópticas.** Los potenciales de redes ópticas están formados por la superposición de dos o más ondas estacionarias ortogonales. a) Para una red óptica dos dimensional, los átomos están confinados en una serie de tubos de potencial unidimensionales confinantes. En el caso 3D, la red óptica puede ser aproximada por un conjunto cúbico simple 3D de potenciales de oscilador armónico confinantes en cada sitio de la red (tomada de [23]).

2.3 Sistema de imagen de alta resolución

En esta sección se describe a groso modo el arreglo experimental utilizado en [5]. El microscopio de gas cuántico se basa en un sistema óptico de alta apertura, que sirve para crear potenciales de red y detectar átomos simultáneamente. Colocando un gas cuántico bidimensional a unos cuantos micrómetros de la superficie frontal del micrómetro se puede lograr una apertura numérica alta, de alrededor de 0.8 (ver Figura 2.5). Como resultado, se mide una resolución óptica $\sim 600nm$.

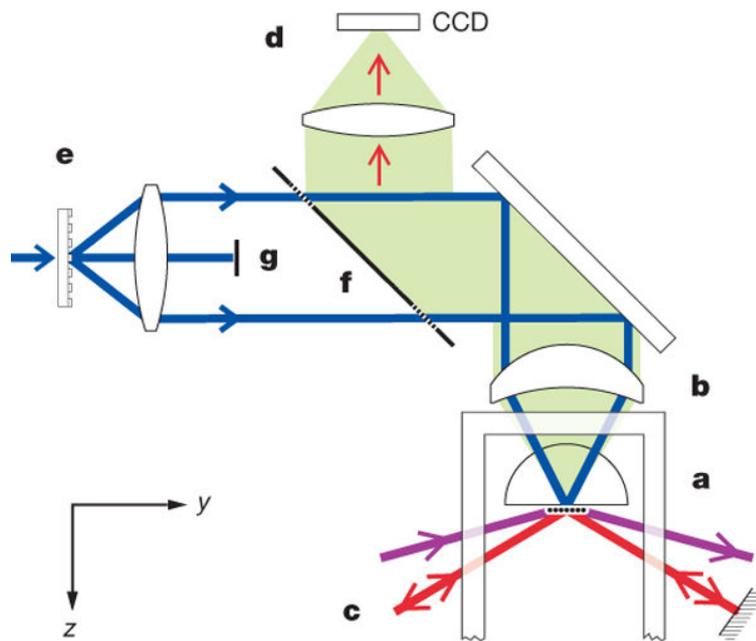


Figura 2.5: **Diagrama del microscopio de gas cuántico.** La muestra de átomos bidimensional **a** se coloca a unos pocos micrómetros por debajo de la superficie de una lente hemisférica dentro de la cámara de vacío. Esta lente sirve para aumentar la apertura numérica (NA) de la lente objetivo que se encuentra fuera de la cámara de vacío **b** mediante el índice de refracción, de $NA = 0,55$ a $NA = 0,8$. Los átomos se iluminan lateralmente por los haces **c** y la luz fluorescente dispersada es recogida por la lente objetivo y proyectada sobre una cámara CCD (dispositivo de carga acoplada) **d**. Una red óptica bidimensional es generada proyectando una máscara periódica **e** sobre los átomos a través de la misma lente objetivo usando un divisor de haz **f** (Figura tomada de [1]).

A diferencia de las configuraciones típicas de una red óptica, en este caso se crea el potencial de la red proyectando directamente un patrón de luz espacial en el plano de los átomos. Después de cargar la red, se puede leer individualmente todos los sitios (hasta decenas de miles) mediante la proyección de imagen de luz dispersada por los átomos. La geometría 2D del sistema permite

la detección directa y libre de densidades en el sistema.

La parte central del arreglo es el sistema de imagen óptica de alta resolución integrado con una trampa atómica dos dimensional(Figura 2.5). El sistema de imagen consiste en un microscopio objetivo de largas distancias de trabajo localizado fuera de una cámara de vacío que cubre una apertura numérica de 0.55. Como un lente frontal adicional de este sistema de imagen, se colocó un lente hemisférico dentro de la cámara. El gas cuántico de ^{87}Rb se crea en una trampa de superficie híbrida basada en campos de luz evanescente y de ondas estacionarias. Posicionado entre 1,5 y 3 mm de la superficie, el gas cuántico es profundo en el régimen 2D, con frecuencias de trampa de 6 kHz en la dirección vertical y 20 Hz en el plano horizontal.

Capítulo 3

Metodología y Resultados

3.1 Planteamiento del problema

El sistema que se estudia está constituido por 6 átomos bosónicos colocados en una red óptica de seis sitios lineales, los sitios están conectados por una tasa de tuneo coherente entre sitios vecinos J_x y los átomos tienen una energía de interacción proporcional a U entre átomos que se encuentren en el mismo sitio de la red (ver Figura 3.1). Así el sistema está descrito por el Hamiltoniano de Bose-Hubbard

$$H = - \left(J_x \sum_{i=1}^5 b_i^\dagger b_{i+1} + J_x \sum_{i=1}^5 b_{i+1}^\dagger b_i \right) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^6 n_i(n_i - 1). \quad (3.1)$$

En donde b_i^\dagger (b_i) es el operador de creación (aniquilación) de un átomo en el sitio i y $n_i = b_i^\dagger b_i$ es el operador de número del sitio i .

La dimensión del espacio de Hilbert de este sistema se puede calcular usando la ecuación

$$D_b = \frac{(N_b + L - 1)!}{N_b!(L - 1)!}, \quad (3.2)$$

en la cual N_b es el número de átomos bosónicos y L el número de sitios en la red. Así, para nuestro caso en el que $L = N_b = 6$ resulta que el espacio de Hilbert tiene dimensión 462.

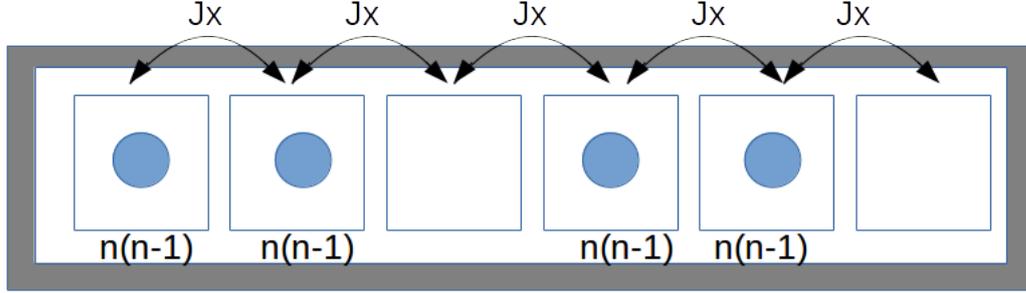


Figura 3.1: **Esquema del sistema.** El sistema está constituido por un arreglo lineal de 6 sitios creados por una red óptica en donde los sitios tienen un acoplamiento túnel coherente J_x y los seis átomos que se encuentran en la red pueden tunelear entre sitios vecinos. La interacción entre átomos U se da cuando dos o más átomos se encuentran en el mismo sitio.

3.1.1 La base del espacio de Hilbert

La base del espacio que se construirá estará constituida por el producto tensorial entre las bases de ocupación de cada uno de los sitios

$$\{|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle \otimes |n_4\rangle \otimes |n_5\rangle \otimes |n_6\rangle\} = \{|n_1 n_2 n_3 n_4 n_5 n_6\rangle\}. \quad (3.3)$$

En donde n_i es el valor esperado del operador de número en el sitio i , por conservación de partículas se cumple que $\sum_i n_i = 6$. Para construir los elementos de matriz de cualquier operador \mathcal{O}_{ij} en la base de Fock, es necesario ordenar la base. Para esto a cada uno de los elementos de la base se le etiqueta con un número del 1 al 462, esta elección del orden de los elementos es arbitraria pero una vez elegida se usan los mismos índices para todos los cálculos. Para construir esta relación, se crearon dos diccionarios (*Dic1* y *Dic 2*) que relacionan uno a uno a cada elemento de la base con su respectiva etiqueta y viceversa. Por ejemplo, el elemento de la base $|600000\rangle$ tiene la etiqueta 1, el elemento $|000600\rangle$ la etiqueta 4 y el elemento $|111111\rangle$ la 462.

Un aspecto fundamental a tomar en cuenta en la construcción de la base, es que las partículas son indistinguibles. Mientras que en física clásica las partículas pueden ser etiquetadas y seguir su trayectoria, en mecánica cuántica no se puede seguir la trayectoria de cada una de ellas ya que su posición y momento no están determinados con exactitud en cada instante de tiempo [9].

Por tal motivo el estado del sistema tiene que cumplir la simetría de intercambio, es decir, si se tiene dos estados $|1_1\rangle$ (una partícula en el sitio 1) y $|1_2\rangle$ (una partícula en el sitio 2) el estado del sistema se puede escribir como $|1_1 1_2\rangle$. Si ahora se pensara que estas partículas se pueden intercambiar, es decir, que la partícula que se encontraba en el sitio 2 pasa al 1 y viceversa el estado que se

obtendría es físicamente el mismo que el primero $|1_1 1_2\rangle$ esto se debe a que no se pueden distinguir si alguna de las partículas efectivamente cambio de sitio o no.

En el caso general, si se tienen dos partículas bosónicas e idénticas en los estado $|\psi\rangle$ y $|\psi'\rangle$ entonces se debe cumplir que

$$|\psi\psi'\rangle = |\psi'\psi\rangle. \quad (3.4)$$

Mientras que en el caso de partículas fermiónicas indistinguibles se cumpliría que

$$|\psi\psi'\rangle = -|\psi'\psi\rangle. \quad (3.5)$$

Este es un aspecto fundamental en la mecánica cuántica y se tiene que tomar en cuenta cuando se trabaja con estos sistemas. En el [Apéndice B](#) se encuentra el código utilizado para la construcción de todos los elementos de la base y el orden de los elementos.

3.1.2 Construcción y diagonalización del Hamiltoniano

Teniendo la base del sistema se procede a construir los operadores de creación y aniquilación. Sea $|n_1 n_2 n_3 n_4 n_5 n_6\rangle$ el estado del sistema con $\sum_{i=1}^6 n_i = 6$, entonces se definen los operadores de creación y aniquilación b_i^\dagger y b_i del sitio i como

$$\begin{aligned} b_i^\dagger |n_1 \dots n_i \dots n_6\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1 \dots n_i + 1 \dots n_6\rangle \\ b_i |n_1 \dots n_i \dots n_6\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1 \dots n_i - 1 \dots n_6\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

Como se muestra enseguida, en esta base, los operadores de número $n_i = b_i^\dagger b_i$ con $i \in [1, 6]$ son diagonales. Sea $|n_1 \dots n_i \dots n_6\rangle$ el k -ésimo elemento de la base y $|n'_1 \dots n'_i \dots n'_6\rangle$ el j -ésimo elemento, entonces n_{kj} es

$$\begin{aligned} n_{kj} &= \langle n_1 \dots n_i \dots n_6 | b_i^\dagger b_i | n'_1 \dots n'_i \dots n'_6 \rangle \\ &= \sqrt{n_i} \langle n_1 \dots n_i \dots n_6 | b_i^\dagger | n'_1 \dots n'_i - 1 \dots n'_6 \rangle \\ &= \sqrt{n_i} \sqrt{n'_i} \langle n_1 \dots n_i \dots n_6 | n'_1 \dots n'_i \dots n'_6 \rangle \\ &= \sqrt{n_i} \sqrt{n'_i} \delta_{kj}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

En la última igualdad se usó la ortonormalidad de la base.

Para los operadores en el primer término del Hamiltoniano (3.1) se tiene que

$$\begin{aligned}
(b_i^\dagger b_{i+1})_{kj} &= \langle n_1 \dots n_i \dots n_6 | b_i^\dagger b_{i+1} | n'_1 \dots n'_i n'_{i+1} \dots n'_6 \rangle \\
&= \sqrt{n'_{i+1}} \langle n_1 \dots n_i \dots n_6 | b_i^\dagger | n'_1 \dots n'_i (n'_{i+1} - 1) \dots n'_6 \rangle \\
&= \sqrt{n'_{i+1}} \sqrt{n'_i + 1} \langle n_1 \dots n_i \dots n_6 | n'_1 \dots (n'_i + 1) (n'_{i+1} - 1) \dots n'_6 \rangle \\
&=^* \sqrt{n'_{i+1}} \sqrt{n'_i + 1}
\end{aligned} \tag{3.8}$$

La última igualdad se cumple en el caso en el que $n_i = n'_i + 1$, $n_{i+1} = n'_{i+1} - 1$ y $n_j = n'_j$ para $j \neq i, i + 1$. Esto muestra que estos operadores no tienen elementos en la diagonal y que los elementos no nulos dependen del orden de la base.

De forma análoga se obtienen los elementos para el operador $b_i^\dagger b_{i+1}$. En las secciones B.2 y B.3 del Apéndice B se muestra el código con el que se definieron los operadores de creación y aniquilación y la construcción de los elementos de matriz antes mencionados.

Teniendo los elementos de matriz del Hamiltoniano se toman los valores para el acoplamiento túnel entre sitios J_x y para la energía de interacción U . Como un primer paso se reproducen los resultados de [5], por lo que se toma $J_x/(2\pi) = 66Hz$ y $U/(2\pi) = 103Hz$ es decir, estamos en el caso $U/J > 1$ que corresponde a interacciones fuertes con respecto a la energía cinética de los átomos.

Para diagonalizar el Hamiltoniano es necesario resolver la ecuación de valores propios

$$H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \tag{3.9}$$

en donde E_n es la energía propia del vector propio $|E_n\rangle$. Una condición necesaria y suficiente para que la ecuación anterior tenga solución es que se cumpla

$$Det(H |E_n\rangle - E_n \mathbb{I}) = 0. \tag{3.10}$$

Lo cual es un sistema de 462 ecuaciones lineales. Este sistema de ecuaciones se resolvió usando el paquete [LAPACK](http://www.netlib.org/lapack)¹ (Linear Algebra PACKage) del

¹<http://www.netlib.org/lapack> , <https://docs.julialang.org/en/release-0.4/stdlib/linalg/>

lenguaje Julia. LAPACK proporciona rutinas para resolver sistemas de ecuaciones lineales simultáneas, soluciones de mínimos cuadrados de sistemas de ecuaciones lineales, problemas de valores propios y problemas de valores singulares.

La solución a la ecuación anterior es un conjunto de valores y vectores propios de H en donde si P es una matriz con los vectores propios en sus columnas, entonces

$$H = PH_E P^{-1}, \quad (3.11)$$

donde H_E es la representación del Hamiltoniano en la base de sus vectores propios, es decir, H_E es diagonal con los valores propios en su diagonal.

3.2 Evolución y propiedades globales

La ecuación de Schrödinger tiene una solución sencilla cuando el Hamiltoniano es independiente del tiempo y se representa en su propia base. El estado del sistema al tiempo t expresado como combinación lineal de los autovectores de H es

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ &= \sum_n c_n e^{-iHt/\hbar} |E_n\rangle \\ &= \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |E_n\rangle \\ &= \sum_n \langle E_n | \psi(0) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} |E_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Cuando se usa el formalismo de la matriz de densidad, el estado del sistema al tiempo t se escribe como (ver el [Apéndice A](#))

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (3.13)$$

Una forma alternativa de obtener $\rho(t)$ es resolver su ecuación de evolución temporal, la cual se conoce como ecuación de Liouville-von Neumann

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho]. \quad (3.14)$$

Sin embargo, dado que es más sencillo resolver una ecuación para el vector de estado $|\psi(t)\rangle$ de 462 entradas que para una matriz $\rho(t)$ con 462×462 entradas, en el trabajo se encontrará el estado del sistema mediante la ecuación de Schrödinger y se encontrará el operador de densidad usando la ecuación (3.13).

La condición inicial del sistema, en la base de estados de ocupación es

$$|\psi(0)\rangle = |111111\rangle. \quad (3.15)$$

Este estado en la representación matricial corresponde a aquel vector que tiene la entrada número 462 igual a 1 y el resto cero. Para poder aplicar la ecuación (3.12) tenemos que tener $|\psi(0)\rangle$ en la base de la energía, lo cual se obtiene al hacer $P^{-1}|\psi(0)\rangle$. Dado esto, se puede calcular el estado al tiempo t y así la matriz de densidad del sistema completo (ver la Sección B.4).

Una de las cantidades más importantes es la energía del sistema al tiempo t . Dado que el sistema es cerrado esta cantidad es constante e igual al valor de la energía al tiempo cero

$$E_0 = Tr(\rho(t)H). \quad (3.16)$$

En la Figura 3.2 se muestra el valor esperado de la energía como función del tiempo, esta permanece constante y tiene un valor de $E_0 = 826,51Hz$ en unidades de \hbar o $8,7161 \times 10^{-32}J$.

Otra de las cantidades importantes que se tienen que observar es la pureza del sistema, está definida por $Tr(\rho^2)$ y como ya se mencionó en el primer capítulo es igual a uno cuando el sistema es puro y menor a uno cuando el estado es una mezcla estadística.

Dado que la entropía de Rényi de segundo orden mide la separación del estado de un sistema puro, en este caso esta cantidad tiene que ser igual a cero. En la Figura 3.3 se muestra cómo la pureza del sistema es constante e igual a uno mientras que la entropía de Rényi se mantiene en un valor constante cero.

Para la construcción del Hamiltoniano del sistema, ecuación (3.1), se definieron los operadores de número de ocupación de cada uno de los sitios como $n_i = b_i^\dagger b_i$ $i = 1..,6$. El valor esperado de estas cantidades es simplemente $\langle n_i(t) \rangle = Tr(\rho(t)n_i)$. Dado el estado inicial del sistema se espera que estas cantidades comiencen en uno y oscilen alrededor de este valor como se muestra en la Figura 3.4.

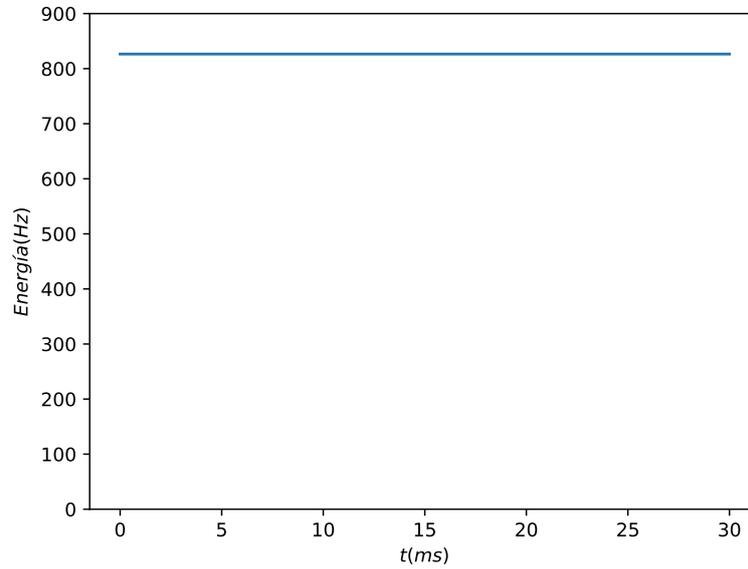


Figura 3.2: **Energía del sistema.** Dado que el sistema es cerrado la energía se conserva y tiene un valor de $8,7161 \times 10^{-32} J$ o de forma equivalente $826,51 Hz$ (en unidades de \hbar).

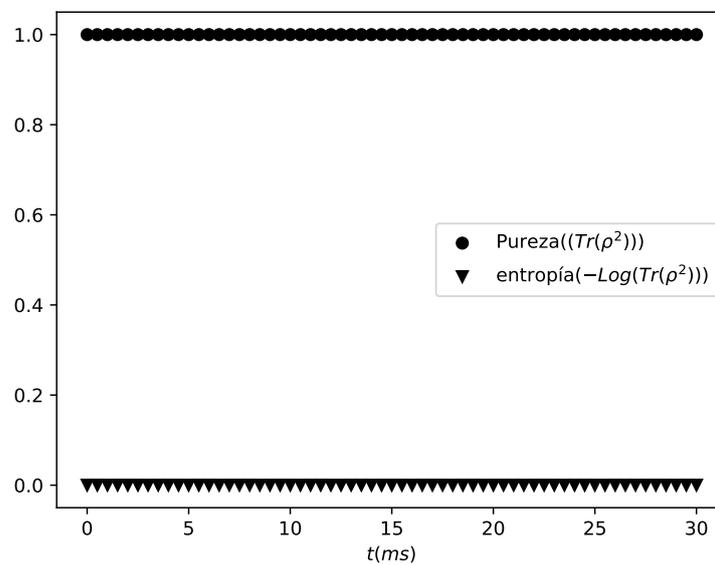


Figura 3.3: **Pureza global del sistema:** La pureza global del sistema se mantiene constante y aproximadamente igual a uno durante la evolución mientras que la entropía de entrelazamiento de Renyi es cero.

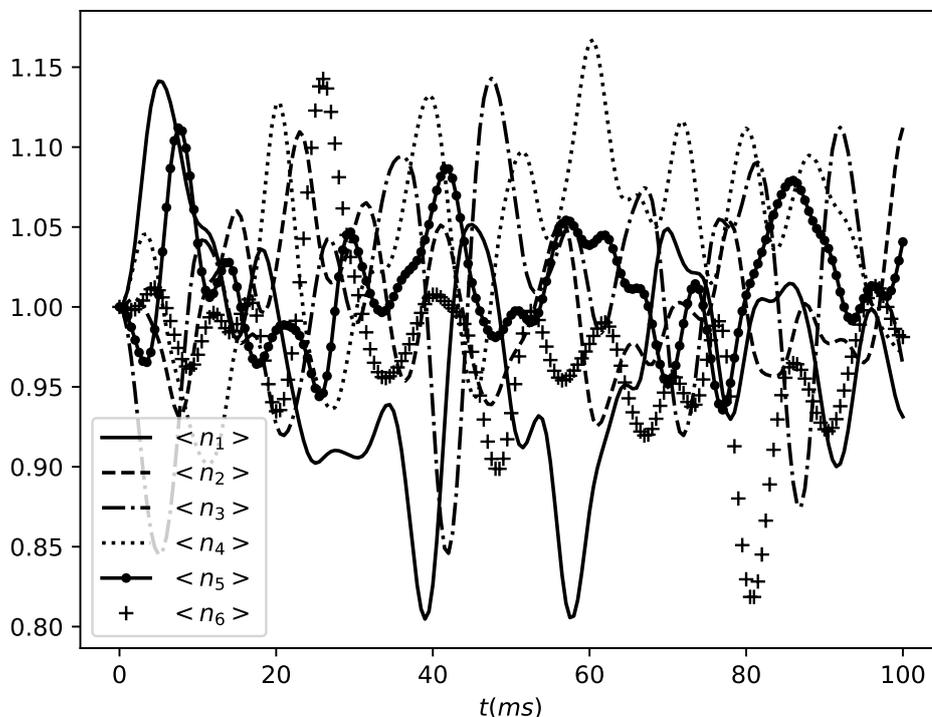


Figura 3.4: **Números de ocupación.** Para $t = 0$ el valor esperado de los números de ocupación coincide con el estado inicial, inmediatamente después estas cantidades oscilan alrededor de 1.

Pasamos ahora al estudio de los subsistemas. Es decir, estudiaremos el comportamiento de los operadores locales para los subsistemas. El subsistema puede ser un solo sitio, dos o tres. Para esto es necesario introducir el operador de densidad reducido.

En general si se tiene un sistema cuántico compuesto de varios subsistemas, el operador de densidad reducido de uno de estos subsistemas se define como la traza parcial sobre los demás subsistemas del operador de densidad del sistema completo [30]. Esta cantidad se puede usar para describir el comportamiento del subsistema que se encuentra en interacción con el resto.

Sean $\{|a\rangle\}$ y $\{|b\rangle\}$ bases completas y ortonormales del subsistema A y B respectivamente. Se define el elemento de matriz $\langle a|\rho_A|a'\rangle$ del operador de

densidad reducido del subsistema A (el cual se denotará como ρ_A) como [30]:

$$\langle a|\rho^A|a'\rangle \equiv \sum_b \langle ab|\rho|a'b\rangle. \quad (3.17)$$

A la operación definida en la ecuación anterior se le llama traza parcial, en este caso, sobre el subsistema B y es denotada por $Tr_b(\cdot)$.

3.3 Subsistema de un sitio

Para el caso en el que se toma un sitio como un subsistema del arreglo de seis sitios (por ejemplo el sitio i) la base de este subsistema consta de siete estados. En el espacio de Fock es $\{|n_i\rangle\} = \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle, |6\rangle\}$, donde, como antes, cada estado identifica al número de partículas en el sitio i que se está observando.

Para el caso en que se observa el sitio tres del sistema, se tomará la traza sobre los sitios 1,2,4,5 y 6, es decir estos sitios representan el subsistema complementario. Cada elemento de la base de este subsistema es de la forma $|n_1n_2n_4n_5n_6\rangle$. En este caso la matriz de densidad reducida ρ_3 tiene una forma sencilla pues es diagonal. Sea s y s' dos elementos de la base del subsistema que consta del sitio 3 y b un elemento de la base del subsistema complementario, entonces

$$\rho_{3_{ss'}} = \sum_b \langle sb|\rho|s'b\rangle. \quad (3.18)$$

Como s y s' son dos elementos de la base diferentes, es decir, con número de partículas diferentes en el sitio 3, no existe ningún elemento b de la base del subsistema restante con el cual se pueda construir dos estados $|sb\rangle$ y $|s'b\rangle$ válidos del sistema completo, pues si existiera uno entonces alguno de los estados $|sb\rangle$ y/o $|s'b\rangle$ no tendría 6 partículas. Es decir, esto es una consecuencia de la conservación del número de partículas.

Para calcular los elementos diagonales (las poblaciones) de la matriz de densidad reducida se realizaron 7 subconjuntos de la base del sistema completo. El primer subconjunto contiene a todos los estados en los que el número de partículas en el sitio 3 es cero, es decir todos los estados que van a contribuir al elemento $\rho_{3_{00}}$, el segundo subconjunto contiene todos los estados que van a contribuir al elemento $\rho_{3_{11}}$ etc. En el [Apéndice B](#) se muestra el código usado para hacer este cálculo.

Una de las cantidades que podemos analizar directamente de la matriz de densidad reducida son las poblaciones, es decir, la evolución temporal de los elementos diagonales. Físicamente, estos elementos denotados como $P_j(t)$ con $j = 0, 1, \dots, 7$ son la probabilidad de encontrar al tiempo t el sitio 3 con j partículas. En la Figura 3.6 se muestra la evolución temporal de las poblaciones para este sitio, como se puede observar, después de un tiempo transitorio ($\sim 10ms$) las poblaciones oscilan alrededor de su valor promedio.

Al tomar el valor promedio de las poblaciones para el tiempo de 10 ms a 100 ms se obtiene la distribución en barras azules mostrada en la Figura 3.5. Notablemente, mientras que la Figura 3.3 muestra que el sistema completo evoluciona unitariamente (permanece puro). La estadística de número de un subsistema (Figura 3.5) tiende a una distribución térmica. Entonces ¿Cómo es que a pesar de que el sistema completo se encuentra en un estado que es totalmente diferente a uno térmico, un subsistema se comporta con propiedades que asemejan un sistema térmico?

El análisis de la dinámica de entrelazamiento entre los dos subsistemas es clave para entender cómo se comporta la entropía dentro del sistema puro y de alguna forma entender por qué termaliza el subsistema. Como se ha demostrado experimentalmente [2, 5] y teóricamente [25], cuando dos partes de un sistema se encuentran entrelazadas el estado completo del sistema no puede ser escrito como el producto de dos estados, cada uno de un subsistema. Esto causa que los subsistemas estén en una mezcla estadística de estados aún cuando el estado completo permanece puro. En la Figura 3.7 se muestra la evolución de la entropía de Renyi de segundo orden para el sitio 3 ($-Log(Tr(\rho_3^2(t)))$). Como ya se mencionó en el Capítulo 1 la entropía de Renyi cuantifica los estados que aportan a la mezcla estadística en la matriz de densidad.

Sorprendentemente, mientras que la entropía del subsistema aumenta rápidamente hasta llegar a un valor aproximadamente constante y oscila alrededor de este, la entropía del sistema completo (Figura 3.3) se mantiene en un valor constante igual a cero.

Por otro lado, dada la simetría del sistema, se espera que el comportamiento del sitio 3 sea idéntico al del sitio 4 o el del 1 al 6 y tal vez el comportamiento entre el sitio 1 y 3 difiera mucho por los efectos de borde que se puedan presentar en el sitio 1. Sin embargo, como se muestra en la Figura 3.8 a simple vista las poblaciones y la entropía del sitio 1 tienen un comportamiento muy similar a las del sitio 3 (Figura 3.6 y 3.7) y de hecho, en los dos casos el tiempo de relajación de las poblaciones es muy similar.

A continuación se presenta el estudio para subsistemas que constan de dos sitios de la red.

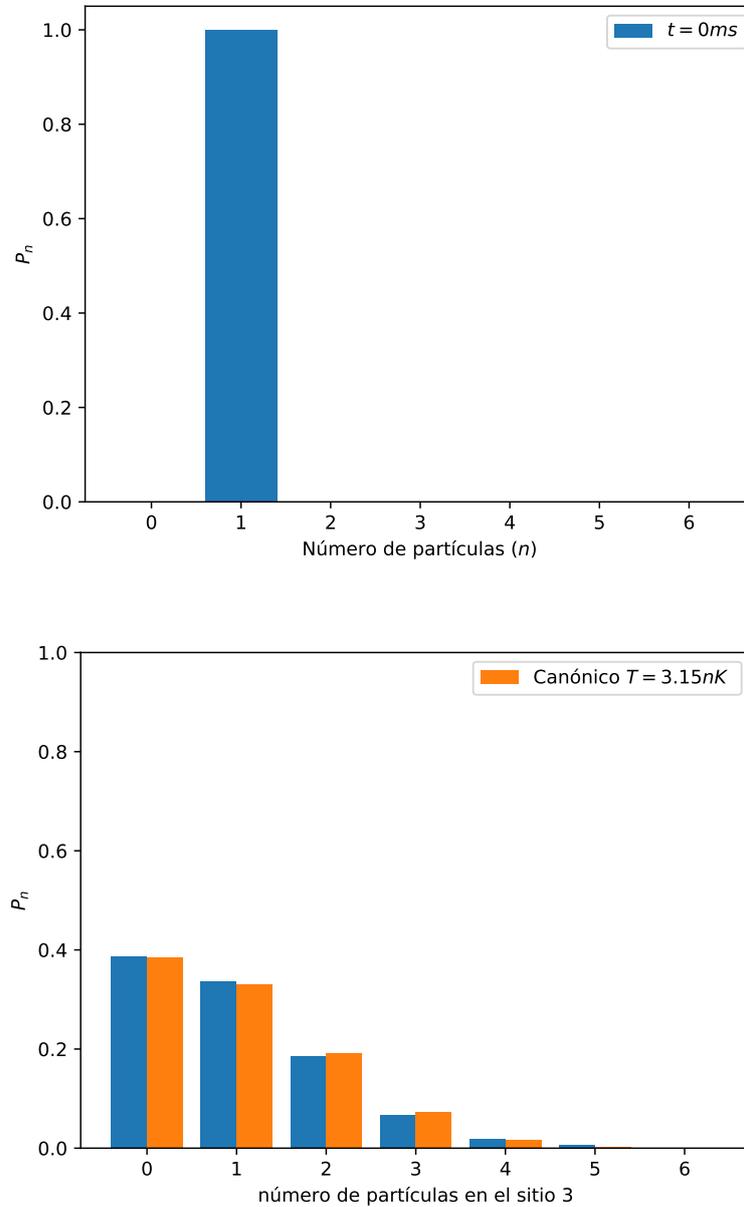


Figura 3.5: **Termalización del subsistema.** La distribución de las poblaciones al inicio se encuentra bien definida por el valor constante uno. Al evolucionar en el tiempo las poblaciones tienden a una distribución térmica. En la Figura inferior se muestra la comparación del promedio de las poblaciones en los primeros 100 ms de evolución contra la estimación de un ensemble canónico con una temperatura efectiva de 3.15 nK. (La separación promedio entre el promedio de las poblaciones y el ensemble canónico es 0.0036).

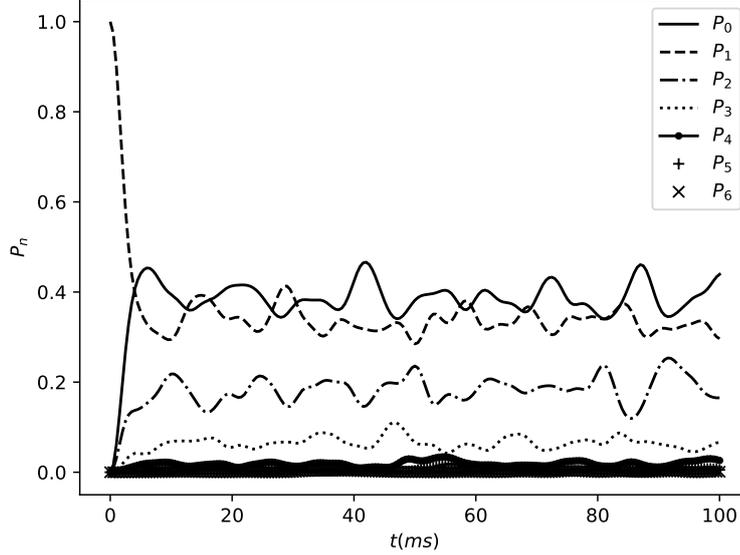


Figura 3.6: **Dinámica de poblaciones del subsistema 3.** Las poblaciones de la matriz de densidad reducida ρ_3 muestran cómo el sistema termaliza muy rápidamente. Después de un tiempo transitorio inicial la población P_1 oscila alrededor de su valor promedio $\bar{P}_1 \simeq 0,33$

3.4 Subsistema de dos sitios

Para este caso la matriz de densidad reducida de los dos sitios ya no es tan sencilla como en el caso anterior. La base del subsistema está constituida por todos los ket's $|n_i n_j\rangle$ en donde i y j indican los dos sitios que se están observando. Por ejemplo, tomemos el caso en el que $n_i = 2$ y $n_j = 1$ ($|21\rangle$) entonces los elementos no diagonales distintos de zero serán

$$\begin{aligned}
 \langle 21 | \rho_{ij} | 12 \rangle &= \sum_b \langle b | \langle 21 | \rho | 12 \rangle | b \rangle \\
 \langle 21 | \rho_{ij} | 03 \rangle &= \sum_b \langle b | \langle 21 | \rho | 03 \rangle | b \rangle \\
 \langle 21 | \rho_{ij} | 30 \rangle &= \sum_b \langle b | \langle 21 | \rho | 30 \rangle | b \rangle.
 \end{aligned}
 \tag{3.19}$$

Para saber qué elementos no diagonales de la matriz de densidad reducida serán diferentes de zero es necesario que los dos elementos de la base correspondan a estados con el mismo número de partículas, es decir, si en el elemento $\langle n_i n_j | \rho_{ij} | n'_i n'_j \rangle$ se cumple que $n_i + n_j = n'_i + n'_j$ entonces ese elemento puede

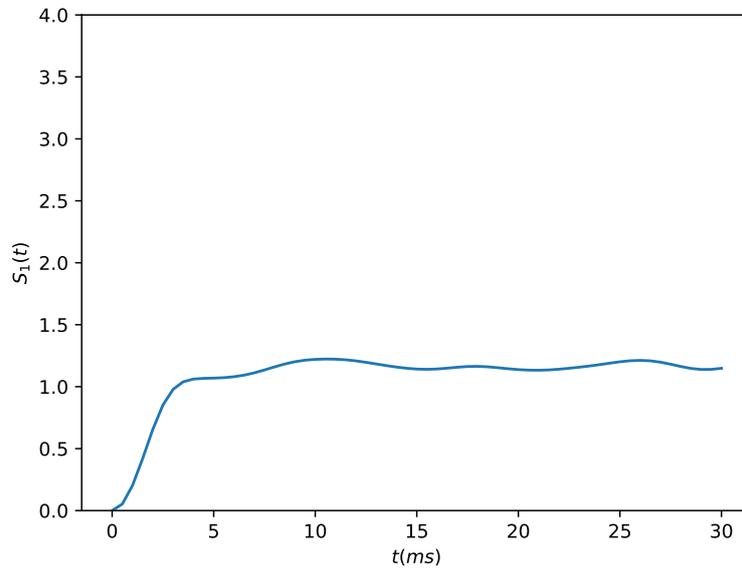


Figura 3.7: **Entropía de Renyi del sitio 3.** Mientras que la entropía del sistema completo permanece constante e igual a cero, la del subsistema crece muy rápidamente y oscila alrededor su valor promedio $\bar{S}_3 = 1,187$.

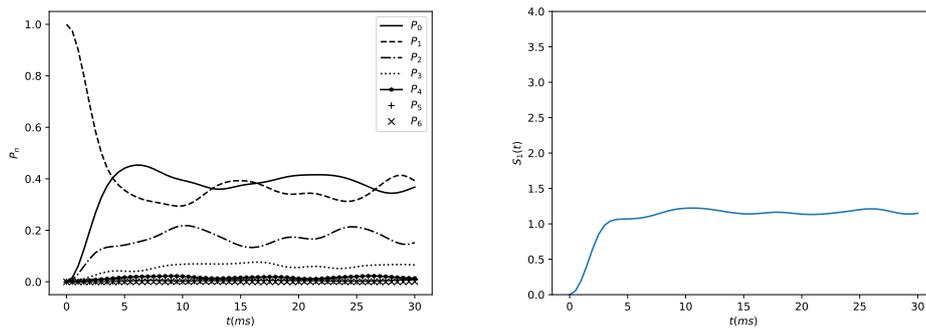


Figura 3.8: **Dinámica del sitio 1.** El comportamiento de las poblaciones y de la entropía entre el sitio 1 con respecto al sitio 3 parece ser muy similar a pesar de que la simetría del sistema sugiere que en el sitio 1 podrían presentarse efectos de borde.

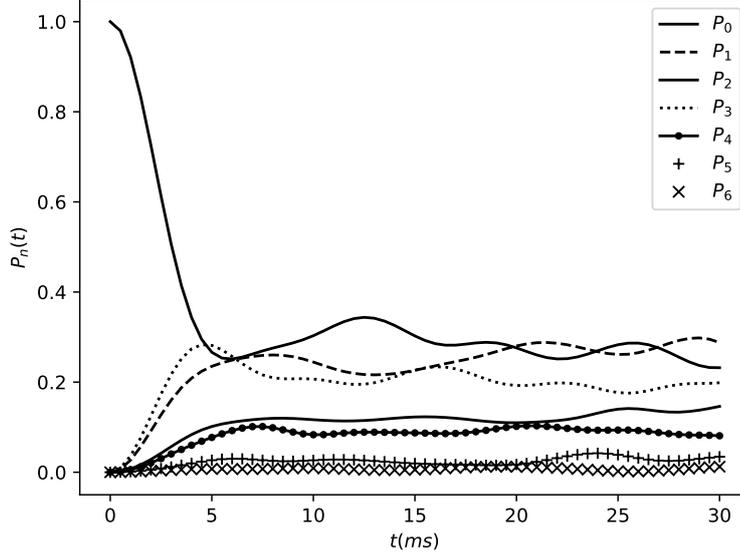


Figura 3.9: **Probabilidades de ocupación de los sitios 1 y 2.** Dado el estado inicial del sistema, la probabilidad de ocupación al tiempo cero es $P_2 = 1$ y $P_n = 0$ para $n \neq 2$. Al evolucionar en el tiempo todas las ocupaciones se estabilizan mostrando pequeñas oscilaciones alrededor de su valor medio.

ser no nulo. Esta condición es necesaria para que el elemento no sea nulo pero no es suficiente. En la sección B.5.2 del Apéndice B se muestra el código para calcular todos los elementos de matriz.

Para calcular la probabilidad de ocupación de n partículas en el subsistema, denotada por P_n , se suman las poblaciones para todos los estados $|n_i n_j\rangle$ que cumplen que $n_i + n_j = n$, es decir

$$P_n = \sum_{n_i+n_j=n} \langle n_i n_j | \rho_{ij} | n_i n_j \rangle. \quad (3.20)$$

Tomemos el caso en el que el subsistema es el primer y segundo sitio. Como se podría esperar, la probabilidad $P_2 = 1$ en $t = 0$ mientras que $P_n = 0$ si $n \neq 2$, en la Figura 3.9 se muestra la evolución temporal de los primeros 30 ms de estas probabilidades de ocupación. De la misma forma que para el caso de un sitio, las ocupaciones se estabilizan después de un tiempo de alrededor de 10 ms después del cual muestran pequeñas oscilaciones.

El promedio de las ocupaciones en los primeros 100 ms de evolución se muestra en la Figura 3.10, en donde se comparan las distribuciones del promedio

temporal de las ocupaciones con las predicciones de un ajuste con una distribución canónica de temperatura efectiva $T = 2,77 \text{ nK}$.

En analogía al caso clásico, si la entropía de entrelazamiento juega el papel de la entropía térmica, entonces en un estado termalizado se esperaría un crecimiento lineal proporcional al tamaño del subsistema. En la Figura 3.11 se muestra la evolución de la entropía para el subsistema de dos sitios, esta entropía se estabiliza en un valor de $\bar{S}_{12} = 2,228$ que es aproximadamente el doble que para el caso de un sitio.

Este crecimiento aproximadamente lineal en la entropía de entrelazamiento de Rényi se debe a la forma en la que crece el espacio de Hilbert en el modelo de Bose-Hubbard. Mientras que para un número de sitios o partículas fijo la dimensión crece polinomialmente como muestra la ecuación (1.26), cuando la densidad de partículas se mantiene constante ($N_b/L = n_b = \text{cte}$), es decir que se agregan tantos sitios como partículas al sistema, el espacio de Hilbert crece exponencialmente

$$D_b \sim ((1 + n_b)(1 - 1/n_b)^{n_b})^L, \quad (3.21)$$

provocando así que $S_A = -\text{Log}(\text{Tr}(\rho_A^2))$ crezca de forma lineal.

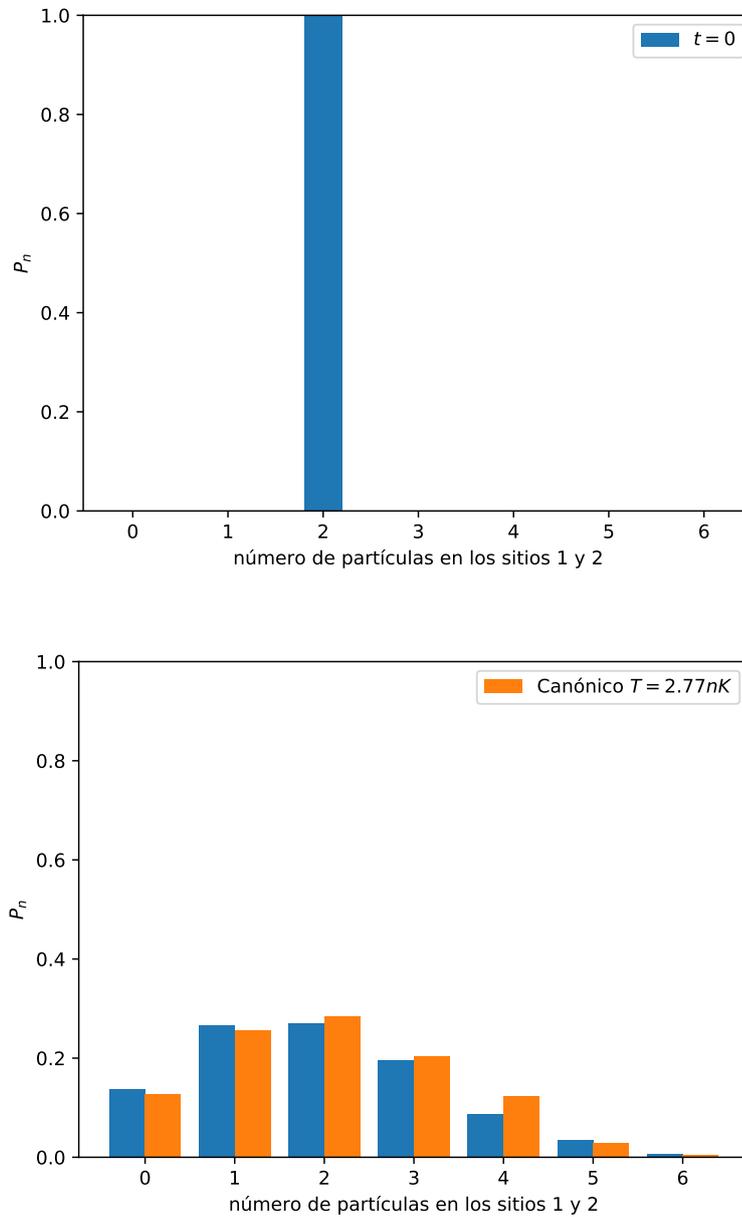


Figura 3.10: **Termalización del subsistema de dos sitios.** Al inicio las probabilidades de ocupación del subsistema están bien definidas, $P_2 = 1$ y $P_n = 0$ para $n \neq 2$. Cuando se deja evolucionar el sistema el promedio de las ocupaciones tienden a una distribución como la mostrada por las barras azules de la figura inferior (promedio sobre los primeros 100 ms de evolución). Estas ocupaciones se comportan de forma muy parecida a las predicciones hechas por un ensemble canónico con una temperatura efectiva de $T = 2,77nK$ (barras naranjas de la figura inferior).

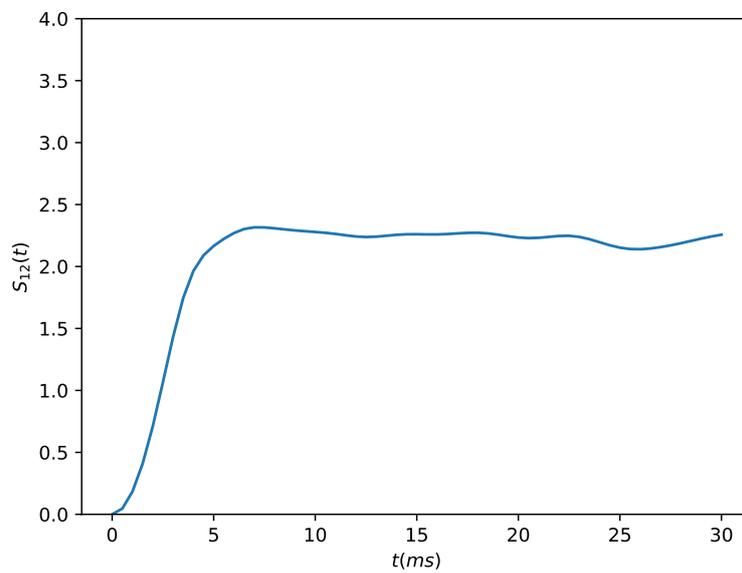


Figura 3.11: **Dinámica de la entropía.** A medida que el subsistema se equilibra, como se muestra en la Figura 3.9, la entropía de entrelazamiento local incrementa mientras la entropía global permanece en un valor constante igual a cero. A diferencia del subsistema de un sitio, el valor de la entropía en este caso es aproximadamente el doble que en caso anterior lo que podría ser una muestra del crecimiento lineal de la entropía de entrelazamiento como función del tamaño del subsistema.

3.5 Subsistema de tres sitios

De manera análoga al caso de dos sitios, cuando el subsistema en cuestión consta de tres sitios los elementos de la matriz de densidad reducida ρ_3 que son automáticamente cero por la conservación del número de partículas son aquellos elementos de la forma

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \rho_3 | n'_1 n'_2 n'_3 \rangle = \sum_b \langle b | \langle n_1 n_2 n_3 | \rho | n'_1 n'_2 n'_3 \rangle | b \rangle, \quad (3.22)$$

en los que no se cumple la siguiente igualdad

$$n_1 + n_2 + n_3 = n'_1 + n'_2 + n'_3.$$

Dada la simetría del sistema se espera un comportamiento equivalente si se toma la traza sobre los sitios 1,2 y 3 y sobre los sitios 4,5 y 6. En este caso se observarán las propiedades del subsistema de sitios 1, 2 y 3. En la sección B.5.3 se muestran los cálculos hechos para obtener la matriz de densidad de este subsistema. De la misma forma que en los casos anteriores al tomar el promedio temporal de las ocupaciones (las cuales se muestran en la Figura 3.12) se obtiene la distribución que se muestra en las barras azules de la Figura 3.13. Cuando se realiza un ajuste a una distribución térmica se obtienen las barras en naranja, que son las probabilidades de ocupación calculadas con el ensemble canónico a una temperatura efectiva de $T = 4,48 \text{ nK}$.

Como se había mencionado, la entropía de entrelazamiento crece linealmente con el tamaño del subsistema, para el caso del subsistema de tres sitios se muestra la evolución en la Figura 3.14. En este caso la entropía oscila alrededor de su valor promedio $\bar{S}_{123}(t) = 2,822$ lo cual concuerda con lo planteado anteriormente, que la entropía de entrelazamiento es aproximadamente proporcional al tamaño del subsistema. Comparando el tiempo en el que relaja este subsistema con los dos analizados anteriormente se puede concluir que el tiempo de relajación de las ocupaciones no depende en gran medida del tamaño del subsistema, pues para los tres casos la entropía y las ocupaciones se estabilizan alrededor de los primeros 10 ms de evolución.

3.6 La temperatura efectiva y la entropía de entrelazamiento

Una pregunta fundamental en el cálculo de las temperaturas de los ensembles es ¿Cómo esta depende de los parámetros del Hamiltoniano J_x y U ? Si esta se comporta de forma análoga a la temperatura en un sistema térmico uno podría esperar que crezca con J_x , pues J_x se comporta como la energía

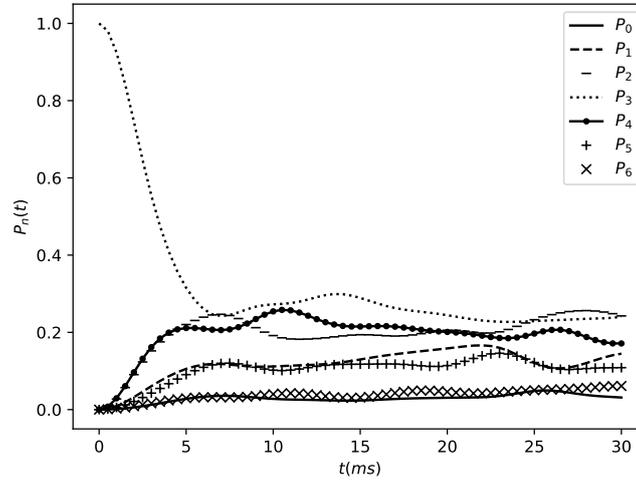


Figura 3.12: **Dinámica de ocupaciones para tres sitios.** A diferencia de los dos casos anteriores las probabilidades de ocupación tienen una distribución más dispersa que no es superior a 0.3 en ningún caso. Como se podría esperar, en este caso la distribución es aproximadamente simétrica con respecto a tres partículas.

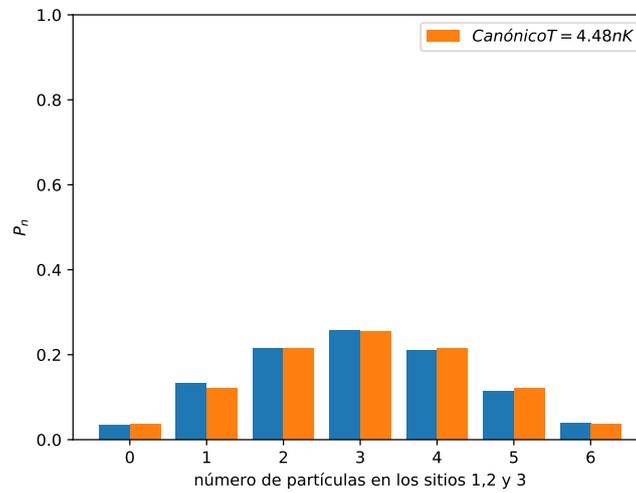


Figura 3.13: **Termalización del subsistema de 3 sitios.** Las probabilidades de ocupación tienden a una distribución térmica como en los dos casos anteriores. Al tomar el promedio temporal de cada una de las ocupaciones durante los primeros 100 ms de evolución se observa las similitudes entre una distribución canónica a una temperatura efectiva de $T = 4,48 \text{ nK}$ y la distribución del promedio de las ocupaciones.

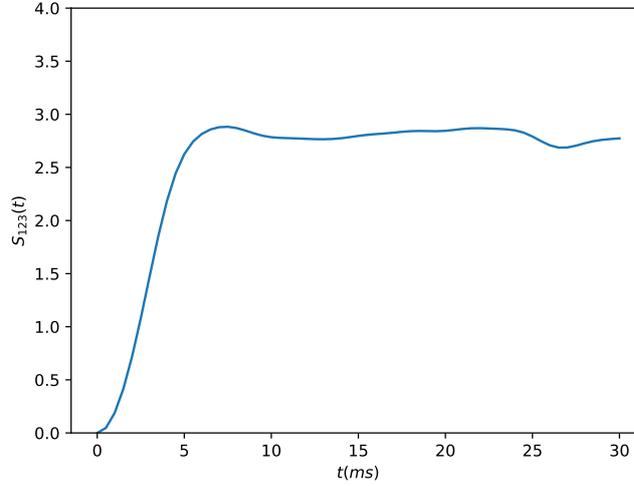


Figura 3.14: **Dinámica de la entropía de entrelazamiento.** La entropía de entrelazamiento termaliza a un valor que es aproximadamente el triple que la entropía para un sitio. Lo cual muestra el crecimiento lineal de esta cantidad como función del tamaño del subsistema.

cinética de las partículas en la red mientras que U es la energía de interacción entre átomos.

Para el caso del subsistema de 1 sitio la temperatura se comporta de forma continua en el régimen de interacciones altas $J_x/U < 1$, como es el caso analizado en el trabajo ($J_x/U = 0,64$), la temperatura incrementa continuamente como incrementa J_x/U y para el régimen de interacciones débiles con respecto a la energía cinética $J_x/U > 1$ comienza a oscilar. Esta relación se muestra en la Figura 3.15.

Por otro lado, como se había mencionado antes, dado el crecimiento exponencial en el espacio de Hilbert del sistema, la entropía de Rényi crece aproximadamente lineal como función del número de sitios como se muestra en la Figura 3.16. Sin embargo, ya que el sistema completo es puro, como se muestra en los primeros resultados de este capítulo, su entropía es constante y nula, lo que conduce a concluir que la entropía mostrada en la Figura 3.16 decrece continuamente para los subsistema de 4 y 5 sitios para llegar a un valor de cero cuando el subsistema coincide con el sistema completo.

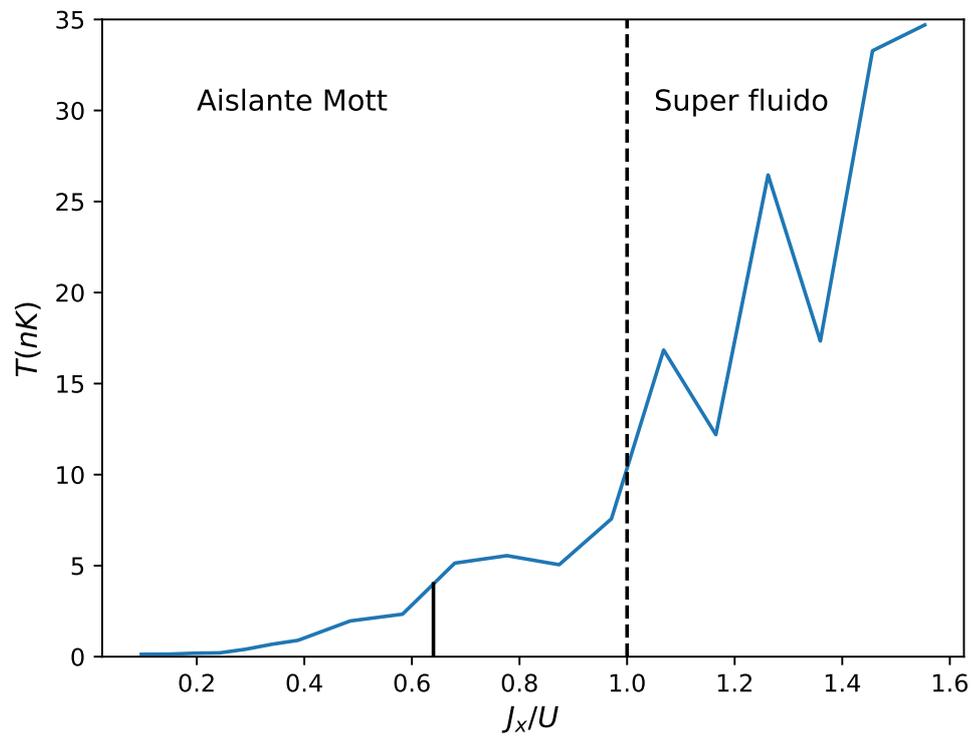


Figura 3.15: **Temperatura efectiva para un sitio.** La temperatura asociada al ensemble se comporta de forma continua para el caso de interacciones grandes con respecto a la energía cinética mientras que para el régimen de interacciones débiles con respecto a la energía cinética presenta "oscilaciones" que crecen con la energía cinética.

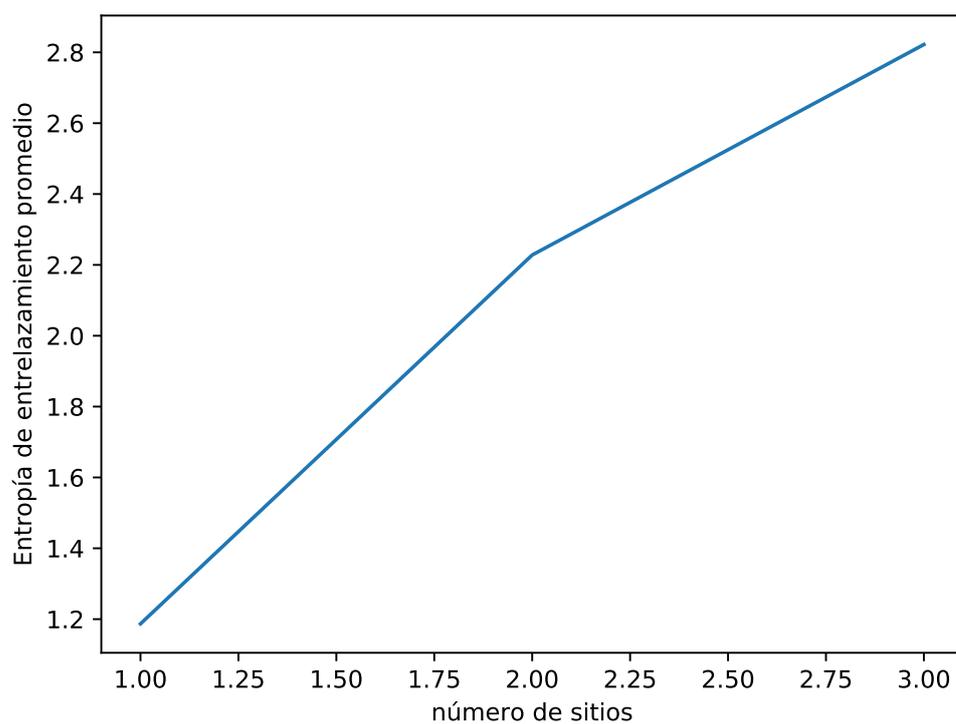


Figura 3.16: **La entropía de Renyi.** Ya que el sistema evoluciona unitariamente, la entropía del sistema completo permanece constante y en un valor igual a cero. Por esta razón la entropía de Renyi se comporta de forma lineal como función del tamaño del subsistema sólo cuando este es pequeño en comparación con el sistema completo pues cuando el tamaño del subsistema es comparable con el del sistema completo la entropía se aproxima a cero.

Capítulo 4

Conclusiones

Entender el comportamiento de los sistemas cerrados de muchos cuerpos es un problema abierto que involucra diferentes áreas de la física como la mecánica cuántica y la física estadística. Aún cuando ha habido grandes esfuerzos teóricos y muchas conjeturas se han hecho sobre el tema, como es el caso de la ETH, la termalización en sistemas cuánticos cerrados no ha podido ser explicada desde primeros principios.

En este trabajo se analizó el comportamiento de uno de estos sistemas que, sorprendentemente, con solo seis partículas interactuantes termaliza. Se analizó el comportamiento de las cantidades global y de los subsistemas. Se encontró que las matrices de densidad reducidas para diferentes subsistema se hacen indistinguibles de las de un ensemble térmico. Además, la termalización de estas cantidades está muy relacionada con la entropía de entrelazamiento que se genera entre diferentes partes del sistema.

En particular, para el caso del subsistema de un sitio se encontró cómo varía la temperatura efectiva del ensemble térmico como función del cociente entre el acoplamiento túnel y la energía de interacción J_x/U , como se mostró en el análisis, el comportamiento de esta cantidad es continuo y creciente para $J_x/U < 1$. Cuando la energía de interacción es menor que el acoplamiento túnel $J_x/U > 1$ hay un cambio drástico en el comportamiento de la temperatura.

Hay diferentes caminos que se podrían seguir en el estudio de estos sistemas y sus propiedades. Con el código desarrollado se podría indagar cuestiones sobre el comportamiento de otros sistemas cerrados más pequeños o más grandes que el que se presenta aquí. Analizar otros observables para saber si estos también termalizan. Otra pregunta interesante es la dependencia con respecto a las condiciones iniciales del sistema ¿Para cualquier condición inicial los subsistemas termalizan?

La hipótesis de termalización es una guía para entender las conexiones en-

tre los sistemas microscópicos y los fenómenos macroscópicos. Lo que permite hacer predicciones verificables en diferentes sistemas. Además, con lo grandes avances experimentales que se tienen hoy en día es posible comparar estos resultados obtenidos numéricamente con los que se obtienen en el laboratorio.

Apéndice A

La Matriz de Densidad

Considere una mezcla de estados cuánticos independientes $|\psi_n\rangle$, $n = 1, 2, 3 \dots$, con pesos estadísticos w_n . Los estados $|\psi_n\rangle$ no necesariamente son ortonormales entre sí. El operador de densidad que describe este sistema se define como [31]

$$\rho = \sum_k w_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (\text{A.1})$$

Cuando se tiene un sistema como este, se dice que se cuenta con una mezcla estadística de estados. En el caso en el que se conoce el estado del sistema, $|\psi_k\rangle = |\psi\rangle$, se tiene que $w_n = 0$ si $n \neq k$ y $w_n = 1$ si $n = k$, es decir, la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|\psi\rangle$ es 1. En este caso se dice que el sistema está en un estado puro y el operador de densidad para este sistema es simplemente

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (\text{A.2})$$

En esta sección se demostrarán algunas propiedades del operador de densidad (tanto para el caso de un sistema puro, como para una mezcla estadística de estados) a partir de la definición dada por la ecuación (A.1).

Estados puros

Sea $|\psi\rangle$ el estado del sistema en cuestión. Sea $\{|\phi_i\rangle\}$ una base del sistema, completa y ortonormal, es decir, cumple que

$$\begin{aligned} \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| &= \mathbf{1}, \\ \langle \phi_i | \phi_j \rangle &= \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

El estado del sistema se puede expresar como combinación lineal de la base $\{|\phi_i\rangle\}$ como

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i a_i |\phi_i\rangle, \\ \langle\psi| &= \sum_{i'} a_{i'}^* \langle\phi_{i'}|, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

donde $a_i = \langle\phi_i|\psi\rangle$ y $a_{i'}^* = \langle\psi|\phi_{i'}\rangle$. Como $|\psi\rangle$ está normalizado se cumple que $\sum_i |a_i|^2 = 1$. Las propiedades básicas del operador de densidad que se mostrarán son:

1. El elemento diagonal ρ_{ii} es la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|\phi_i\rangle$.

Por definición, la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $|\phi_i\rangle$ es $|a_i|^2 = a_i a_i^*$. Usando las ecuaciones (A.4) se tiene que el elemento de matriz ρ_{ii} es

$$\rho_{ii} = \langle\phi_i|\rho|\phi_i\rangle = \langle\phi_i|\psi\rangle \langle\psi|\phi_i\rangle = a_i a_i^* = |a_i|^2.$$

Por lo tanto, ρ_{ii} es la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|\phi_i\rangle$.

2. $Tr(\rho) \equiv \sum_i \rho_{ii} = 1$.

De la propiedad 1 se tiene que $\rho_{ii} = |a_i|^2$, como el estado del sistema está normalizado, se cumple que $\sum_i |a_i|^2 = 1$, por lo tanto $\sum_i \rho_{ii} = 1$.

3. Si A es un observable, el valor esperado de A es:

$$\langle A \rangle = Tr(\rho A).$$

Por definición $\langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$. Usando las ecuaciones (A.4) se tiene que

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{i,i'} a_{i'}^* a_i \langle\phi_{i'}|A|\phi_i\rangle = \sum_{i,i'} \rho_{ii'} \langle\phi_{i'}|A|\phi_i\rangle \\ &= \sum_{i,i'} \langle\phi_i|\rho|\phi_{i'}\rangle \langle\phi_{i'}|A|\phi_i\rangle. \end{aligned}$$

Usando la completez de la base $\{|\phi_i\rangle\}$ se obtiene

$$\langle A \rangle = \sum_i \langle\phi_i|\rho A|\phi_i\rangle \equiv Tr(\rho A).$$

4. ρ es Hermitiano, es decir, $\rho^\dagger = \rho$.
-

ρ es Hermitiano si cada elemento ρ_{ij} cumple que $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$. Calculando estos elementos se tiene

$$\begin{aligned}\rho_{ij} &= \langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \psi \rangle \langle \psi | \phi_j \rangle = a_i a_j^*, \\ \rho_{ji} &= \langle \phi_j | \rho | \phi_i \rangle = \langle \phi_j | \psi \rangle \langle \psi | \phi_i \rangle = a_j a_i^*,\end{aligned}$$

de donde $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$.

5. Idempotencia, $\rho^2 = \rho$.

$$\rho^2 = \rho\rho = |\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle \langle \psi | = |\psi\rangle 1 \langle \psi | = |\psi\rangle \langle \psi | = \rho.$$

Mezcla estadística de estados

En este caso el operador de densidad está definido por la ecuación (A.1), donde w_k es el peso estadístico del estado $|\psi_k\rangle$.

Cada estado $|\psi_k\rangle$ se puede expresar como una combinación lineal de la base $\{|\phi_i\rangle\}$,

$$\begin{aligned}|\psi_k\rangle &= \sum_i a_i^k |\phi_i\rangle, \\ \langle \psi_k | &= \sum_{i'} a_{i'}^{k*} \langle \phi_{i'} |,\end{aligned}\tag{A.5}$$

donde $a_i^k = \langle \phi_i | \psi_k \rangle$ y $a_{i'}^{k*} = \langle \psi_k | \phi_{i'} \rangle$. Sustituyendo las ecuaciones (A.5) en la ecuación (A.1) se obtiene la representación de ρ en la base $\{|\phi_i\rangle\}$:

$$\rho = \sum_{kii'} w_k a_{i'}^{k*} a_i^k |\phi_i\rangle \langle \phi_{i'}|. \tag{A.6}$$

Usando las ecuaciones (A.3) se tiene que los elementos de matriz en esta representación son:

$$\rho_{lm} = \langle \phi_l | \rho | \phi_m \rangle = \sum_{kii'} w_k a_{i'}^{k*} a_i^k \langle \phi_l | \phi_i \rangle \langle \phi_{i'} | \phi_m \rangle = \sum_k w_k a_m^{k*} a_l^k. \tag{A.7}$$

El operador de densidad que describe a una mezcla estadística de estados tiene las siguientes propiedades:

1. Dada una base del sistema $\{|\phi_i\rangle\}$, el elemento diagonal ρ_{ii} es la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|\phi_i\rangle$.

La probabilidad de que el sistema esté en el estado $|\psi_k\rangle$ es w_k y la probabilidad de que $|\psi_k\rangle$ esté en el estado $|\phi_i\rangle$ de la base es $|a_i^k|^2$. Por lo tanto la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $|\phi_i\rangle$ es $\sum_k w_k |a_i^k|^2$. Calculando el elemento de matriz ρ_{ii} en la base $\{|\phi_i\rangle\}$:

$$\rho_{ii} = \langle \phi_i | \rho | \phi_i \rangle = \sum_k w_k \langle \phi_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_i \rangle = \sum_k w_k a_i^k a_i^{k*} = \sum_k w_k |a_i^k|^2.$$

Por lo tanto ρ_{ii} es la probabilidad de que el sistema se esté en el estado $|\phi_i\rangle$.

2. $Tr(\rho) = 1$.

En el inciso anterior se obtuvo que $\rho_{ii} = \sum_k w_k |a_i^k|^2$. Entonces, por conservación de probabilidad tenemos

$$Tr(\rho) = \sum_i \rho_{ii} = \sum_i \sum_k w_k |a_i^k|^2 = \sum_k w_k \sum_i |a_i^k|^2 = 1.$$

3. Si A es un observable, el valor esperado de A es:

$$\langle A \rangle = Tr(\rho A).$$

Como se cuenta con una mezcla estadística de estados, el valor esperado de A es la suma de los valores esperados de A en el estados puro $|\psi_k\rangle$ multiplicada por el peso estadístico correspondiente w_k [9]: $\langle A \rangle = \sum_k w_k \langle \psi_k | A | \psi_k \rangle$. Usando las ecuaciones (A.5) tenemos

$$\langle A \rangle = \sum_{kii'} w_k a_i^{k*} a_i^k \langle \phi_{i'} | A | \phi_i \rangle.$$

Con la ecuación (A.7) y usando la relación de completitud (A.3) de la base $\{|\phi_i\rangle\}$ se obtiene

$$\langle A \rangle = \sum_{ii'} \rho_{ii'} \langle \phi_{i'} | A | \phi_i \rangle = \sum_{ii'} \langle \phi_i | \rho | \phi_{i'} \rangle \langle \phi_{i'} | A | \phi_i \rangle = \sum_i \langle \phi_i | \rho A | \phi_i \rangle \equiv Tr(\rho A).$$

4. ρ es Hermitiano, es decir, $\rho^\dagger = \rho$.

De la ecuación (A.7) se tiene que

$$\begin{aligned} \rho_{ml} &= \sum_k w_k a_m^{k*} a_l^k, \\ \rho_{lm} &= \sum_k w_k a_l^{k*} a_m^k. \end{aligned}$$

Tomamos el conjugado del elemento ρ_{ml}

$$\rho_{ml}^* = \left(\sum_k w_k a_m^{k*} a_l^k \right)^* = \sum_k w_k a_m^k a_l^{k*} = \rho_{lm}.$$

Por lo que cada elemento de ρ cumple que $\rho_{ml} = \rho_{lm}^*$. Entonces ρ es Hermitiano.

5. $Tr(\rho^2) < Tr(\rho)^2$.

Suponga que la matriz de densidad ha sido transformada a su representación diagonal, siendo W_n el n -ésimo término de la diagonal, entonces

$$\begin{aligned} Tr(\rho^2) &= \sum_n W_n^2, \\ Tr(\rho)^2 &= (\sum_n W_n)^2. \end{aligned}$$

La parte derecha de la segunda ecuación siempre es mayor o igual a la parte derecha de la primera, esto por la desigualdad del triángulo. Para que se cumpla la igualdad es necesario que todas excepto una de las W_n sean iguales a cero, es decir sólo si el sistema es puro.

El significado físico de los elementos de la matriz de densidad

Como se demostró antes, dada una base ortonormal $\{|\phi_i\rangle\}$, los elementos diagonales de la matriz de densidad ρ_{ll} son la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|\phi_l\rangle$. Esto significa que si se hace la misma medición sobre $N(N \gg 1)$ sistemas con las mismas condiciones se encontrará, en promedio, que $N\rho_{11}$ sistemas se encuentran en el estado $|\phi_1\rangle$; $N\rho_{22}$ sistemas, se encuentran en el estado $|\phi_2\rangle$ etcétera. Por esta razón a los elementos diagonales de la matriz de densidad se les llama *poblaciones*.

Los elementos no diagonales de la matriz de densidad ρ_{lm} se presentaron en la ecuación (A.7),

$$\rho_{lm} = \sum_k w_k a_m^{k*} a_l^k.$$

El término $a_m^{k*} a_l^k$ es la interferencia o traslape que hay entre los estados $|\phi_m\rangle$ y $|\phi_l\rangle$ el cual aparece si el estado $|\psi_k\rangle$ es una superposición coherente de los dos estados $|\phi_m\rangle$ y $|\phi_l\rangle$. Si se tiene que $\rho_{lm} = 0$, esto significa que no hay interferencia entre los estados $|\phi_m\rangle$ y $|\phi_l\rangle$. Por lo tanto se tiene que el sistema está en una superposición coherente de la base $\{|\phi_i\rangle\}$ si [32] su matriz de densidad es no diagonal en la representación de $\{|\phi_i\rangle\}$. Por otro lado, si ρ es diagonal entonces se dice que el sistema está en una superposición incoherente de la base $\{|\phi_i\rangle\}$.

Es por esto que a los elementos no diagonales de la matriz de densidad se les llama *coherencias*. A diferencia de los elementos diagonales ρ_{ll} , los cuales son una suma de números reales positivos (probabilidades), los elementos no diagonales son una suma de números complejos, pues en general $a_m^{k*} a_l^k$ es complejo. Observe que las coherencias dependen de la base que se escoja.

La ecuación de Liouville

En esta sección se derivará la ecuación de evolución temporal del operador de densidad, la cual se conoce como la ecuación de Liouville o de Liouville-von Neumann.

La evolución en el tiempo de un estado cuántico está descrita por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.8})$$

y la ecuación de Schrödinger para el estado adjunto $\langle\psi(t)|$ es

$$-i\hbar \frac{\partial \langle\psi(t)|}{\partial t} = \langle\psi(t)| H(t). \quad (\text{A.9})$$

Si la condición inicial del sistema es $|\psi(0)\rangle$, entonces el estado del sistema al tiempo t está dado por

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t) |\psi(0)\rangle, \\ \langle\psi(t)| &= \langle\psi(0)| U^\dagger(t), \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

donde $U(t)$ es el operador de evolución temporal. Sustituyendo las ecuaciones (A.10) en las ecuaciones (A.8) y (A.9) obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial U(t)}{\partial t} |\psi(0)\rangle = H(t) U(t) |\psi(0)\rangle.$$

Lo cual se puede escribir como una ecuación de operadores

$$i\hbar \frac{\partial U(t)}{\partial t} = H(t) U(t), \quad (\text{A.11})$$

$$-i\hbar \frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t} = U^\dagger(t) H(t). \quad (\text{A.12})$$

Las ecuaciones (A.11) describen la evolución temporal para los operadores $U(t)$ y $U^\dagger(t)$, estas ecuaciones se usarán para derivar la ecuación de Liouville. Suponga que se conoce la condición inicial del operador de densidad del sistema

$$\rho(0) = \sum_k w_k |\psi(0)_k\rangle \langle\psi(0)_k|. \quad (\text{A.13})$$

El operador de densidad al tiempo t será entonces

$$\rho(t) = \sum_k w_k |\psi(t)_k\rangle \langle\psi(t)_k|. \quad (\text{A.14})$$

Usando los operadores de evolución temporal y las ecuaciones (A.13) y (A.14) se tiene que

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \sum_k w_k U(t) |\psi(0)_k\rangle \langle \psi(0)_k| U^\dagger(t) \\ &= U(t) \left(\sum_k w_k |\psi(0)_k\rangle \langle \psi(0)_k| \right) U^\dagger(t) \\ &= U(t) \rho(0) U^\dagger(t).\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\rho(t) = U(t) \rho(0) U^\dagger(t). \quad (\text{A.15})$$

Tomando la derivada parcial con respecto al tiempo en la ecuación (A.15) y usando las definiciones (A.11)

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= \frac{\partial U(t)}{\partial t} \rho(0) U^\dagger(t) + U(t) \rho(0) \frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} H(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) + U(t) \rho(0) \frac{i}{\hbar} U^\dagger(t) H(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} (H(t) \rho(t) - \rho(t) H(t)) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)].\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)]. \quad (\text{A.16})$$

La ecuación (A.16) describe la evolución temporal del operador de densidad, a esta ecuación se le conoce como la ecuación de Liouville o de Liouville-von Neumann. La ecuación (A.16) frecuentemente se escribe en la forma

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \mathcal{L}(t) \rho(t),$$

donde \mathcal{L} es el operador de Liouville que se define como $\mathcal{L}(t) \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)]$. Observe que la ecuación de Liouville no corresponde a la ecuación de movimiento de Heisenberg para un operador A en la representación de Heisenberg A_H

$$i\hbar \frac{\partial A_H(t)}{\partial t} = -[H(t), A_H(t)],$$

esta ecuación describe la evolución temporal del observable A_H . Además de la diferencia en el signo en la ecuación de Liouville con respecto a la ecuación de Heisenberg, la ecuación de Liouville es válida para el operador de densidad en la representación de Schrödinger, mientras que la ecuación de Heisenberg describe la evolución en el tiempo de operadores en la representación de Heisenberg.

A.1 El operador de densidad reducido, la traza parcial

En la introducción del operador de densidad, en la sección anterior, se encontró que el valor esperado de cualquier operador del sistema es $\langle A \rangle = Tr(\rho A)$ donde ρ es el operador de densidad del sistema. Considere ahora que el operador A_s es un operador del subsistema S, entonces por definición

$$\langle A_s \rangle = Tr(\rho(A_s \otimes 1_b)).$$

Sean $\{|s\rangle\}$ y $\{|b\rangle\}$ bases completas y ortonormales del subsistema S y B respectivamente, entonces, la ecuación anterior se puede escribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \langle A_s \rangle &= \sum_{s,s',b,b'} \langle sb|\rho|s'b'\rangle \langle s'b'| A_s \otimes 1_b|sb\rangle \\ &= \sum_{s,s',b,b'} \langle sb|\rho|s'b'\rangle \langle s'| A_s|s\rangle \langle b'| \otimes |b\rangle \\ &= \sum_{s,s',b} \langle sb|\rho|s'b\rangle \langle s'| A_s|s\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Se define el elemento de matriz $\rho_{ss'}^s$ del operador de densidad reducido del subsistema S (el cual se denotará como ρ^s) como [30]:

$$\rho_{ss'}^s \equiv \sum_b \langle sb|\rho|s'b\rangle. \quad (\text{A.18})$$

Con la definición dada en la ecuación (A.18) el valor esperado del operador A_s se puede escribir de la forma

$$\langle A_s \rangle = \sum_{s,s'} \rho_{ss'}^s \langle s'| A_s|s\rangle = Tr_s(\rho^s A_s),$$

a la operación definida en la ecuación (A.18) se le llama traza parcial, en este caso, sobre el ambiente B y se denotada por $Tr_b(\cdot)$. De la misma forma, se define el operador de densidad reducido del ambiente (denotado por ρ^b) como

$$\rho_{bb'}^b \equiv \sum_s \langle sb|\rho|s'b'\rangle.$$

En general si se tiene un sistema cuántico abierto compuesto de varios subsistemas, el operador de densidad reducido de uno de estos subsistemas se define como la traza parcial sobre los demás subsistemas del operador de densidad del sistema completo [30] y puede ser usado para describir el comportamiento del subsistema que se encuentra en interacción con los demás subsistemas.

Si se consideran operadores globales definidos por la suma

$$A = A_s + A_b,$$

entonces el valor esperado de A será

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \text{Tr}(\rho A_s + \rho A_b) = \text{Tr}(\rho A_s) + \text{Tr}(\rho A_b) \\ &= \text{Tr}_b(\rho^s A_s) + \text{Tr}_s(\rho^b A_b).\end{aligned}$$



Apéndice B

Código Computacional

B.1 Construcción de la base del espacio de Hilbert

La base del espacio de Fock está constituida por los números de ocupación de los átomos en cada uno de los sitios de la red

$$\{|n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6\rangle\}, \quad (\text{B.1})$$

donde n_i es el número de átomos en el sitio i y por conservación del número de partículas se cumple que $\sum_{i=1}^6 n_i = 6$. Como se menciona en el texto principal hay que tomar en cuenta la indistinguibilidad de las partículas al momento de escribir la base. El código para crear la base del espacio es el siguiente

```

1 cuenta = 1 # Contará el número de estados creados por el código.
2 B = zeros((462,6)) # Matriz que contendrá en sus filas la base del
   hamiltoniano en arreglos de 6 dígitos.
3
4 for i = 1:6 # Configuración 6 (genera los estados en los que hay 6 partículas
   en un sólo sitio)
5     c = zeros(6)
6     c[i] = 6
7     B[cuenta,1:6] = c
8     cuenta += 1
9 end
10
11 for i = 1:6 # Configuración 5,1 (genera los estados en los que hay 5
   partículas en un sitio y 1 en otro).
12     for j = 1:6
13         c = zeros(6)
14         if i != j
15             c[i] = 5
16             c[j] = 1

```

```
17         B[cuenta,1:6] = c
18         cuenta += 1
19     end
20 end
21 end
22
23 for i = 1:6 # configuración 4,2
24     for j = 1:6
25         if i != j
26             c = zeros(6)
27             c[i] = 4
28             c[j] = 2
29             B[cuenta,1:6] = c
30             cuenta += 1
31         end
32     end
33 end
34
35 for i = 1:6 # configuración 4,1,1
36     for j = 1:6
37         for l = 1:j-1
38             if (i != j) && (i != l)
39                 c = zeros(6)
40                 c[i] = 4
41                 c[j] = 1
42                 c[l] = 1
43                 B[cuenta,1:6] = c
44                 cuenta += 1
45             end
46         end
47     end
48 end
49
50 for i = 1:6 # configuración 3,3
51     for j = 1:6
52         if i < j
53             c = zeros(6)
54             c[i] = 3
55             c[j] = 3
56             B[cuenta,1:6] = c
57             cuenta += 1
58         end
59     end
60 end
61
62 for i = 1:6 # configuración 3,2,1
63     for j = 1:6
64         for l = 1:6
```

```
65         if (j != i) & (l != j) & (l != i)
66             c = zeros(6)
67             c[i] = 3
68             c[j] = 2
69             c[l] = 1
70             B[cuenta, 1:6] = c
71             cuenta += 1
72         end
73     end
74 end
75 end
76
77 for i = 1:6 # configuración 3,1,1,1
78     for j = 1:6
79         for k = 1:j-1
80             for l = 1:k-1
81                 if (i != j) & (i != k) & (i != l)
82                     c = zeros(6)
83                     c[i] = 3
84                     c[j] = 1
85                     c[k] = 1
86                     c[l] = 1
87                     B[cuenta,1:6] = c
88                     cuenta += 1
89                 end
90             end
91         end
92     end
93 end
94
95 for i = 1:6 # configuración 2,2,2
96     for l = 1:i-1
97         for j = 1:l-1
98             if (i != j) & (i != l) & (j != l)
99                 c = zeros(6)
100                c[i] = 2
101                c[j] = 2
102                c[l] = 2
103                B[cuenta,1:6] = c
104                cuenta += 1
105            end
106        end
107    end
108 end
109
110 for i = 1:6 # configuración 2,2,1,1
111     for j = 1:i-1
112         for k = 1:6
```

```

113         for l = 1:k-1
114             if (i != j) & (i != k) & (i != l) & (j != k) & (j
                != l) & (k != l)
115                 c = zeros(6)
116                 c[i] = 2
117                 c[j] = 2
118                 c[k] = 1
119                 c[l] = 1
120                 B[cuenta, 1:6] = c
121                 cuenta += 1
122             end
123         end
124     end
125 end
126 end
127
128 for i = 1:6 # configuración 2,1,1,1,1
129     for j = 1:6
130         for k = 1:j-1
131             for l = 1:k-1
132                 for m = 1:l-1
133                     if (i != j) & (i != k) & (i != l) & (i != m)
134                         c = zeros(6)
135                         c[i] = 2
136                         c[j] = 1
137                         c[k] = 1
138                         c[l] = 1
139                         c[m] = 1
140                         B[cuenta,1:6] = c
141                         cuenta += 1
142                     end
143                 end
144             end
145         end
146     end
147 end
148
149 c = ones(6)# configuración 1,1,1,1,1,1
150 B[cuenta, 1:6] = c
151 cuenta
152 462 # número total de estado creados.

```

Para ordenar los elementos de la base se crean los dos diccionarios $D1$ y $D2$ para identificar con un número natural del 1 al 462 a cada elemento y viceversa, identificar a cada estado con su respectivo número. Así, para saber el número asociado al estado $[2,1,1,2,0,0]$ se escribe $D2[[2,1,1,2,0,0]]$ y el estado asociado a un número m $D1[m]$

```
1 D1 = Dict(i => B[i,1:6] for i=1:462)
```

```
2 D2 = Dict(B[i,1:6] => i for i=1:462)
```

B.2 Operadores de creación y aniquilación y producto interior

Teniendo la base del espacio de Hilbert se procede a construir los elementos de matriz de los operadores involucrados en el Hamiltoniano. El código para generar las funciones de los operadores de creación y aniquilación b_i^\dagger, b_i son dos funciones b y b_t que actúan sobre vectores de estado de la misma forma que actúan los operadores de creación y aniquilación

$$\begin{aligned} b_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_6\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_6\rangle \\ b_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_6\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_6\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

```
1 function b(j,v) # Operador de aniquilación en el sitio j del estado
2   v = [n1, n2, n3, n4, n5, n6]
3   m = v[j]
4   if m != 0 # Sólo actúa en el estado cuando el número de partículas es
5     diferente de cero
6     m -= 1
7     m1 = zeros(length(v))
8     for i = 1:length(v)
9       m1[i] = v[i]
10    end
11    m1[j] = m
12    return sqrt(m+1), m1
13  else # Si el estado no tiene partículas en el sitio j la función regresa el
14    estado nulo.
15    return 0, zeros(length(v))
16  end
17 end
18 function b_t(j,v) # Operador de creación de una partícula del sitio j en el
19   estado v = [n1, n2, n3, n4, n5, n6]
20   m = v[j]
21   if (m < 6) & (m >= 0) # El operador sólo actúa en estados donde el
22     sitio j tenga menos de 6 partículas.
23     m += 1
24     m1 = zeros(length(v))
25     for i = 1:length(v)
26       m1[i] = v[i]
27     end
28     m1[j] = m
```

```

25     return sqrt(m), m1
26 else
27     return 0, [0,0,0,0,0,0]
28 end
29 end
30
31 function pdot(a,b) # Se define el producto interior entre dos kets en la base
    de número.
32     n = 1.0
33     for i = 1:length(a)
34         if a[i] == b[i]
35             n *= 1
36         else
37             n *= 0
38         end
39     end
40     return n
41 end

```

B.3 Construcción del Hamiltoniano

El Hamiltoniano del sistema está dado por la ecuación (3.1), el cual está construido en términos de los operadores de creación y aniquilación definidos antes. Para calcular los elementos de matriz en esta base se usan las funciones definidas antes. Por ejemplo para el operador de número del tercer sitio N_3 se tiene que

$$N_{3,n,m} = \langle n | b_i^\dagger b_i | m \rangle, \quad (\text{B.3})$$

donde el estado n está guardado en la matriz B como $B[n, 1 : 6]$ y la función `pdot()` realiza la operación de producto interior en el espacio. Dado un valor para J_x y para U los operadores que están involucrados en el Hamiltoniano son

```

1 Jx = 66 # (Unidades: Hz), ħ = 1
2 U = 103 # (Unidades: Hz), ħ = 1
3
4 N_1 = Diagonal(zeros(462,462)) # Se construyen los operadores de
    número de cada sitio  $N_i = b_i^\dagger b_i$  los cuales son diagonales en esta base.
5 N_2 = Diagonal(zeros(462,462))
6 N_3 = Diagonal(zeros(462,462))
7 N_4 = Diagonal(zeros(462,462))
8 N_5 = Diagonal(zeros(462,462))
9 N_6 = Diagonal(zeros(462,462));
10

```

```

11 for i in 1:462 # Se calculan los elementos de matriz de cada operador de
    número.
12     N_1[i,i] = pdot(B[i,1:6],b_t(1,b(1,B[i,1:6])[2])[2])*(b
        (1,B[i,1:6])[1])*(b_t(1,b(1,B[i,1:6])[2])[1])
13     N_2[i,i] = pdot(B[i,1:6],b_t(2,b(2,B[i,1:6])[2])[2])*(b
        (2,B[i,1:6])[1])*(b_t(2,b(2,B[i,1:6])[2])[1])
14     N_3[i,i] = pdot(B[i,1:6],b_t(3,b(3,B[i,1:6])[2])[2])*(b
        (3,B[i,1:6])[1])*(b_t(3,b(3,B[i,1:6])[2])[1])
15     N_4[i,i] = pdot(B[i,1:6],b_t(4,b(4,B[i,1:6])[2])[2])*(b
        (4,B[i,1:6])[1])*(b_t(4,b(4,B[i,1:6])[2])[1])
16     N_5[i,i] = pdot(B[i,1:6],b_t(5,b(5,B[i,1:6])[2])[2])*(b
        (5,B[i,1:6])[1])*(b_t(5,b(5,B[i,1:6])[2])[1])
17     N_6[i,i] = pdot(B[i,1:6],b_t(6,b(6,B[i,1:6])[2])[2])*(b
        (6,B[i,1:6])[1])*(b_t(6,b(6,B[i,1:6])[2])[1])
18 end
19
20 N = Diagonal((N_1*(N_1-eye(462,462))) + (N_2*(N_2-eye(462,462)))
    + (N_3*(N_3-eye(462,462))) + (N_4*(N_4-eye(462,462))) + (N_5
    *(N_5-eye(462,462))) + (N_6*(N_6-eye(462,462))));
21
22 A12 = zeros(462,462) # se construyen los operadores de intercambio de
    partículas entre sitios vecinos  $A_{ij} = b_i^\dagger b_j$ 
23 A23 = zeros(462,462)
24 A34 = zeros(462,462)
25 A45 = zeros(462,462)
26 A56 = zeros(462,462);
27
28 for i = 1:462
29     for j = 1:462
30         A12[i,j] = pdot(B[i,1:6],b_t(1,b(2,B[j,1:6])[2])[2])*(b
            (2,B[j,1:6])[1])*(b_t(1,b(2,B[j,1:6])[2])[1])
31         A23[i,j] = pdot(B[i,1:6],b_t(2,b(3,B[j,1:6])[2])[2])*(b
            (3,B[j,1:6])[1])*(b_t(2,b(3,B[j,1:6])[2])[1])
32         A34[i,j] = pdot(B[i,1:6],b_t(3,b(4,B[j,1:6])[2])[2])*(b
            (4,B[j,1:6])[1])*(b_t(3,b(4,B[j,1:6])[2])[1])
33         A45[i,j] = pdot(B[i,1:6],b_t(4,b(5,B[j,1:6])[2])[2])*(b
            (5,B[j,1:6])[1])*(b_t(4,b(5,B[j,1:6])[2])[1])
34         A56[i,j] = pdot(B[i,1:6],b_t(5,b(6,B[j,1:6])[2])[2])*(b
            (6,B[j,1:6])[1])*(b_t(5,b(6,B[j,1:6])[2])[1])
35     end
36 end
37
38 A21 = transpose(A12) # Estos operadores tienen elementos reales y por lo
    tanto  $A_{ij}$  es el transpuesto de  $A_{ji}$ 
39 A32 = transpose(A23)
40 A43 = transpose(A34)

```

```

41 A54 = transpose(A45)
42 A65 = transpose(A56);
43
44 A = A12 + A23 + A34 + A45 + A56 + A21 + A32 + A43 + A54 + A65; #
    Correspondiente a la primera parte del Hamiltoniano
45
46 H = -Jx*A + (U/2)*N # Hamiltoniano del sistema en la base de número.

```

B.4 Diagonalización del Hamiltoniano

Para realizar la diagonalización del Hamiltoniano se usa una función nativa del lenguaje Julia llamada `eigfact`¹, la cual recibe una matriz cuadrada A y regresa un objeto F que contiene los autovalores de A en $F[:values]$ y los autovectores en las columnas de la matriz $F[:vectors]$. `eigfact` es una función contenida en el paquete LAPACK² (Linear Algebra PACKage), el cual provee subrutinas para la solución de sistemas de ecuaciones simultaneas lineales, solución por mínimo cuadrados de sistemas de ecuaciones lineales, problemas de valores propios y valores singulares. Así el k -ésimo vector puede ser obtenido de la forma $F[:vectors][:, k]$ mientras que el k -ésimo valor propio es $F[:values][k]$

```

1 F = eigfact(H) # F contiene la factorización espectral de H.
2
3 for i = 1:462
4     H[i,i] = F[:values][i]
5 end
6 H = Diagonal(H) # Hamiltoniano diagonalizado (con sus eigenvalores en la
    diagonal)
7 P = F[:vectors]; # Matriz de cambio de base constituida por los vectores
    propios de H
8 P1 = inv(P); # P1 es la inversa de P de tal forma que P*A*P1 es la
    representación en la base de la energía de un operador A en la base de
    número.

```

Cada uno de los estados construidos en la matriz B se corresponde con un vector canónico de 462 entradas donde la m -ésima entrada es 1 y el resto cero. Esta representación matricial de los estados se construye en la matriz n la representación matricial de los elementos de la base en el espacio de Fock. En la matriz e se almacenan los elementos de la base de Fock en la representación de la energía.

```

1 n = eye(462,462); # estados en la base de número de partículas.
2 e = P1*n; # Estados de la base de Fock en la representación de la
    energía(vectores columna)

```

¹Para más detalles de la función ver la documentación directamente en la página <https://docs.julialang.org/en/release-0.4/stdlib/linalg>.

²<http://www.netlib.org/lapack/>

El estado del sistema al tiempo t se escribe de la siguiente forma

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \langle E_n | \Psi(0) \rangle e^{-iE_n t} |E_n\rangle, \quad (\text{B.4})$$

en la cual se ha tomado $\hbar = 1$. Y se divide el tiempo por el factor 10^3 para medir el tiempo en milisegundos.

```

1 function psi(t,psi_0,eigenvals,eigenvecs) # psi() es una función que
    toma como argumentos al tiempo t, el estado inicial del sistema psi0, un
    vector con los valores propios del Hamiltoniano eigenvals y una matriz que
    contiene en sus columnas los vectores propio de H.
2     sum = zeros(length(eigenvals))
3     for n = 1:length(eigenvals)
4         sum += dot(eigenvecs[:,n],psi_0)*exp(-im*eigenvals[n]*(t
            /1000))*eigenvecs[:,n]
5     end
6     return sum
7 end

```

Dado que el sistema se encuentra en un estado puro, la matriz de densidad para cualquier tiempo t está dada por

$$\rho(t) = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (\text{B.5})$$

```

1 function rho(t,psi_0,eigenvals,eigenvecs)
2     x = psi(t,psi_0,eigenvals,eigenvecs)
3     return kron(x',x)
4 end

```

Hasta este punto, se pueden usar las funciones ya definidas y la diagonalización del Hamiltoniano para calcular valores esperados de diferentes operadores usando simplemente la ecuación

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$$

Por ejemplo una cantidad que se puede calcular, es la evolución en el tiempo del valor esperado de los operadores de número, ver Figura 3.4.

$$\langle N_i(t) \rangle = \text{Tr}(\rho(t) N_i)$$

```

1
2 m = D2[[1,1,1,1,1,1]] # Estado inicial del sistema
3 delta_t = 0:0.5:16 # intervalo de t
4 t_s = [t for t in delta_t]

```

```

5
6 graf_1 = [trace(rho(t,e[:,m],F[:values],P)*(P1*N_1*P)) for t =
  delta_t];
7 graf_2 = [trace(rho(t,e[:,m],F[:values],P)*(P1*N_2*P)) for t =
  delta_t];
8 graf_3 = [trace(rho(t,e[:,m],F[:values],P)*(P1*N_3*P)) for t =
  delta_t];
9 graf_4 = [trace(rho(t,e[:,m],F[:values],P)*(P1*N_4*P)) for t =
  delta_t];
10 graf_5 = [trace(rho(t,e[:,m],F[:values],P)*(P1*N_5*P)) for t =
  delta_t];
11 graf_6 = [trace(rho(t,e[:,m],F[:values],P)*(P1*N_6*P)) for t =
  delta_t];

```

Hasta este punto no se pueden calcular valores esperados para subsistemas pues necesitamos la matriz de densidad que describa el estado de un subsistema considerando la interacción al resto del sistema como un baño térmico. Para esto se calcula la matriz de densidad reducida para diferentes subsistema.

B.5 La traza parcial

B.5.1 Matriz reducida de un sitio

Como se demostró en el texto principal, la matriz de densidad reducida para un sitio tiene un forma muy sencilla pues es diagonal y de dimension 7×7 . En este caso se define una función *partial_trace* que recibe como argumentos la matriz de densidad del sistema completo ρ y un arreglo X que contiene en su primer entrada todos los elementos que aportan al estado de cero partículas en el sitio, en el segundo elemento contiene todos los estados que aportarán al estado de una partícula en el sitio... etc.

```

1 function partial_trace(rho_t,X)
2
3     r0 = 0 # Poblaciones de la matriz de densidad reducida
4     r1 = 0
5     r2 = 0
6     r3 = 0
7     r4 = 0
8     r5 = 0
9     r6 = 0
10    x0 = X[1] # Contiene todos los estados del sistema completo que aportan
  al estado de 0 partículas en el sitio.
11    x1 = X[2]
12    x2 = X[3]
13    x3 = X[4]
14    x4 = X[5]

```

```

15     x5 = X[6]
16     x6 = X[7]
17
18     for i = 1:length(x0) # Se suman todas las aportaciones de los estados
19         para cada población.
20         r0 += rho_t[x0[i],x0[i]]
21     end
22     for i = 1:length(x1)
23         r1 += rho_t[x1[i],x1[i]]
24     end
25     for i = 1:length(x2)
26         r2 += rho_t[x2[i],x2[i]]
27     end
28     for i = 1:length(x3)
29         r3 += rho_t[x3[i],x3[i]]
30     end
31     for i = 1:length(x4)
32         r4 += rho_t[x4[i],x4[i]]
33     end
34     for i = 1:length(x5)
35         r5 += rho_t[x5[i],x5[i]]
36     end
37     for i = 1:length(x6)
38         r6 += rho_t[x6[i],x6[i]]
39     end
40     rho_3_red = zeros(7,7)
41     rho_3_red[1,1] = real(r0)
42     rho_3_red[2,2] = real(r1)
43     rho_3_red[3,3] = real(r2)
44     rho_3_red[4,4] = real(r3)
45     rho_3_red[5,5] = real(r4)
46     rho_3_red[6,6] = real(r5)
47     rho_3_red[7,7] = real(r6)
48
49     return rho_3_red = Diagonal(rho_3_red) # La función regresa la
50         matriz de densidad reducida del sitio.
51 end

```

Por ejemplo, para el sitio 3 que se trata en el texto principal la construcción del arreglo X es de la siguiente manera

```

1 x0 = []
2 x1 = []
3 x2 = []
4 x3 = []
5 x4 = []
6 x5 = []

```

```

7 x6 = []
8 for j = 1:462
9     if D1[j][3] == 0 # Se usa el diccionario D1[j] para identificar si el
        elemento j-ésimo de la base contiene un cero en el sitio 3. Si es así este
        elemento se almacena en x0.
10         push!(x0,j)
11     elseif D1[j][3] == 1
12         push!(x1,j)
13     elseif D1[j][3] == 2
14         push!(x2,j)
15     elseif D1[j][3] == 3
16         push!(x3,j)
17     elseif D1[j][3] == 4
18         push!(x4,j)
19     elseif D1[j][3] == 5
20         push!(x5,j)
21     elseif D1[j][3] == 6
22         push!(x6,j)
23     end
24 end
25 X = [x0,x1,x2,x3,x4,x5,x6];

```

En el siguiente código se muestra cómo se aplicaron estas funciones para el cálculo de la matriz de densidad reducida del sitio 3 para los primeros 100 ms de evolución.

```

1 m = D2[[1,1,1,1,1,1]] # Estado inicial del sistema.
2
3 r00 = [] # Poblaciones de matriz de densidad reducida
4 r11 = []
5 r22 = []
6 r33 = []
7 r44 = []
8 r55 = []
9 r66 = []
10
11 for t = 0:0.5:100
12     rho_3 = partial_trace(P*rho(t,e[:,m],F[:values],P)*P1,X) # Se
        usa la función de traza parcial para calcular las poblaciones en la base de
        Fock y así observar la evolución de las poblaciones.
13     push!(r00,rho_3[1,1])
14     push!(r11,rho_3[2,2])
15     push!(r22,rho_3[3,3])
16     push!(r33,rho_3[4,4])
17     push!(r44,rho_3[5,5])
18     push!(r55,rho_3[6,6])
19     push!(r66,rho_3[7,7])

```

20 end

B.5.2 Matriz reducida de dos sitios

Para el caso de dos y tres sitios no todos los elementos fuera de la diagonal son nulos. Como se explicó esto depende del número de partículas de los dos elementos de la base del subsistema. Así para estos dos casos se comienza por construir la base del subsistema. En este caso esta base contiene 28 elementos.

```

1 Base_12 = [[6,0], [0,6], [5,1], [1,5], [4,2], [2,4], [3,3],
2 [5,0], [0,5], [4,1], [1,4], [3,2], [2,3],
3 [4,0], [0,4], [3,1], [1,3], [2,2],
4 [3,0], [0,3], [2,1], [1,2],
5 [2,0], [0,2], [1,1],
6 [1,0], [0,1],
7 [0,0]];

```

Se prosigue identificando todos los elementos de la base del sistema completo que aportarán a cada uno de los elementos de la base del subsistema.

```

1 Edos_contr = [] # Edoscontr juega el papel del arreglo X que se usó para el
   caso de un sitio.
2 for j = 1:length(Base_12)
3     Edo_j = []
4     for i = 1:462
5         if (Base_12[j] == D1[i][1:2])
6             push!(Edo_j,i)
7         end
8     end
9     push!(Edos_contr,Edo_j)
10 end

```

Por último, el código con el que se construye la matriz de densidad reducida es el siguiente.

```

1 m = D2[[1,1,1,1,1,1]] # Estado inicial del sistema
2
3 for t = 0:0.5:100
4     r12 = complex(zeros(28,28))
5     rho_t_fock = load("sistema-completo/rho_$.jld", "rho_t")
6     rho_t = P*rho_t_fock*P1
7
8     for i = 1:length(Base_12)
9         for j = 1:length(Base_12)
10            qi = sum(Base_12[i])
11            qj = sum(Base_12[j])

```

```

12         if (qi == qj) # El número de partículas de los dos estados de
13             la base del subsistema es igual.
14             for k = Edos_contr[i]
15                 for l = Edos_contr[j]
16                     if (D1[k][3:6] == D1[l][3:6]) # Sólo se
17                         suman los estados diagonales del resto del sistema.
18                         r12[i,j] += rho_t[k,l]
19                     end
20                 end
21             end
22         end
23     save("subsistema_12/sub12_t_$.jld", "r12", r12) # Se almacena
24     # Se almacena cada matriz al tiempo t.
25 end

```

B.5.3 Matriz reducida de tres sitios

Para el caso de un subsistema con tres sitios se realizan los mismos pasos que en el caso anterior. Se construye la base del subsistema que en este caso consta de 84 elementos.

```

1 Base_123 = [[6,0,0],[0,6,0],[0,0,6],[5,1,0],[5,0,1], # Base del
2     subsistema de 3 sitios.
3     [1,5,0],[0,5,1],[1,0,5],[0,1,5],[4,2,0],[4,0,2]
4     , [2,4,0],[0,4,2],[2,0,4],[0,2,4],[4,1,1],[1,4,1]
5     , [1,1,4],[3,3,0],[3,0,3],[0,3,3],[3,2,1]
6     , [3,1,2],[1,2,3],[2,1,3],[1,3,2],[2,3,1],[2,2,2]
7     , [5,0,0],[0,5,0],[0,0,5],[4,1,0],[4,0,1],[1,4,0]
8     , [0,4,1],[0,1,4],[1,0,4],[3,2,0],[3,0,2]
9     , [2,3,0],[0,3,2],[0,2,3],[2,0,3],[3,1,1],[1,3,1]
10    , [1,1,3],[2,2,1],[2,1,2],[1,2,2]
11    , [4,0,0],[0,4,0],[0,0,4],[3,1,0],[3,0,1],[1,3,0]
12    , [0,3,1],[1,0,3],[0,1,3],[2,2,0]
13    , [2,0,2],[0,2,2],[2,1,1],[1,2,1],[1,1,2]
14    , [3,0,0],[0,3,0],[0,0,3],[2,1,0],[2,0,1],[1,2,0]
15    , [0,2,1],[1,0,2],[0,1,2],[1,1,1]
16    , [2,0,0],[0,2,0],[0,0,2],[1,1,0],[0,1,1],[1,0,1]
17    , [1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]
18    , [0,0,0]];

```

Para cada uno de los elementos de la base del subsistema se crea un arreglo que contiene a todos los elementos de la base del sistema completo que aparecerán en la traza parcial sobre los tres restantes sitios.

```

1 base_Q = []
2 for Q = 1:84
3     Q_n = []
4     for i = 1:462
5         if (Base_123[Q] == D1[i][1:3])
6             push!(Q_n,i)
7         end
8     end
9     push!(base_Q,Q_n)
10 end

1 m = D2[[1,1,1,1,1,1]] # Estado inicial del sistema
2
3 for t = 0:0.5:100
4     r123 = complex(zeros(84,84))
5     rho_t_fock = load("sistema-completo/rho_$.jld", "rho_t")
6     rho_t = P*rho_t_fock*P1
7
8     for i = 1:84
9         for j = 1:84
10            qi = sum(Base_123[i])
11            qj = sum(Base_123[j])
12            if (qi == qj) # Una condición necesaria para que el elemento ij
13                # sea diferente de cero es que la suma de las partículas de los
14                # estados i y j coincida.
15                for k = base_Q[i]
16                    for l = base_Q[j]
17                        if (D1[k][4:6] == D1[l][4:6]) # Los estados
18                            # que aportan al elemento ij son aquellos que son
19                            # diagonales en el resto del sistema.
20                            r123[i,j] += rho_t[k,l] #
21                        end
22                    end
23                end
24            end
25        end
26    end
27    save("subsistema_123_prueba/sub123_t_$.jld", "r123", r123)
28 end

```

B.6 Cálculo de las ocupaciones en un ensemble térmico

Uno de los métodos para realizar el cálculo de las ocupaciones de algún subsistema predichas por un ensemble térmico es la construcción de los operadores de proyección $|n_1 n_2 n_3 n_4 n_5 n_6\rangle \langle n_1 n_2 n_3 n_4 n_5 n_6|$ de todos los estados del sistema completo que cumplan que en los sitios del subsistema que se está analizando

tengan un número determinado de partículas.

Por ejemplo, en el caso del subsistema de tres sitios se tiene que los primeros 28 elementos de la base del subsistema contribuyen a la probabilidad de ocupación P_6 pues en todos ellos el subsistema tiene 6 partículas. Para el caso en el que esos tres sitios sean los primeros tres tendremos entonces que

$$P_6 = \sum_{n_1+n_2+n_3=6} = |n_1n_2n_3n_4n_5n_6\rangle \langle n_1n_2n_3n_4n_5n_6|. \quad (\text{B.6})$$

De manera análoga para las ocupaciones restantes tenemos que

$$P_n = \sum_{n_1+n_2+n_3=n} = |n_1n_2n_3n_4n_5n_6\rangle \langle n_1n_2n_3n_4n_5n_6|. \quad (\text{B.7})$$

Y teniendo la matriz de densidad del ensemble térmico $\rho_{ij}^T = \delta_{ij}e^{E_i/k_bT}$ se tiene que la probabilidad de ocupación de un número n de partículas en el subsistema de tres sitios es

$$\langle P_n \rangle = \frac{\text{Tr}(\rho^T P_n^e)}{Z}, \quad (\text{B.8})$$

donde $Z = \sum_i e^{E_i/k_bT}$ es la función de partición y el superíndice e en el operador de proyección indica que este se encuentra en la base de la energía.

En las siguientes líneas de código se muestra la construcción de estos operadores de proyección para el subsistema de tres sitios.

```

1 Ocupacion_6_123 = complex(zeros(462,462))
2 for j = 1:28
3     for i = 1:length(base_Q[j]) # baseQ[1:28] contiene todos los estados
4         del sistema completo que en los primeros tres sitios contienen 6
5             partículas.
6             Ocupacion_6_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][
7                 i]])
8     end
9 end
10 Ocupacion_5_123 = complex(zeros(462,462))
11 for j = 29:49
12     for i = 1:length(base_Q[j]) # baseQ[29:49] contiene todos los
13         estados del sistema completo que en los primeros tres sitios contienen 5
14             partículas.

```

```

11         Ocupacion_5_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][
12             i]])
13     end
14
15     Ocupacion_4_123 = complex(zeros(462,462))
16     for j = 50:64
17         for i = 1:length(base_Q[j])
18             Ocupacion_4_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][
19                 i]])
20         end
21
22     Ocupacion_3_123 = complex(zeros(462,462))
23     for j = 65:74
24         for i = 1:length(base_Q[j])
25             Ocupacion_3_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][
26                 i]])
27         end
28
29     Ocupacion_2_123 = complex(zeros(462,462))
30     for j = 75:80
31         for i = 1:length(base_Q[j])
32             Ocupacion_2_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][
33                 i]])
34         end
35
36     Ocupacion_1_123 = complex(zeros(462,462))
37     for j = 81:83
38         for i = 1:length(base_Q[j])
39             Ocupacion_1_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][
40                 i]])
41         end
42
43     Ocupacion_0_123 = complex(zeros(462,462))
44     j = 84
45     for i = 1:length(base_Q[j])
46         Ocupacion_0_123 += kron(n[:,base_Q[j][i]]',n[:,base_Q[j][i]])
47     end
48
49
50     P0_123 = P1*Ocupacion_0_123*P # Se escriben los operadores de proyección
51     P1_123 = P1*Ocupacion_1_123*P # en la base de la energía.
52     P2_123 = P1*Ocupacion_2_123*P

```

```

53 P3_123 = P1*Ocupacion_3_123*P
54 P4_123 = P1*Ocupacion_4_123*P
55 P5_123 = P1*Ocupacion_5_123*P
56 P6_123 = P1*Ocupacion_6_123*P
57 B_123 = [P0_123,P1_123,P2_123,P3_123,P4_123,P5_123,P6_123]; #
      B123 contiene en cada una de sus entradas los operadores de proyección para
      0,1,2...6 partículas en el subsistema.

```

Ahora que se tienen los operadores de proyección del subsistema se procede a definir las funciones con las que se calculará su valor esperado. La función $\text{rho_canonico}(T,H)$ toma como argumento la temperatura del ensemble y el Hamiltoniano diagonalizado del sistema completo y construye la matriz de densidad térmica. Después, $\text{val_canonico}(A,T)$ es una función que calcula el valor esperado de un operador A con la matriz de densidad térmica y por último $\text{vals_canonico}(B = [A1,A2,A3...An],T)$ realiza lo mismo que val_canonico pero para un arreglo de operadores como el construido con los operadores de proyección.

```

1 function rho_canonico(T, Ham = H) # construye el operador de densidad
      del ensemble canónico con temperatura T y energías H[i,i].
2     rho_can = zeros(462,462)
3     for i =1:462
4         rho_can[i,i] = exp(-H[i,i]/T)
5     end
6     return(Diagonal(rho_can))
7 end
8
9 function val_canonico(A,T) # Calcula el valor esperado de un operador A
10    return(trace(A*(rho_canonico(T)))/trace(rho_canonico(T)))
11 end
12
13 vals_canonico(A,T) = real(val_canonico.(A,T))

```

Para calcular la temperatura efectiva del ensemble canónico se hace un ajuste a los valores calculados por la matriz de densidad del subsistema. Si es el vector que contiene la probabilidad de ocupación de n partículas en el sistema al tiempo t entonces se hace el ajuste sobre el promedio de cada una de estas ocupaciones.

```

1 Y_123 = [mean(p0_123[20:201]),mean(p1_123[20:201]),mean(p2_123
      [20:201]),mean(p3_123[20:201]),
2 mean(p4_123[20:201]),mean(p5_123[20:201]),mean(p6_123[20:201])]
3 bar([0,1,2,3,4,5,6],Y_123)

```

Para encontrar el ajuste a los promedios de ocupación anteriores se usa el paquete `LsqFit`³ de Julia, el cual trabaja con el algoritmo Levenberg-Marquardt

³<https://github.com/JuliaNLSolvers/LsqFit.jl>

que es usado para la solución de mínimos cuadrados no lineales. Estos problemas de minimización surgen especialmente en el ajuste de curvas de mínimos cuadrados como en este caso.

La función `curve_fit(f,x,y,b0)` toma como argumentos una función f a la cual se quiere ajustar los datos contenidos en el arreglo y cuando f se evalúa en los elementos del arreglo x . El arreglo $b0$ contiene una propuesta de los parámetros que se ajustarán. Para nuestro caso la función se escribe de la siguiente forma

```
1 T0 = [400.0] # (Hz) Temperatura inicial propuesta
2 fit = curve_fit(vals_canonico,B_123,Y_123,T0).
```

`fit` es un objeto que contiene diferentes cantidades como `fit.param` que son los mejores parámetros para el ajuste en `fit.dof` los grados de libertad y en `fit.resid` el vector de residuales.

Bibliografía

- [1] W. S. Bakr, J. I. Gillen, P. Amy, F. Simon, and M. Greiner. A quantum gas microscope for detecting single atoms in a Hubbard-regime optical lattice. *Nature*, 462(7269):74–77, November 2009.
- [2] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. Eric Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner. Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system. *Nature*, 528(7580):77–83, December 2015.
- [3] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, and S. Kuhr. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. *Nature*, 467(7311):68–72, September 2010.
- [4] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. *Nature*, 452(6828):454–458, April 2008.
- [5] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss, and M. Greiner. Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system. *Science*, 353(6301):794–800, August 2016.
- [6] J. M. Deutsch, H. Li, and A. Sharma. Microscopic origin of thermodynamic entropy in isolated systems. *Phys. Rev. E*, 87:042135, April 2013.
- [7] L. F. Santos, A. Polkovnikov, and M. Rigol. Weak and strong typicality in quantum systems. *Phys. Rev. E*, 86:010102, July 2012.
- [8] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva, and M. Vengalattore. Colloquium. *Rev. Mod. Phys.*, 83:863–883, August 2011.
- [9] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, New York, Revised edition edition, 1994.
- [10] L. D’Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, and M. Rigol. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, 65(3):239–362, July 2016.
- [11] A. C. Cassidy, C. W. Clark, and M. Rigol. Generalized Thermalization in an Integrable Lattice System. *Phys. Rev. Lett.*, 106:140405, April 2011.

-
- [12] P. Calabrese and J. Cardy. Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005(04):P04010, April 2005.
- [13] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral. Entanglement in many-body systems. *Rev. Mod. Phys.*, 80:517–576, May 2008.
- [14] A. J. Daley, H. Pichler, J. Schachenmayer, and P. Zoller. Measuring Entanglement Growth in Quench Dynamics of Bosons in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 109:020505, July 2012.
- [15] J. Schachenmayer, B. P. Lanyon, C. F. Roos, and A. J. Daley. Entanglement Growth in Quench Dynamics with Variable Range Interactions. *Phys. Rev. X*, 3:031015, September 2013.
- [16] R. Nandkishore and D. A. Huse. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, pages 15–38.
- [17] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, March 1958.
- [18] M. Srednicki. Chaos and Quantum Thermalization. *Phys Rev E* 50, pages 888–901, August 1994.
- [19] J. M. Deutsch. Quantum statistical mechanics in a closed system. *Phys. Rev. A*, 43:2046–2049, February 1991.
- [20] M. Rigol and M. Srednicki. Alternatives to Eigenstate Thermalization. *Phys. Rev. Lett.*, 108:110601, March 2012.
- [21] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. *Nature*, 452:854–858, June 2009.
- [22] R. K. Pathria and P. D. Beale. *Statistical mechanics*. Elsevier, Burlington USA, third edition, 2011.
- [23] I. Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nat Phys*, 1(1):23–30, October 2005.
- [24] P. Zupancic, P. M. Preiss, R. Ma, A. Lukin, M. E. Tai, M. Rispoli, R. Islam, and M. Greiner. Ultra-precise holographic beam shaping for microscopic quantum control. *Opt. Express* 24(13), 13881-13893 (2016), June 2016.
- [25] R. N. Palmer, C. Moura Alves, and D. Jaksch. Detection and characterization of multipartite entanglement in optical lattices. *Phys. Rev. A*, 72:042335, Oct 2005.
- [26] R. Islam, Ma. Ruichao, M.P. Preiss, E.M. Tai, A. Lukin, R. Matthew, and G. Markus. Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system. *Nature*, 528(7580):77–83, December 2015.
-

-
- [27] R. Horodecki and M. Horodecki. Information-theoretic aspects of inseparability of mixed states. *Phys. Rev. A*, 54:1838–1843, September 1996.
- [28] J. R. Garrison and T. Grover. Does a single eigenstate encode the full hamiltonian? *arXiv preprint arXiv:1503.00729*, December 2015.
- [29] T. Grover and M. P. Fisher. Entanglement and the sign structure of quantum states. *Physical Review A*, 92(4), October 2015.
- [30] G. Mahler and V. A. Webberrub. *Quantum networks: dynamics of open nanostructures*. Springer, New York, 1998.
- [31] K. Blum. *Density matrix theory and applications*, volume 64. Springer Science & Business Media, 2012.
- [32] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, and B. Crasemann. *Quantum mechanics*. American Association of Physics Teachers, 1998.
-